

## **XIX Atomy wieloelektronowe (helopodobne). Układ okresowy pierwiastków.**

### **Atomy z dwoma elektronami (helopodobne)**

rys.

np.: atom helu ( $Z=2$ )

$$E_p = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

Jeżeli zaniedbamy oddziaływanie między elektronami to :

$$E_1 = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} Z^2, \quad E_2 = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} Z^2$$

dla stanu podstawowego ( $n=1, Z=2$ ) mamy :

$$E_{\text{He}} = E_1 + E_2 = -108.8 \text{ eV}$$

z eksperymentu  $E_{\text{He}} = -78.98 \text{ eV}$

Można wprowadzić poprawkę na ekranowanie

$$E_{\text{He}} = 2(Z - \xi)^2 E_H \Rightarrow \xi = 0.32$$

Szukamy funkcji falowych :

- elektrony są identyczne i nierozróżnialne co możemy zapisać poprzez :

$$\Psi_{ab} = \Psi_a(1) \cdot \Psi_b(2) \pm \Psi_a(2) \cdot \Psi_b(1)$$

znak „+” daje funkcję symetryczną

znak „-” daje funkcję antysymetryczną,

- wprowadzamy spin i spinowe funkcje falowe

$$\Psi_{\text{calk}} = \Psi_{\text{orbit}} \times \Psi_{\text{spin}}$$

Z zakazu Pauliego wynika, że całkowita funkcja falowa układu elektronów musi być antysymetryczna. Obowiązuje to dla wszystkich fermionów (cząstek o spinie  $\frac{1}{2}$ ).

Możliwe są więc dwa przypadki:

$$1) \Psi_{\text{calk}} = \Psi_{\text{orbit}} (\text{symetryczna}) \times \Psi_{\text{spin}} (\text{antysymetryczna } S=0)$$

$$2) \Psi_{\text{calk}} = \Psi_{\text{orbit}} (\text{antysymetryczna}) \times \Psi_{\text{spin}} (\text{symetryczna } S=1)$$

Funkcja antysymetryczna dla cząstek w tych samych stanach kwantowych jest równa zero.

*Dla helu :*

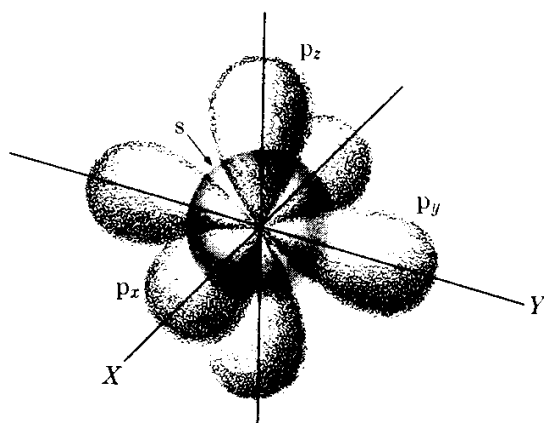
- całkowita energia może być pogrupowana na poziomy z  $S=0$  i  $S=1$
- konfiguracja  $1s^2$  występuje tylko dla  $S=0$  a nie występuje dla  $S=1$ , bo antysymetryczna część orbitalna funkcji falowej zanika:

$$\Psi_{100}(1) \cdot \Psi_{100}(2) - \Psi_{100}(2) \cdot \Psi_{100}(1) \equiv 0$$

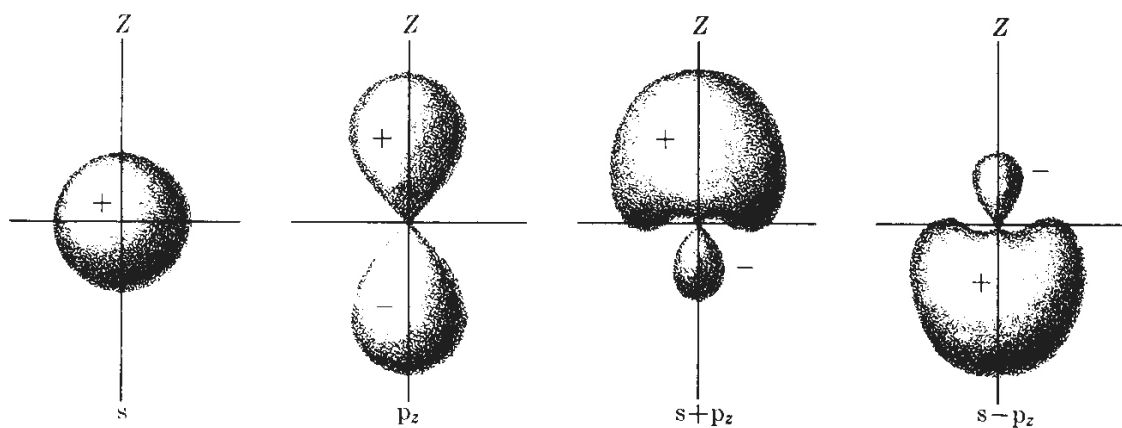
- stany s mają mniejszą energię niż p (a te z kolei niż d), bo ekranowanie jąder jest mniejsze dla stanów s niż dla pozostałych,
- stany z  $S=1$  ( $\uparrow\uparrow$ ) mają niższą energię niż z  $S=0$  ( $\uparrow\downarrow$ ). Elektrony rzadziej przebywają w pobliżu siebie dla  $S=1$  (mniejsza jest dodatnia energia odpychania wzajemnego elektronów)
- dozwolone przejście to  $\Delta l = \pm 1$ ,  $\Delta m_l = 0, \pm 1$   
 przejście  $1s^2 \rightarrow 1s2p$  jest dozwolone  
 przejście  $1s^2 \rightarrow 1s2s$  jest zabronione  
 Stan  $1s2s$  może być osiągnięty poprzez zderzenie atomów.  
 Stan  $1s2s$  jest stanem metastabilnym, gdyż trudno jest przejść atomowi do stanu niższego  $1s^2$ .
- prawdopodobieństwo przejścia między  $S=0$  a  $S=1$  jest niezmiernie małe (wymagane jest oddziaływanie magnetyczne, które jest dużo słabsze niż oddziaływanie elektryczne)
- mamy zatem dla atomów helopodobnych dwa typy atomów :  
 parahel ( $S=0$ ) i ortohel ( $S=1$ )

## Atomy wieloelektronowe

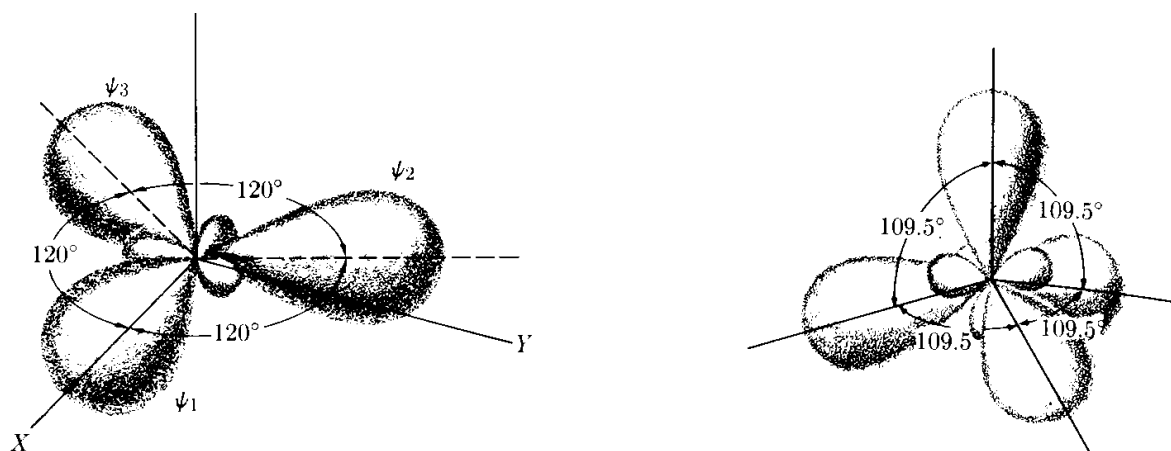
Hybrydyzacja: jeżeli stany s i p mają w przybliżeniu takie same energie, dobrymi funkcjami falowymi są również kombinacje liniowe stanów s i p.



Rys. Funkcje falowe  $s$ ,  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ .



Rys. Hybrydyzacja  $sp$



Rys. Hybrydyzacja  $sp^2$  i  $sp^3$

Wodór i metale alkaliczne – łatwo tracą elektron, który rozpoczyna nową powłokę, np.:

$$_{11}\text{Na} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$$

Chlorowce – chętnie przyłączają elektron, który brakuje im do zamknięcia powłoki, np.:

$$_{17}\text{Cl} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$$

Pierwiastki grup przejściowych tj.:  $3d$ ,  $4d$ ,  $5d$ ,  $4f$ , i  $5f$  mają nie wypełnione powłoki wewnętrzne  $d$  i  $f$ . Elektrony tych nie wypełnionych powłok odpowiedzialne są za właściwości magnetyczne tych pierwiastków.