

Elementy fizyki atomowej

- 1) Orbitalny moment magnetyczny elektronu, spin i spinowy moment magnetyczny elektronu efekt Zeemana oraz doświadczenie Sterna-Gerlacha.
- 2) Atom wieloelektronowy (ekranowanie ładunku jądra, zakaz Pauliego, układ okresowy pierwiastków)

Orbitalny moment magnetyczny elektronu –rozważania klasyczne

Z elektronem o masie m_e i ładunku e poruszającym się po zamkniętej orbicie wiążemy prąd elektryczny o natężeniu

$$I = \frac{|e|}{T} = \frac{|e|V}{2\pi r}$$

r -promień orbity, V -prędkość elektronu .

Z prądem płynącym w zamkniętym obwodzie w kształcie ramki o polu powierzchni A wiążemy (orbitalny) moment magnetyczny o wartości

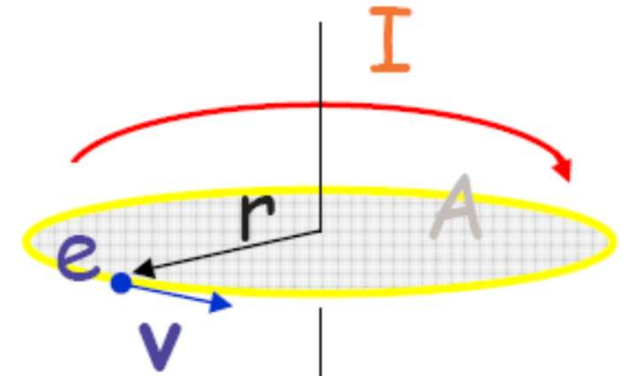
$$|\vec{\mu}_l| = IA$$

Kierunek wektora momentu magnetycznego jest prostopadły do płaszczyzny ramki.

Widać iż wartość orbitalnego momentu magnetycznego wytwarzanego przez elektron poruszający się po orbicie jest równy

$$|\vec{\mu}_l| = IA = \frac{|e|V}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{|e|Vr}{2} = \frac{|e|}{2m_e} m_e Vr = \frac{|e|}{2m_e} |\vec{L}| \quad \vec{L} \text{ —moment pędu elektronu}$$

Przyjmuje się iż $\vec{\mu}_l = -\frac{|e|}{2m_e} \vec{L}$



Energia momentu magnetycznego w polu magnetycznym

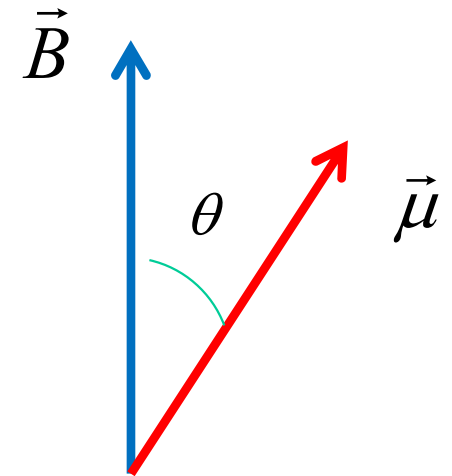
Z momentem magnetycznym $\vec{\mu}$ umieszczonym w zewnętrznym polu magnetycznym opisanym przez wektor indukcji magnetycznej $\vec{B}$ związana jest energia równa

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Przy polu skierowanym wzdłuż osi OZ jest ona równa

$$E = -\mu_z B_z$$

Konfiguracją o najniższej energii tego momentu jest konfiguracja w którym moment ten jest skierowany równoległe do wektora indukcji pola magnetycznego (czyli rzut momentu magnetycznego μ_z na oś OZ jest dodatni).



Siła działająca na moment magnetyczny w polu niejednorodnym

W polu magnetycznym niejednorodnym o indukcji skierowanej wzdłuż osi Oz na moment magnetyczny działa siła w kierunku wyznaczonym przez zwrot osi Oz układu współrzędnych, której zwrot i wartość zależy od składowej z-owej gradientu indukcji pola magnetycznego dB/dz i rzutu momentu magnetycznego na oś Oz μ_z

$$F_z = \mu_z \frac{dB}{dz}$$

Orbitalny moment magnetyczny elektronu –rozważania kwantowe

Orbitalny moment magnetyczny elektronu jest operatorem związanym z operatorem orbitalnego momentu pędu relacją wyprowadzoną w ujęciu klasycznym

$$\hat{\vec{\mu}}_l = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \hat{\vec{L}} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\vec{L}}$$

Wartości własne operatora kwadratu momentu pędu

$$|\vec{L}|^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad \text{gdzie } l=0,1,2,\dots$$

czyli długość wektora momentu pędu może być równa $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

W wyniku określenia długości momentu magnetycznego można otrzymać jedynie następujące wartości

$$|\vec{\mu}_l| = \left(\frac{|e|\hbar}{2m_e} |\vec{L}| \right) = \left(\frac{|e|\hbar}{2m_e} \right) \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

gdzie $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ -magneton Bohra (elementarna jednostka momentu magnetycznego)

W wyniku pomiaru rzutu momentu pędu elektronu na oś Oz można otrzymać jedynie wartości równe

$$L_z = \hbar m \quad \text{gdzie } m = -l, -l+1, \dots, l-1, l \text{ – magnetyczna liczba kwantowa}$$

W wyniku pomiaru rzutu momentu magnetycznego elektronu na oś OZ można otrzymać jedynie $2l+1$ następujących wartości

$$\mu_{lz} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} L_z = -\left(\frac{|e|\hbar}{2m_e}\right) m = -\mu_B m$$

gdzie $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ -magneton Bohra

Liczba różnych wartości rzutu momentu magnetycznego związanego z orbitalnym momentem pędu na os Oz jest liczbą nieparzystą

Zapisane relacje obowiązują również przy analizie momentu orbitalnego magnetycznego atomu wieloelektronowego (o niezbyt dużej liczbie atomowej Z), przy czym wówczas liczby l i m dotyczą operatorów $\hat{L}_z$ i $\hat{L}^2$ związanych z orbitalnym momentem pędu całego atomu do którego wnoszą wkład elektrony z całkowicie niezapełnionych powłok elektronowych.

Czasami liczby l , m oznacza się w tym przypadku dużymi literami L, M .

Efekt Zeemana

Rozszczepienie linii widmowych promieniowania emitowanego przez atom umieszczony w polu magnetycznym wynikające z rozszczepienia poziomów energetycznych atomu wywołanego oddziaływaniem momentu magnetycznego atomu z zewnętrznym polem magnetycznym. W polu o indukcji B skierowanym wzdłuż osi Oz z momentem magnetycznym związana jest energia

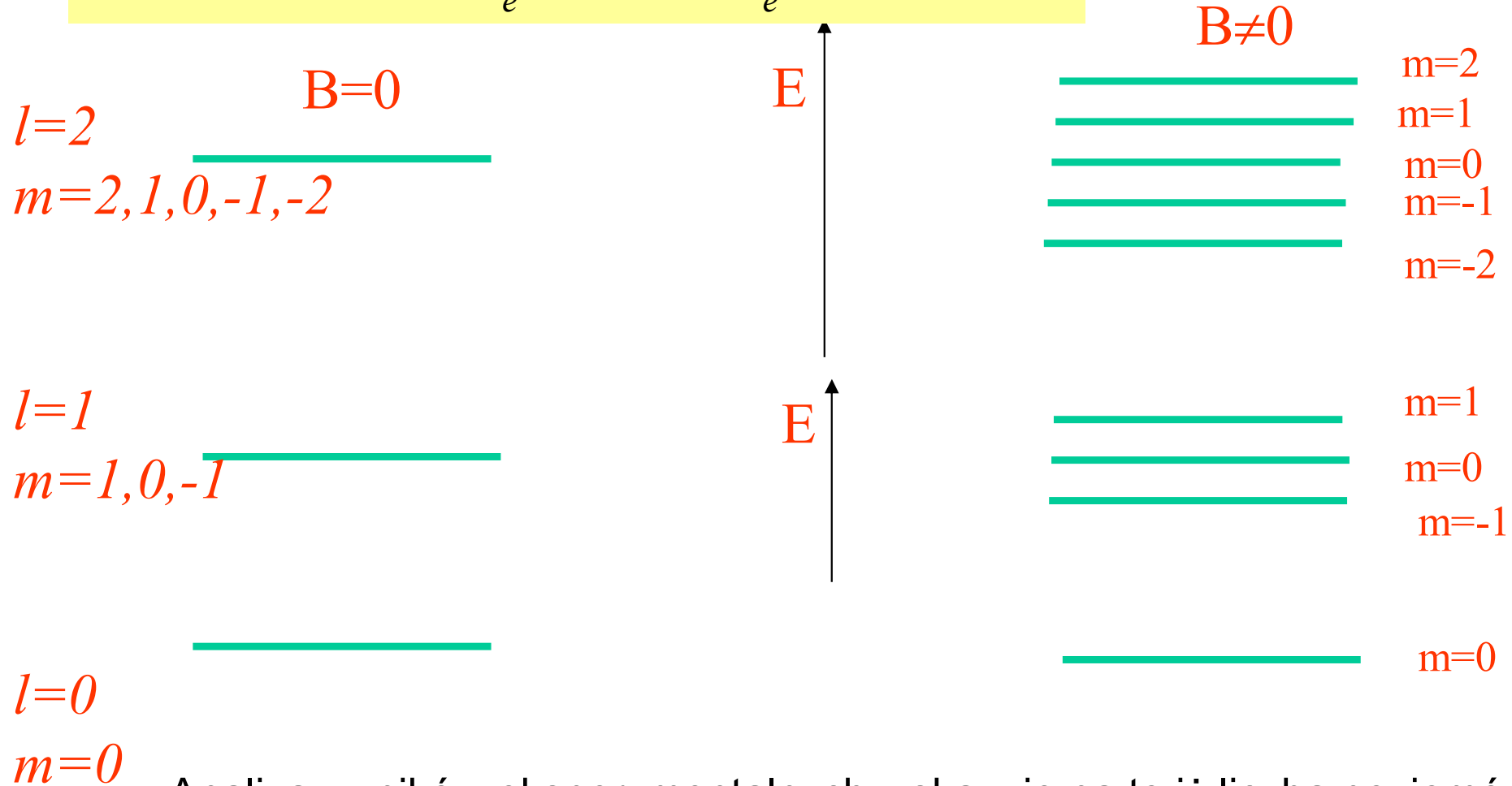
$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z \cdot B_z$$

Energia ta zależy od wartości rzutu momentu magnetycznego atomu na kierunek pola. Ponieważ rzut ten jest skwantowany to energia rozważana jest skwantowana (może ona przyjmować dyskretne wartości).

Przy określeniu energii kwantów promieniowania emitowanego przy przechodzeniu atomu (elektronu) pomiędzy stanami o różnych energiach należy uwzględnić wkład do energii poziomów energetycznych pochodzący od energii momentu magnetycznego atomu w polu magnetycznym. Istnienie kilku dozwolonych wartości tej energii w danym atomie powoduje rozczepienie linii widmowych emitowanego promieniowania

Rozszczepienie poziomów energetycznych w polu magnetycznym bez uwzględnienia spinu dla atomu znajdującego się stanach o $l=0$, $l=1$ i $l=2$

$$E = -\mu_{zl} \cdot B_z = \frac{|e|\hbar}{2m_e} L_z B = \mu_B m B$$



Analiza wyników eksperymentalnych wskazuje na to iż liczba poziomów na jakie poziom energetyczny ulega rozczepieniu może być wyższa, w szczególności można obserwować rozczepienie gdy $l=0$, co związane jest z wkładem do momentu magnetycznego atomu pochodzącym od spinu

Spin

Spin to własny moment pędu cząstki, którego odpowiada operator spinu

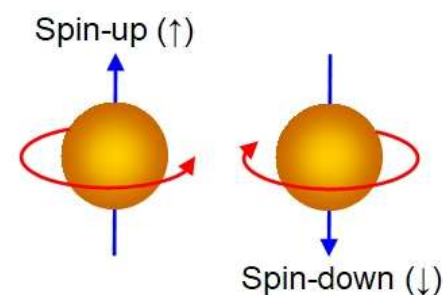
$$\vec{S} = \hat{S}_x \vec{i} + \hat{S}_y \vec{j} + \hat{S}_z \vec{k}$$

Pojęcie wprowadzili S.A. Goudst i G.E. Uhlenbeck (1925) dla wyjaśnienia subtelного rozszczepienia linii widmowych promieniowania emitowanego przez atomy.

Uwzględnienie spinu umożliwia też pełne wyjaśnienie rozszczepienia tych linii po umieszczeniu atomu w polu magnetycznym.

S.A. Goudst i G.E. Uhlenbeck traktowali spin jako moment pędu związany z ruchem obrotowym elektronu wokół własnej osi, co jest interpretacją obrazową ale niepoprawną.

Naprawdę spin jest wielkością czysto kwantową nie mającą odpowiednika klasycznego. Jego istnienie w przypadku elektronu można uzasadnić w oparciu o równanie Diraca, opisujące elektron relatywistyczny w ramach teorii kwantowej. Spin odgrywa też istotną rolę przy opisie innych obiektów.



Związki komutacyjne dla składowych operatora spinu

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y$$

$$[\hat{S}_x, \hat{S}^2] = [\hat{S}_y, \hat{S}^2] = [\hat{S}_z, \hat{S}^2] = 0$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

Mają one jednakową postać jak w przypadku orbitalnego momentu pędu. Nie można dokonać jednoczesnego pomiaru rzutu spinu na dwie różne osie. Można jednocześnie wyznaczyć tylko długość (kwadrat długości) wektora spinu oraz jego rzut na jedną oś.

Równania własne dla operatora spinu

$$\hat{S}^2 \chi_{s,m_s} = \hbar^2 s(s+1) \chi_{s,m_s} \quad s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

$$\hat{S}_z \chi_{s,m_s} = \hbar m_s \chi_{s,m_s} \quad m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$$

Komentarz

1) Wartości własne operatora kwadratu spinu zależą od liczby kwantowej s i wyrażają się wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, zaś wartości własne operatora rzutu spinu na oś Oz zależą od liczby kwantowej m_s , i wyrażają się wzorem $\hbar m_s$ przy czym dopuszczalne wartości liczby m_s zależą od liczby s

2) Liczba s określająca wartość kwadratu spinu nie musi być liczbą całkowitą, jak miało to miejsce w przypadku liczby l wprowadzonej dla orbitalnego momentu pędu lecz może być równa wielokrotności $\frac{1}{2}$ lub 0.

3) χ_{s,m_s} oznaczają wspólne funkcje własne operatorów $\hat{S}_z$ oraz $\hat{S}^2$.

Funkcji tych nie można reprezentować poprzez funkcje falowe zależne od zmiennych przestrzennych, w tym szczególności kątów w sferycznym układzie współrzędnych.

Wynika z tego to iż w przypadku spinu nie obowiązuje warunek iż liczba określająca wartości własne operatora kwadratu spinu jest liczbą całkowitą, który wynikał w przypadku orbitalnego momentu pędu z warunku jednoznaczności funkcji falowej przy zmianie kąta azymutalnego φ o 2π .

Operatora spinu nie można wyrazić także przy pomocy formuł zależnych od zmiennych przestrzennych.

4) Liczba s dla cząstek występujących w przyrodzie zależy od ich typu.

Dla elektronu, protonu i neutronu $s=1/2$, fotonu $s=1$, mezonu π $s=0$

W przypadku obiektów złożonych z kilku cząstek występują również ograniczenia na liczbę s zależne od ilości i rodzaju cząstek z jakich obiekt ten się składa.

5) Cząstki, dla których liczba s przyjmuje wartości całkowite są określane jako bozony, zaś cząstki dla których liczba ta jest nieparzystą wielokrotnością $1/2$ to fermiony

6) Istnienie spinu powoduje że do opisu stanów elektronowych w atomie jednoelektronowym oprócz liczb n, l, m wykorzystujemy liczbę m_s przyjmującą dwie wartości $m_s=1/2$ i $m_s=-1/2$. Od wartości tej liczby nie zależy (przy zaniedbaniu relatywistycznego efektu zwanego sprzężeniem spinowo–orbitalnym oraz braku zewnętrznego pola magnetycznego) energia elektronu, co powoduje wzrost degeneracji stanów własnych operatora Hamiltona dwukrotnie do wartości $2n^2$ (n - główna liczba kwantowa)

Równania własne dla operatora spinu dla elektronu (cząstki o $s=1/2$, $m_s=\pm 1/2$)

$$\hat{S}_z \chi_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar}{2} \chi_{\frac{1}{2}}$$

$$\hat{S}_z \chi_{-\frac{1}{2}} = -\frac{\hbar}{2} \chi_{-\frac{1}{2}}$$

$$\hat{S}^2 \chi_{\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{\frac{1}{2}}$$

$$\hat{S}^2 \chi_{-\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{-\frac{1}{2}}$$

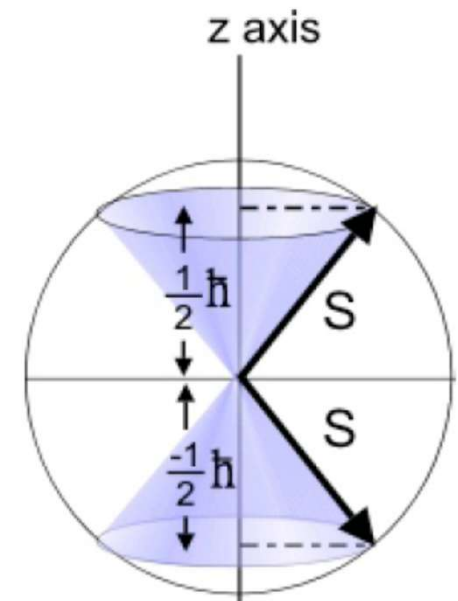
Istnieją tylko dwie wspólne funkcje własne (wektory własne) operatorów $\hat{S}^2$ oraz $\hat{S}_z$ dla elektronu różniące się znakiem (kierunkiem) rzutu spinu na oś OZ:

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \chi_{\frac{1}{2}}(m_s) = \begin{cases} 1 & \text{dla } m_s = \frac{1}{2} \\ 0 & \text{dla } m_s = -\frac{1}{2} \end{cases} \begin{matrix} \text{ozn.} \\ = |+\rangle \end{matrix}$$

dla której rzut ten jest dodatni (spin zwrócony do góry)

$$2) \chi_{-\frac{1}{2}} = \chi_{-\frac{1}{2}}(m_s) = \begin{cases} 0 & \text{dla } m_s = \frac{1}{2} \\ 1 & \text{dla } m_s = -\frac{1}{2} \end{cases} \begin{matrix} \text{ozn.} \\ = |-\rangle \end{matrix}$$

dla której rzut ten jest ujemny (spin zwrócony do dołu)



Spinowy moment magnetyczny elektronu

Analiza wyników doświadczalnych związanych m.in. ze strukturą subtelną linii widmowych emitowanego promieniowania i rozszczepieniem tych linii w polu magnetycznym a także tzw. efektu Sterna-Gerlacha wskazuje na to iż elektrony mogą posiadać moment magnetyczny związany nie tylko z orbitalnym momentem pędu ale i ze spinem (własnym momentem pędu).

Spinowy moment magnetyczny elektronu jest operatorem związanym ze spinem elektronu przybliżonym wzorem

$$\hat{\vec{\mu}}_s = -\frac{|e|\hbar}{m_e} \hat{\vec{S}} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{\vec{S}} \quad \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e}$$

Stosunek spinowego momentu magnetycznego do spinu jest w przybliżeniu dwukrotnie większy od stosunku orbitalnego momentu magnetycznego do orbitalnego momentu pędu (anomalia magnetomechaniczna).

Długość spinowego momentu magnetycznego elektronu jest równa

$$|\vec{\mu}_s| = \frac{|e|\hbar}{m_e} |\vec{S}| = \frac{|e|\hbar}{m_e} \sqrt{s(s+1)} = 2 \frac{|e|\hbar}{2m_e} \sqrt{s(s+1)} = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)} \stackrel{s=1/2}{=} \sqrt{3}\mu_B$$

gdzie $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e}$ -magneton Bohra

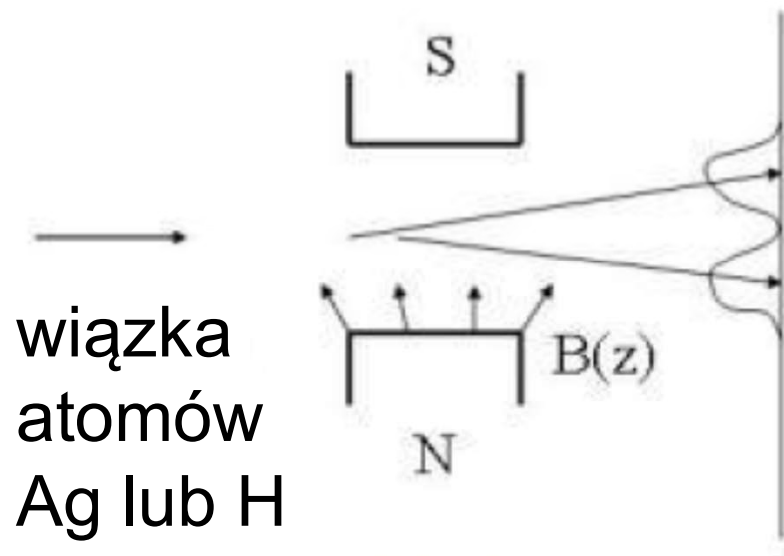
Rzut spinowego momentu magnetycznego elektronu na dowolnie wybraną oś Oz jest równa

$$\mu_{sz} = -\frac{|e|\hbar}{m_e} S_z = -\frac{|e|\hbar}{m_e} m_s = -2 \frac{|e|\hbar}{2m_e} m_s = -2\mu_B m_s \stackrel{m_s=\pm 1/2}{=} \mp \mu_B$$

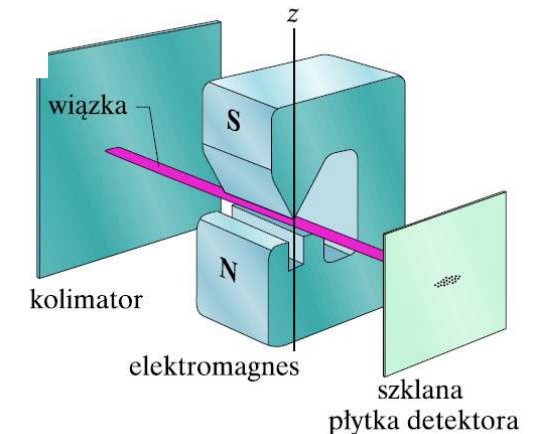
Wzory $|\vec{\mu}_s| = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)}$ $\mu_{sz} = -2\mu_B m_s$ można stosować także dla momentu magnetycznego atomu, przy czym liczby s , m przyjmujące w ogólności wartości $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ $m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$

służą do opisu momentu magnetycznego układu wszystkich elektronów atomu. Wkład do tego momentu pochodzi jednak tylko od elektronów zajmujących częściowo zapełniona powłokę elektronową.

Doświadczenie Sterna-Gerlacha - potwierdzenie istnienia spinowego momentu magnetycznego i jego kwantowania przestrzennego



$$F_z = \mu_z \frac{dB}{dz}$$



Po przepuszczeniu przez obszar niejednorodnego pola magnetycznego wiązki atomów srebra rozdziela się ona na dwie wiązki, czyli siła działająca na atomy w polu może przyjmować dwie wartości .

Na podstawie wzoru $F_z = \mu_z \frac{dB}{dz}$ opisującego tę siłę można wnosić iż

atomy srebra posiadają niezerowy moment magnetyczny $\vec{\mu}$, którego rzut na oś Oz może przyjmować także tylko dwie wartości (według klasycznej mechaniki siła

winna przyjmować dowolne wartości z zakresu : $F_z = \left(-\mu \frac{dB}{dz}, \mu \frac{dB}{dz} \right)$ gdzie $\mu = |\vec{\mu}|$ a wiązka winna ulec poszerzeniu a nie rozszczepieniu)

Ponieważ rzut na oś Oz momentu magnetycznego pochodzącego od orbitalnego momentu pędu może przyjmować tylko nieparzystą liczbę wartości, moment magnetyczny odpowiedzialny za rozszczepienie wiązki atomów w polu niejednorodnym nie może pochodzić tylko od momentu magnetycznego związanego z orbitalnym momentem pędu ale musi pochodzić od spinu elektronu z niecałkowicie zapełnionej podpowłoki

W rzeczywistości w przypadku atomów (takich jak atomy srebra, wodoru), w których na takiej podpowłoce znajduje się jeden elektron w stanie o $l=0$ (czyli i $m=0$) można przyjąć iż $\mu_{lz}=0$, co znaczy iż atom taki nie posiada momentu magnetycznego orbitalnego na który w zewnętrznym niejednorodnym polu magnetycznym działa siła. W polu takim siła działa na moment magnetyczny spinowy pochodzący od spinu z tej podpowłoki i jest dana wzorem

$$F_z = \mu_{sz} \frac{dB_z}{dz} = \pm \mu_B \frac{dB_z}{dz}$$

Atom wieloelektronowy

Zakładamy iż jądro ma ustalone położenie (przybliżenie adiabatyczne). Do określenia stanu atomu wykorzystujemy funkcję falową zależną od współrzędnych przestrzennych oraz zmiennych spinowych i czasu 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

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

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. W ogólności rozważane równania nie są ściśle niezależne od siebie z uwagi m.in. na to iż potencjał efektywny zależy zawsze co najmniej od średniego rozkładu ładunku elektronów w atomie, który zależy od stanów w jakich znajdują się te elektrony

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 $V_{ef}(\vec{r}_i) = V_{ef}(r_i)$

Z uwagi na symetrie potencjału funkcja $\psi_i(\vec{r}_i)$ może być wspólną funkcją własną komutujących ze sobą operatorów $\hat{H}_i$, 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 nam na wyznaczenie stanów kwantowych zajmowanych w atomie przez kolejne elektrony. Przy ich zajmowaniu kluczowe znaczenie odgrywa zakaz Pauliego.

Zakaz Pauliego dla atomu wieloelektronowego

W stanie kwantowym o ustalonych liczbach kwantowych n, l, m 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.

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 można uzasadnić wykorzystując fakt iż elektron jest fermionem

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

Ogólne zasady obsadzania stanów elektronowych w atomie wieloelektronowym

1) Elektrony w stanie podstawowym obsadzają dostępne stany energetyczne o najniższej możliwej energii z zachowaniem zakazu Pauliego.

2) 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.

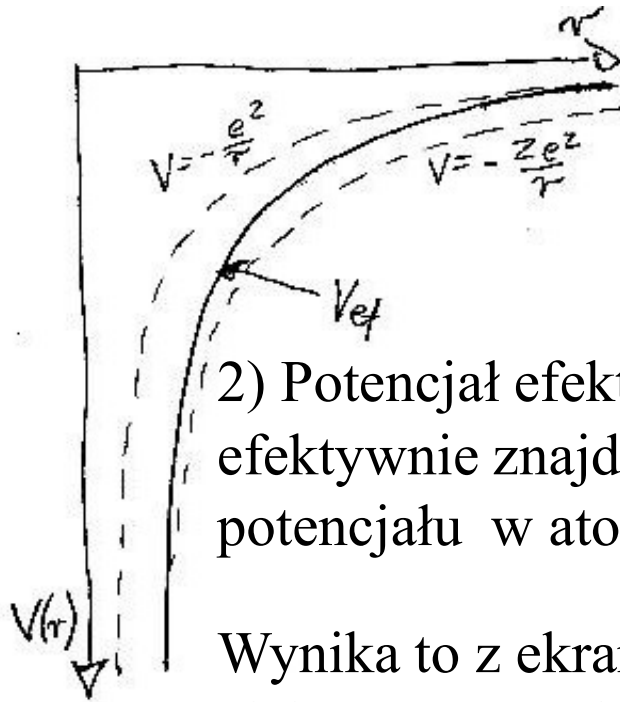
Opisana reguła uwzględnia fakt iż energia atomu o spinach równoległych ulega zwykle obniżeniu na skutek obniżenia prawdopodobieństwa znalezienia dwóch elektronów blisko siebie prowadzącego do obniżenia dodatniej energii ich elektrostatycznego odpychania (obniżenia energii związanej z oddziaływaniami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

3) 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 obsadzone 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)

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)

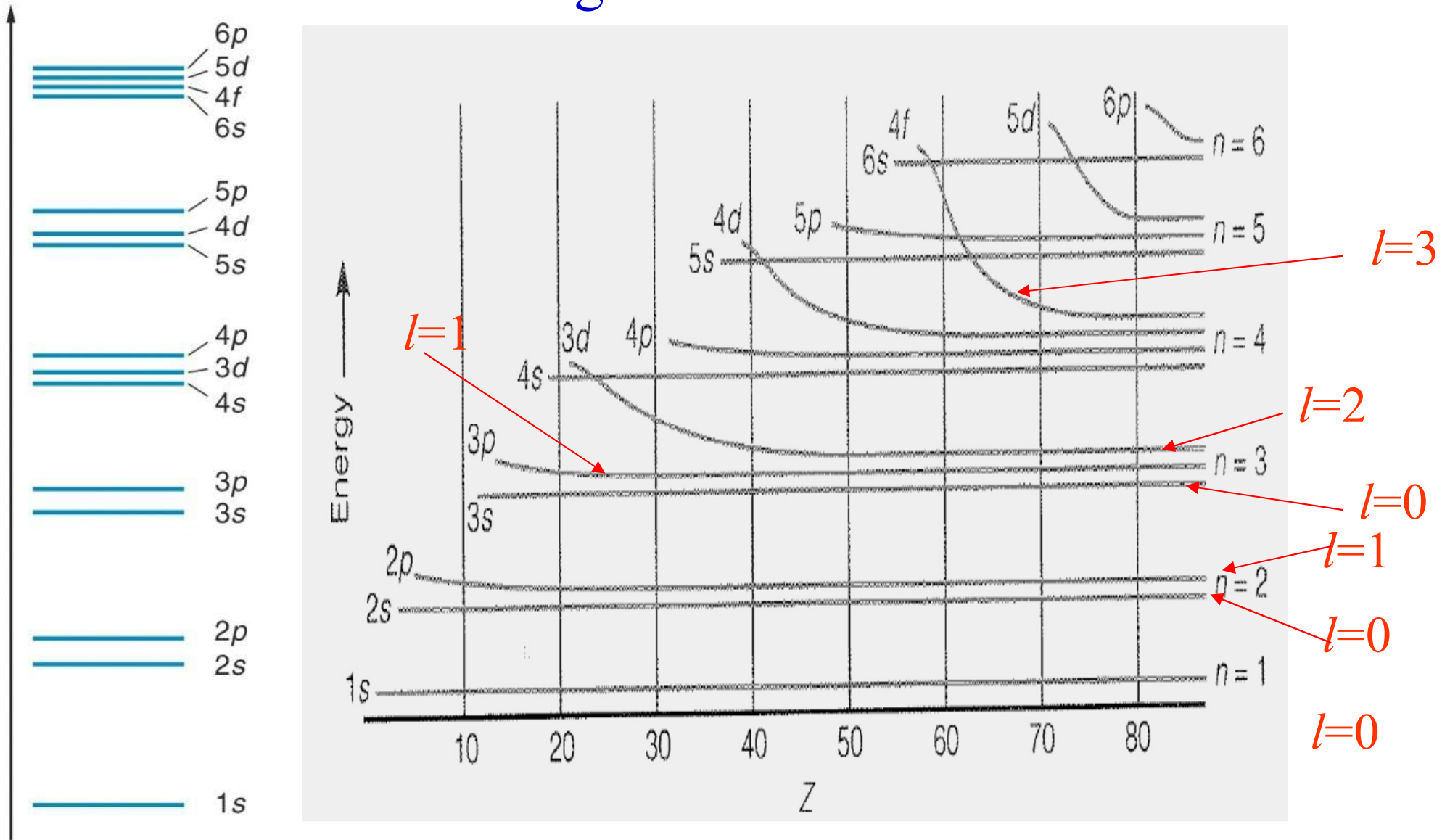
3) Ponieważ $V_{ef}(r) \neq -\frac{const}{r}$ to energia elektronu zależy od liczby l . Rośnie ona ze wzrostem tej liczby, przy czym zależność od liczby n jest zwykle silniejsza niż od zależności od liczby l , dlatego zwykle stany z powłok o wyższym n mają wyższą energię niż z te z niższym n .

Przyczyna: 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

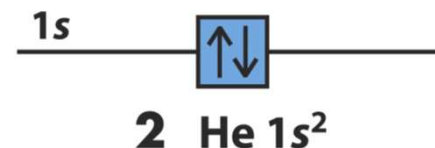
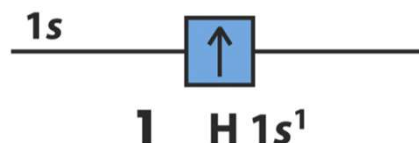
$$l = 0, \dots, n-1$$

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

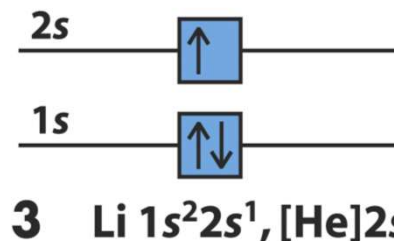
$$m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

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

2. $n=1$
powłoka 1

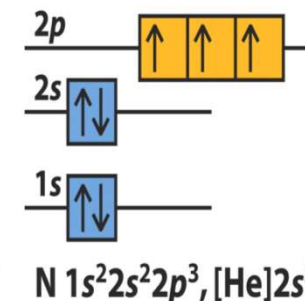
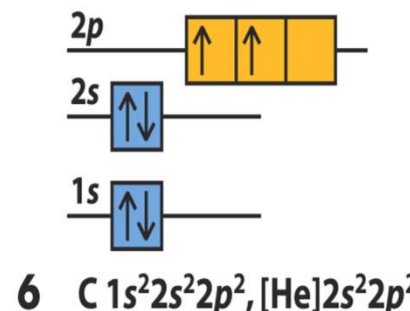
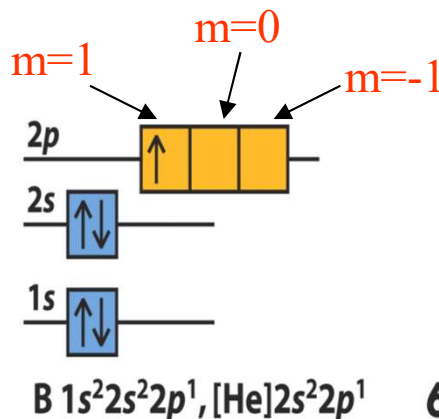


2. $n=2$
powłoka 2
podpowłoka s
 $l=0$



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

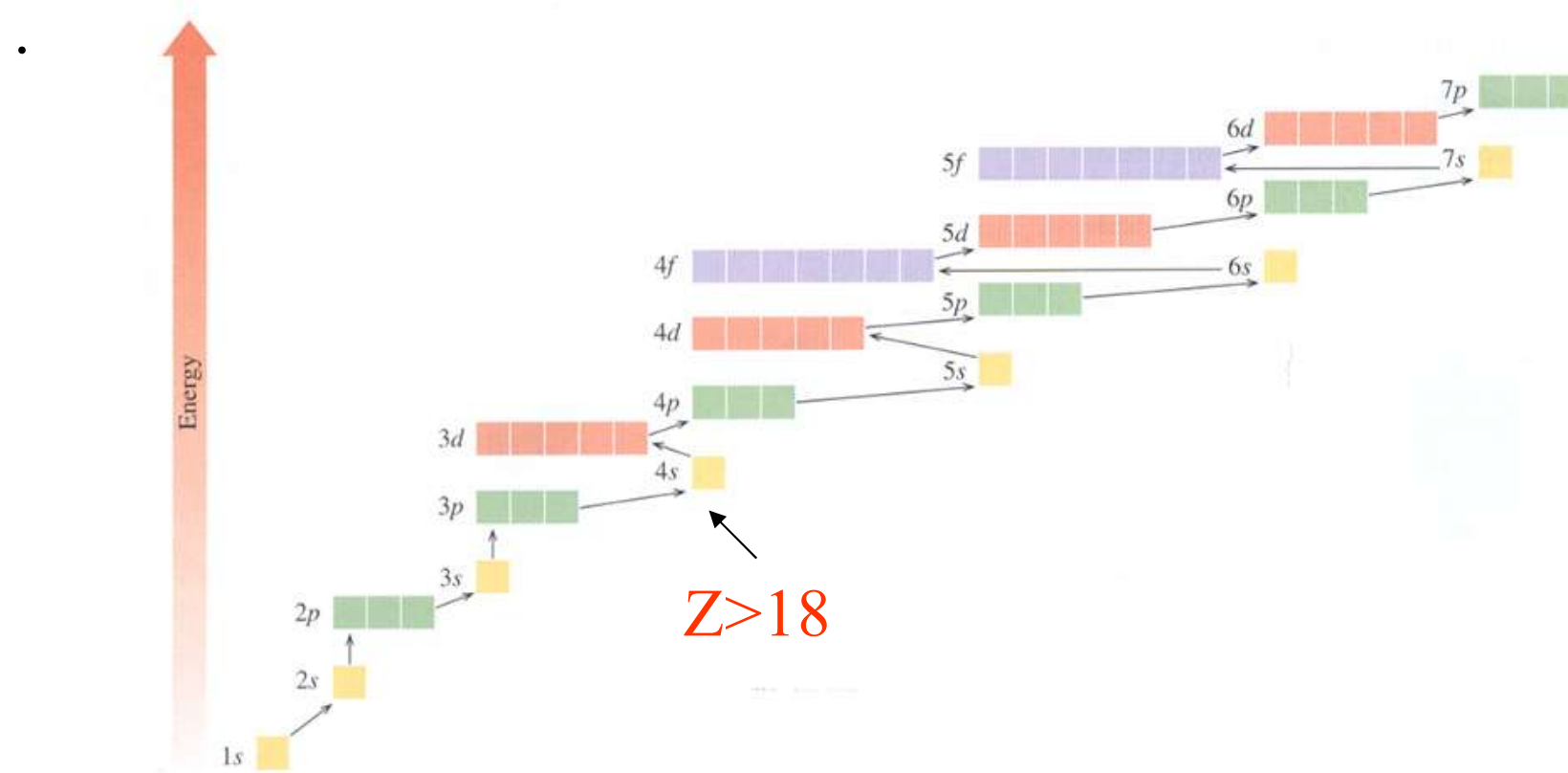
↑ elektron o spinie do góry ($m_s=1/2$) ↓ elektron o spinie do dołu ($m_s=-1/2$)

Zapełnienie powłok – ciężkie atomy o dużym Z

Istotną rolę odgrywa tutaj ekranowanie, 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

okres

grupa

hydrogen 1 H 1.0079																	grupa						helium 2 He 4.0026
lithium 3 Li 6.941	beryllium 4 Be 9.0122															boron 5 B 10.811	carbon 6 C 12.011	nitrogen 7 N 14.007	oxygen 8 O 15.999	fluorine 9 F 18.998	neon 10 Ne 20.180		
sodium 11 Na 22.990	magnesium 12 Mg 24.305															aluminium 13 Al 26.982	silicon 14 Si 28.086	phosphorus 15 P 30.974	sulfur 16 S 32.065	chlorine 17 Cl 35.453	argon 18 Ar 39.948		
potassium 19 K 39.098	calcium 20 Ca 40.078	scandium 21 Sc 44.956	titanium 22 Ti 47.867	vanadium 23 V 50.942	chromium 24 Cr 51.996	manganese 25 Mn 54.938	iron 26 Fe 55.845	cobalt 27 Co 58.933	nickel 28 Ni 58.693	copper 29 Cu 63.546	zinc 30 Zn 65.39	gallium 31 Ga 69.723	germanium 32 Ge 72.61	arsenic 33 As 74.922	selenium 34 Se 78.96	bromine 35 Br 79.904	krypton 36 Kr 83.80						
rubidium 37 Rb 85.468	strontium 38 Sr 87.62	yttrium 39 Y 88.906	zirconium 40 Zr 91.224	niobium 41 Nb 92.906	molybdenum 42 Mo 95.94	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07	rhodium 45 Rh 102.91	palladium 46 Pd 106.42	silver 47 Ag 107.87	cadmium 48 Cd 112.41	indium 49 In 114.82	tin 50 Sn 118.71	antimony 51 Sb 121.76	tellurium 52 Te 127.60	iodine 53 I 126.90	xenon 54 Xe 131.29						
caesium 55 Cs 132.91	barium 56 Ba 137.33	57-70 *	lanthanum 71 Lu 174.97	hafnium 72 Hf 178.49	tantalum 73 Ta 180.95	tungsten 74 W 183.84	rhenium 75 Re 186.21	osmium 76 Os 190.23	iridium 77 Ir 192.22	platinum 78 Pt 195.08	gold 79 Au 196.97	mercury 80 Hg 200.59	thallium 81 Tl 204.38	lead 82 Pb 207.2	bismuth 83 Bi 208.98	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]					
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	89-102 * *	lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	unnilium 110 Uun [271]	ununium 111 Uuu [272]	unbibium 112 Uub [277]			ununquadium 114 Uuq [289]								
				lanthanum 57 La 138.91	cerium 58 Ce 140.12	praseodymium 59 Pr 140.91	neodymium 60 Nd 144.24	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36	europium 63 Eu 151.96	gadolinium 64 Gd 157.25	terbium 65 Tb 158.93	dysprosium 66 Dy 162.50	holmium 67 Ho 164.93	erbium 68 Er 167.26	thulium 69 Tm 168.93	ytterbium 70 Yb 173.04						
				actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.04	protactinium 91 Pa 231.04	uranium 92 U 238.03	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]						

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.

Grupę 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 wypełnione 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 taką samą 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 właściwościami magnetycznymi.

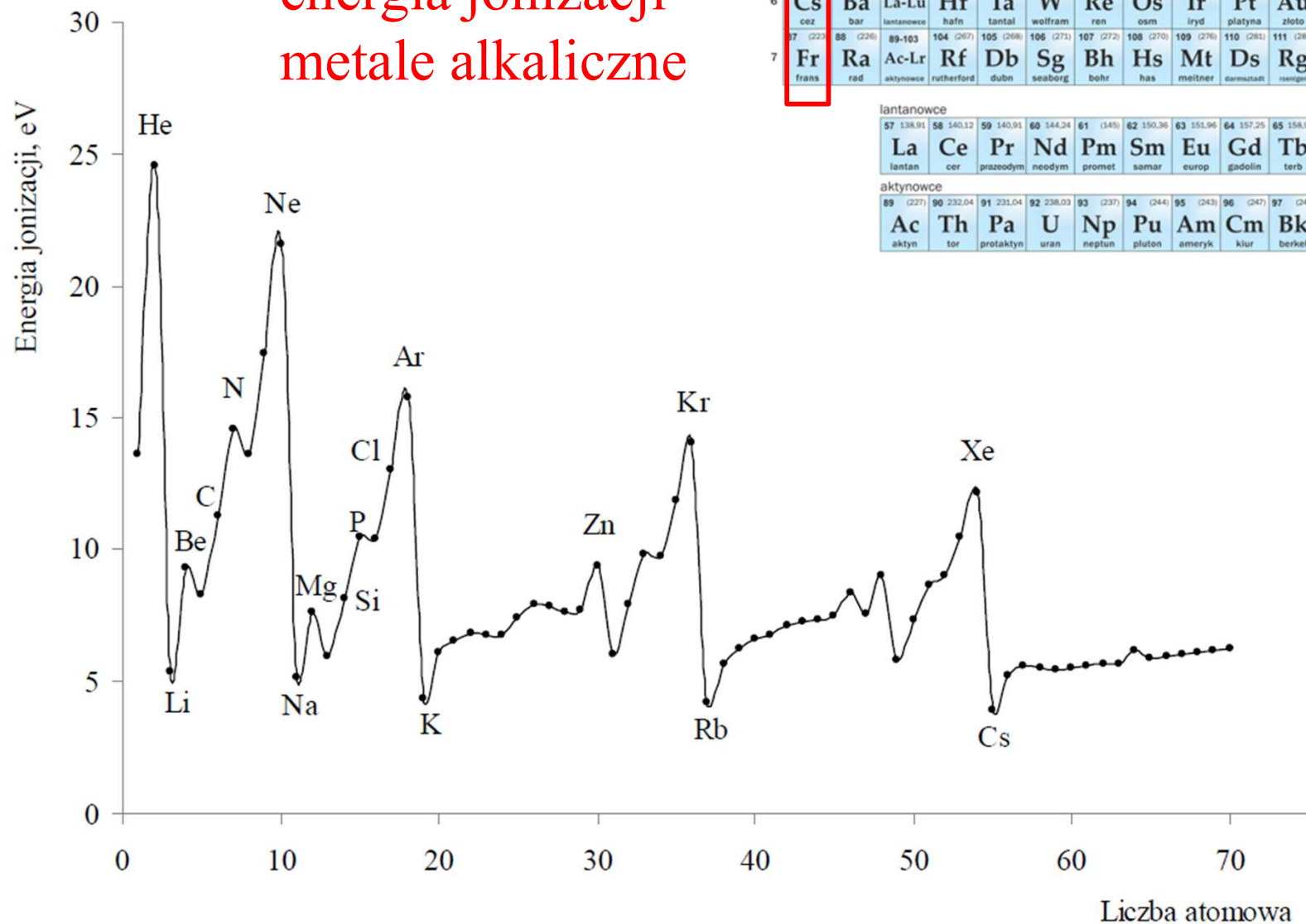
Przykłady



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

EduTab

1	2																	18
H wodor	He hel																	He hel
Li lit	Be beryl																	Ne neon
Na sód	Mg magnez																	Ar argon
K potas	Ca wapń	Sc skand	Ti tytan	V wanad	Cr chrom	Mn mangan	Fe żelazo	Co kobalt	Ni nikiel	Cu miedź	Zn cynk	Ga gal	Ge german	As arsen	Se selen	Br brom	Kr krypton	
Rb rubid	Sr stront	Y itry	Zr cyrkon	Nb niob	Mo molibden	Tc technet	Ru ruten	Rh rod	Pd pallad	Ag srebro	Cd kadm	In ind	Sn cyna	Sb antymon	Te tellur	I jod	Xe ksenon	
Cs cez	Ba bar	La-Lu lantanowce	Hf hafn	Ta tantal	W wolfram	Re ren	Os osm	Ir iryd	Pt platyna	Au złoto	Hg rtęć	Tl tal	Pb ołów	Bi bismut	Po polon	At astat	Rn radon	
Fr frans	Ra rad	Ac-Lr aktynowce	Rf rutherford	Db dubn	Sg seaborg	Bh bohrr	Hs has	Mt meitner	Ds darmstadt	Rg reemgen	Cn copernicjum	Uut ununtrium	Fl flerowium	Uup ununpentjum	Lv livermorium	Uus ununseptjum	Uuo ununoktjum	

lantanowce

57 138,91	58 140,12	59 140,91	60 144,24	61 (145)	62 150,36	63 151,96	64 157,25	65 158,93	66 162,50	67 164,93	68 167,26	69 168,93	70 173,05	71 174,97
La lantan	Ce cer	Pr prazeodym	Nd neodym	Pm promet	Sm samar	Eu europ	Gd gadolin	Tb terb	Dy dysproz	Ho holm	Er erb	Tm tul	Yb iterb	Lu lutet

aktynowce

89 (227)	90 232,04	91 231,04	92 238,03	93 (237)	94 (244)	95 (243)	96 (247)	97 (247)	98 (251)	99 (252)	100 (257)	101 (258)	102 (259)	103 (262)
Ac aktyn	Th tor	Pa protaktyn	U uran	Np neptun	Pu pluton	Am ameryk	Cm klur	Bk berkel	Cf kaliforn	Es einstein	Fm ferm	Md mendelew	No nobel	Lr lorens

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, w przypadku ich jest bardzo wysoka. 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 atomy 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.

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 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 wnoszą tylko jeden elektron znajdujący się na orbitalu 5s (o $l=0$ i $s=1/2$). Pozostałe orbitale są całkowicie puste lub zapełnione gdyż drugi elektron z powłoki 5s w rzeczywistości znajduje się w tym atomie na podpowłoczce 4d przez co jest ona w całości wypełniona przez 10 elektronów.

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

The periodic table is organized into groups (IA, IIA, IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA) and periods (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7). The elements are color-coded based on their orbital filling:

- s filling:** Red (Groups IA, IIA)
- p filling:** Yellow (Groups IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA)
- d filling:** Green (Groups IIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIIIB, IB, IIB)
- f filling:** Blue (Lanthanides and Actinides)

The diagram also shows the filling order of orbitals (1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p) and the corresponding element numbers (1 to 118).

The periodic table is divided into two main sections: the main body (Groups IA to VIIIA) and the f-block (Lanthanides and Actinides). The f-block is shown as two rows of elements, with the Lanthanides (57-71) and Actinides (89-103) placed below the main body.

The diagram illustrates the filling order of orbitals and the corresponding element groups, showing the periodic table of elements.

Przykładowe pytania testowe

- 1) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?
- a) Efekt Zeemana jest związany z rozszczepieniem linii widmowych promieniowania emitowanego przez atom po umieszczeniu atomu w polu magnetycznym.
 - b) Efekt Zeemana jest związany rozszczepieniem linii widmowych promieniowania emitowanego przez atom po umieszczeniu atomu w polu elektrycznym.
 - c) W doświadczeniu Sterna Gerlacha obserwowane jest rozszczepienie wiązki atomów srebra przy ich przechodzeniu przez obszar niejednorodnego pola magnetycznego.
 - d) W doświadczeniu Sterna Gerlacha obserwowane jest poszerzenie wiązki atomów srebra przy ich przechodzeniu przez obszar jednorodnego pola magnetycznego.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia spośród podanych powyżej.

- 2) Czy wynik doświadczenia Sterna-Gerlacha przeprowadzonego z wykorzystaniem atomów srebra przechodzących przez obszar niejednorodnego pola magnetycznego wskazuje na to iż
- a) rzut momentu magnetycznego atomu na kierunek indukcji pola magnetycznego przyjmować może tylko dyskretne wartości
 - b) moment magnetyczny atomu srebra pochodzi od orbitalnego momentu pędu tego atomu
 - c) rzut spinu układu elektronów atomu srebra na oś wyróżnioną przez pole magnetyczne może przyjmować 2 różne wartości
 - d) rzut orbitalnego momentu pędu układu elektronów atomu srebra na oś wyróżnioną przez pole magnetyczne może przyjmować 4 różne wartości

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia spośród podanych powyżej .

3) Ile różnych wartości można otrzymać w wyniku pomiaru rzutu spinu elektronu na oś Oz ?

- a) 1 wartość
- b) 2 wartości
- c) 3 wartości
- d) Wynik może być określony przez dowolną liczbę rzeczywistą

Wybrać poprawną odpowiedź spośród podanych powyżej.

4) Ile różnych wartości można otrzymać w wyniku pomiaru rzutu orbitalnego momentu pędu elektronu w atomie wodoru na oś Oz przy założeniu iż elektron znajduje się w stanie określonym przez wartość orbitalnej liczby kwantowej $l=2$? **Wybrać poprawną odpowiedź spośród podanych poniżej.**

- a) 2 wartości
- b) 3 wartości
- c) 5 wartości
- d) Wynik może być określony przez dowolną liczbę rzeczywistą

5) 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.

6) Które z poniższych twierdzeń dotyczących własności potencjału efektywnego opisującego efektywnie oddziaływanie elektronu z jądrem i pozostałymi elektronami w atomie wieloelektronowym o liczbie atomowej $Z \gg 1$ są poprawne? 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 poprawne stwierdzenia

7) 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 poprawne stwierdzenia.

8) **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.

9) 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.

10) 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.

11) 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.