

Wykład Va

Atom wodoru i atomy wieloelektronowe

Równanie Schrödingera

Funkcję falową, Ψ dla danej cząstki, lub bardziej złożonego układu fizycznego, otrzymujemy rozwiązując równanie różniczkowe nazywane równaniem Schrödingera.

Jeżeli energia potencjalna cząstki U nie zależy od czasu, to równanie Schrödingera jest równaniem niezależnym od czasu i nazywa się **stacjonarnym równaniem Schrödingera**.

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

Atom wodoru wg
mechaniki
kwantowej

Równanie Schrödingera

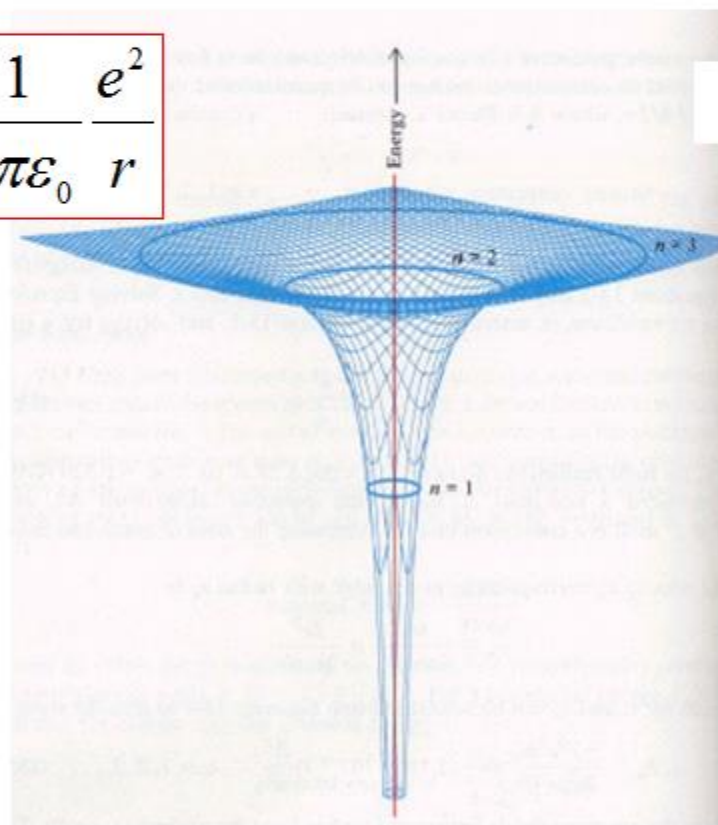
$$\hat{H}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

$$\left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] + V(x, y, z) \right\} \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

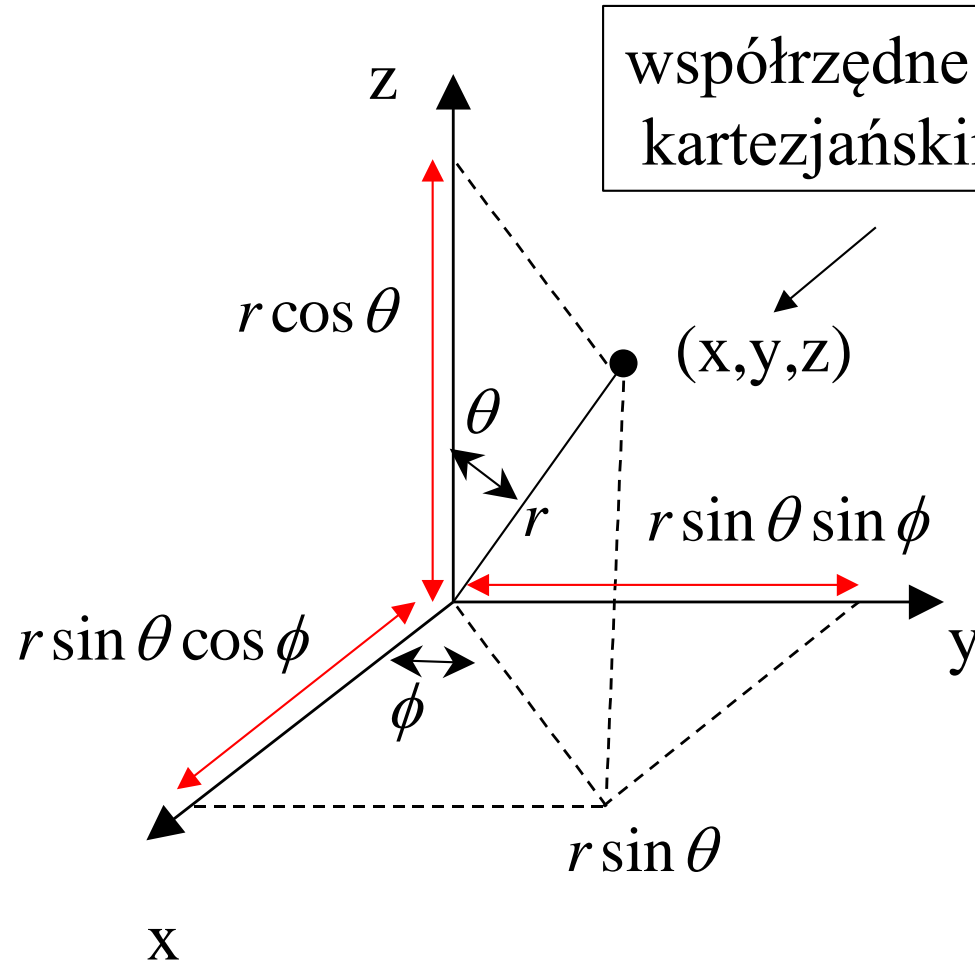
Równanie różniczkowe na pochodne cząstkowe z 3 niezależnymi współrz.

Energia potencjalna we
współrzędnych
sferycznych.

$$\rightarrow V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$



Sferyczny układ współrzędnych



współrzędne w układzie
kartezjańskim

współrzędne w układzie
sferycznym

(r, θ, ϕ)

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

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

$$z = r \cos \theta$$

funkcja falowa $\psi(r, \theta, \phi)$

Atom wodoru

Po przejściu do współrzędnych sferycznych:

$$\Psi(x, y, z) \Rightarrow \Psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = R_{nl}(r) \Theta_{l, m_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi)$$



Funkcja radialna

Funkcja katowa θ i ϕ

Równanie z trzema niezależnymi współrzędnymi przechodzi w 3 niezależne zależne tylko od jednej współrzędnej.

Funkcje θ i ϕ są takie same dla każdej sferycznie symetrycznej energii potencjalnej.

Rozwiązanie

Rozwiązanie jest określone przez warunki graniczne:

- $R(r)$ musi dążyć do **zera** dla dużych r (stan związany - elektron jest zlokalizowany w pobliżu jądra);
- $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\phi)$ muszą być **periodyczne**:
(r, θ, ϕ) i ($r, \theta, \phi + 2\pi$) opisują ten sam punkt, więc
$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi);$$
- $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\phi)$ muszą być **skończone**.



Liczby kwantowe:

n - główna

l - orbitalna

m_l - magnetyczna

Rozwiązanie równania Schrödingera dla elektronu w atomie – po uwzględnieniu ef. relatywistycznych

Stan elektronu charakteryzowany jest poprzez skwantowane:

energię, wartość momentu pędu, rzut momentu pędu na wybrany kierunek oraz wartość rzutu własnego momentu pędu (spinu) elektronu na wybrany kierunek.

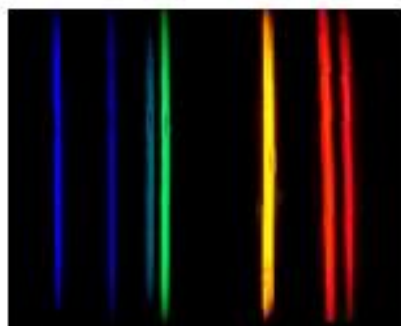
<u>nazwa</u>	<u>symbol</u>	<u>wartość</u>	Funkcja falowa elektronu w atomie zgodnie z zakazem Pauliego jest inna dla każdego elektronu
główna liczba kwantowa	n	1, 2, 3, ...	Ψ_{n,l,m_l,m_s}
poboczna liczba kwantowa	l	0, 1, 2, ... $n-1$	
magnetyczna liczba kwantowa	m_l	od $-l$ do $+l$	
spinowa liczba kwantowa	m_s	$\pm 1/2$	

Atomu wodoru

$$E_n = -13.6 \text{ eV} \cdot \frac{1}{n^2}$$

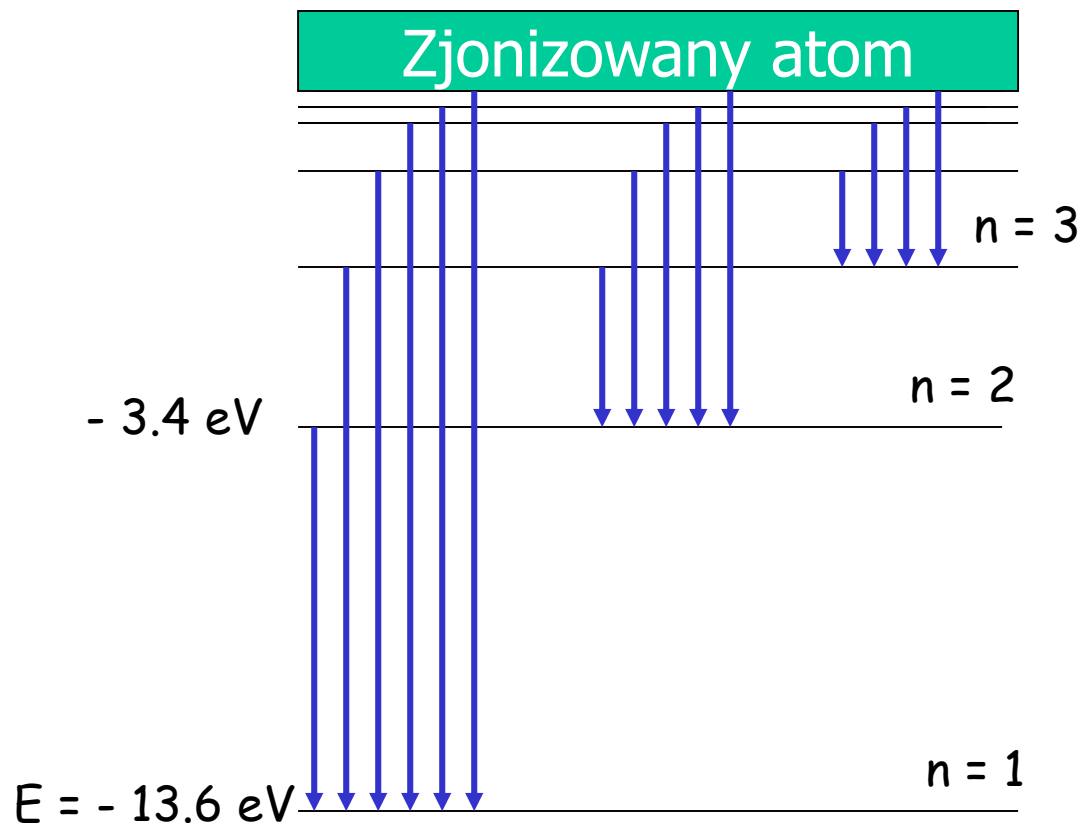
n- główna liczba kwantowa

$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots;$



1 2 3 4 5 6 7

Widmo helu



Atom wieloelektronowy

- Atom zawierający więcej niż jeden elektron.
- Energie elektronu są teraz inne niż dozwolone energie w atomie wodoru. Związane jest to z odpychaniem pomiędzy elektronami. Zmienia to energię potencjalną elektronu.
- Dozwolone energie elektronu zależą od głównej liczby kwantowej n oraz w mniejszym stopniu od orbitalnej liczby kwantowej ℓ . Zależność od l staje się istotna dla atomów o dużej ilości elektronów.
- Każdy elektron zajmuje w atomie stan który jest opisany poprzez liczby kwantowe: n, ℓ, m_ℓ, m_s .

Zakaz Pauliego

- Ułożenie elektronów na kolejnych powłokach określone jest poprzez zakaz Pauliego:

Elektrony w atomie muszą różnić się przynajmniej jedną liczbą kwantową, tzn. nie ma dwóch takich elektronów których stan opisywany byłby przez ten sam zestaw liczb kwantowych n , ℓ , m_ℓ oraz m_s .

- Struktura elektronowa atomu złożonego może być rozpatrywana jako kolejne zapełnianie podpowłok elektronami. Kolejny elektron zapełnia kolejny stan o najniższej energii.
- O własnościach chemicznych atomów decydują elektrony z ostatnich podpowłok (podpowłok walencyjnych) odpowiedzialnych za wiązania chemiczne.

Funkcja falowa elektronu w atomie Ψ_{n,l,m_l,m_s}

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

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$n = 2; \quad l = 0, 1; \quad m_l = 0, \pm 1; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$n = 1; \quad l = 0; \quad m_l = 0; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$\left. \begin{array}{l} \Psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}} \\ \Psi_{1,0,0,+\frac{1}{2}} \end{array} \right\} \text{ Stan } 1s^2$$

2 stany do
obsadzenia
przez
elektrony

Powłoka K

$$\Psi_{2,0,0,-\frac{1}{2}}$$

$$\Psi_{2,0,0,+\frac{1}{2}}$$

$$\Psi_{2,1,0,-\frac{1}{2}}$$

$$\Psi_{2,1,0,+\frac{1}{2}}$$

$$\Psi_{2,1,-1,-\frac{1}{2}}$$

$$\Psi_{2,1,-1,+\frac{1}{2}}$$

$$\Psi_{2,1,+1,-\frac{1}{2}}$$

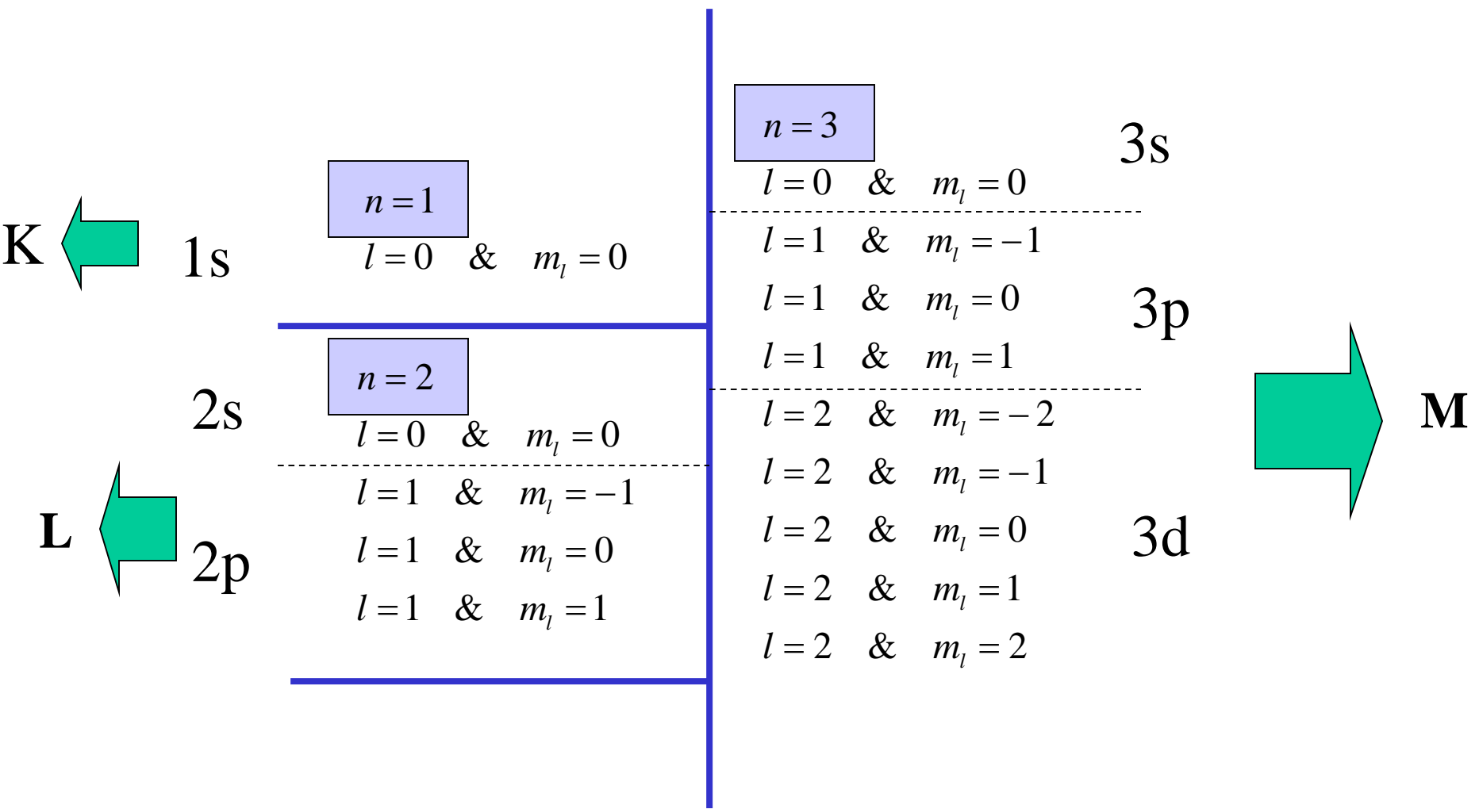
$$\Psi_{2,1,+1,+\frac{1}{2}}$$

Stan $2s^2$ 2 stany do
obsadzenia
przez
elektrony

Stan $2p^6$ 6 stanów do
obsadzenia
przez
elektrony

Powłoka L - 8 stanów

Stany elektronowe



Powłoki K, L, M, N...

n	1	2				3								
l	0	0	1		0	1			2					
m_l	0	0	-1	0	1	0	-1	0	1	-2	-1	0	1	2
m_s	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓
N	2	8				18								

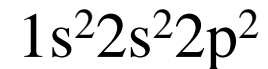
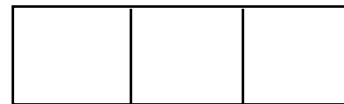
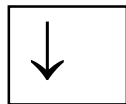
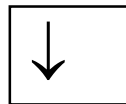
N : Liczba dozwolonych stanów

↑ obrazuje stan o $m_s = +1/2$

↓ obrazuje stan o $m_s = -1/2$

Reguła Hunda- elektrony wypełniając daną podpowłokę początkowo ustawiają swoje spiny równoległe

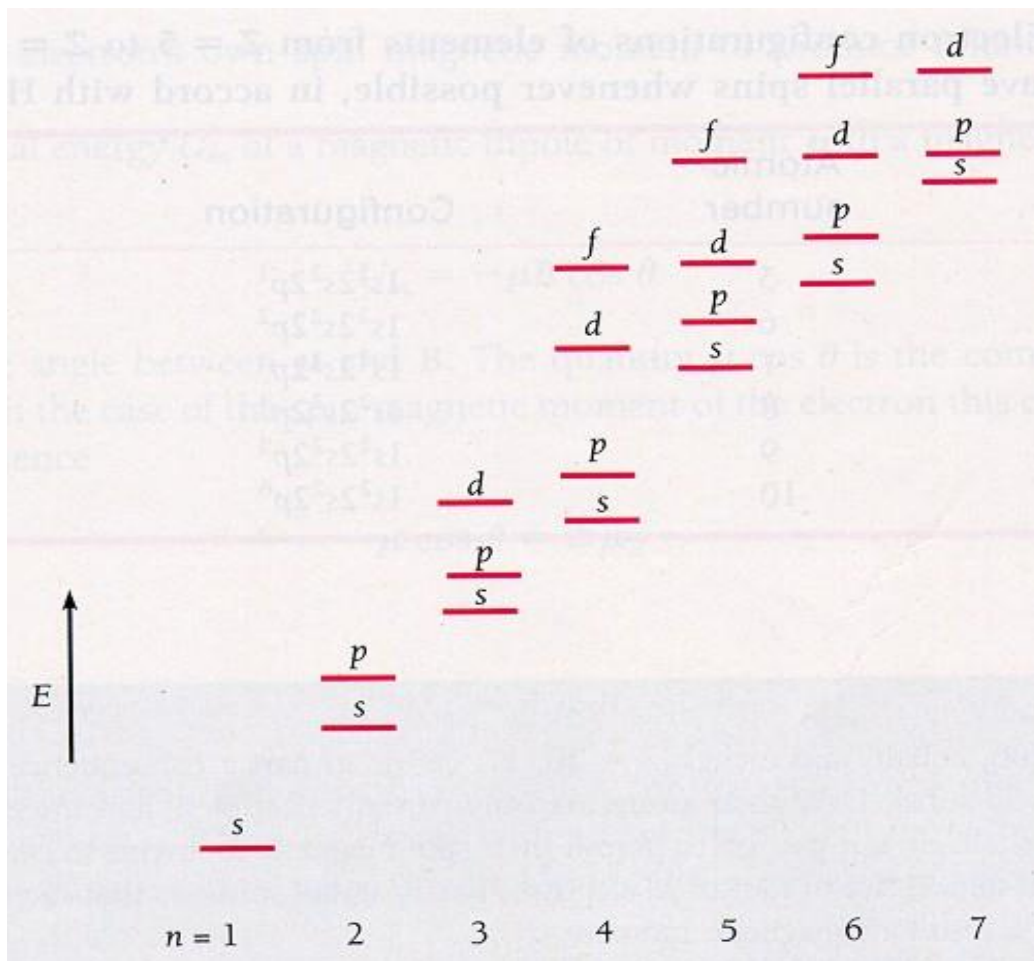
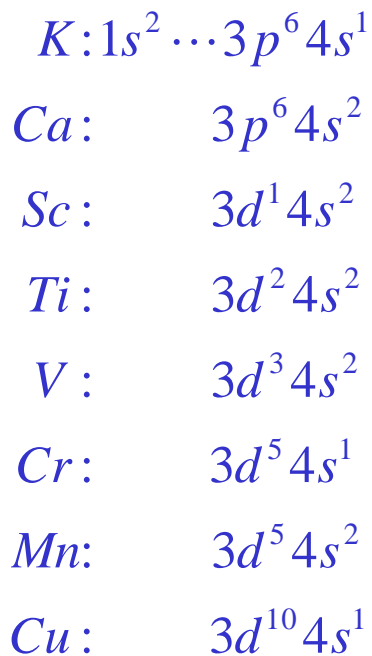
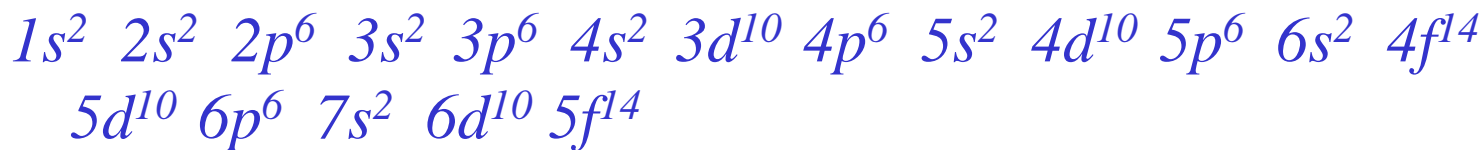
Węgiel



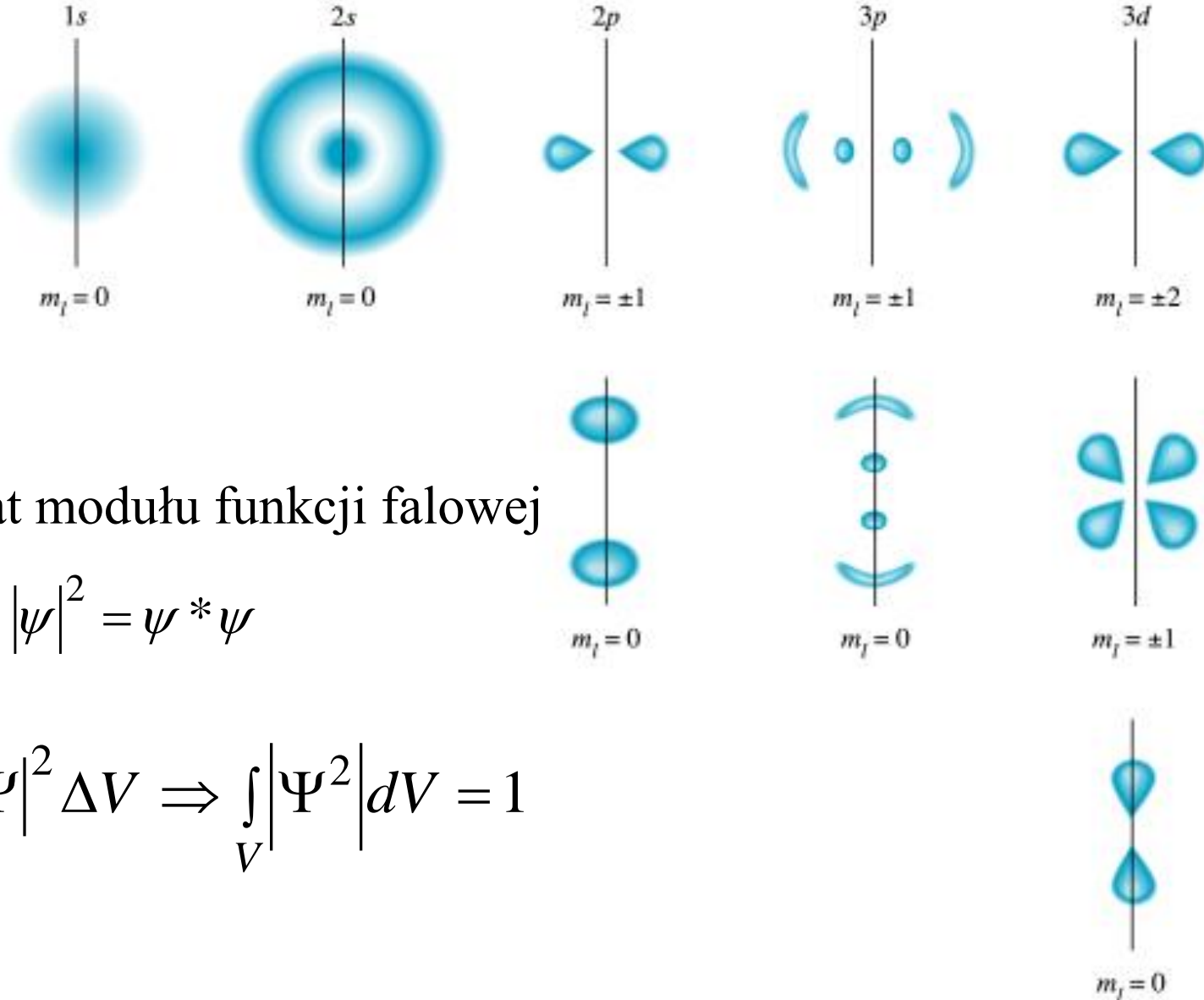
Reguła Hunda

Atom	1s	2s	2p			Electron configuration
Li						$1s^2 2s^1$
Be						$1s^2 2s^2$
B						$1s^2 2s^2 2p^1$
C						$1s^2 2s^2 2p^2$
N						$1s^2 2s^2 2p^3$
O						$1s^2 2s^2 2p^4$
F						$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne						$1s^2 2s^2 2p^6$

Konfiguracja elektronowa - kolejność zapełniania orbit



Kwadrat modułu funkcji falowej - orbitale



Kwadrat modułu funkcji falowej

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi$$

$$p = |\Psi|^2 \Delta V \Rightarrow \int_V |\Psi^2| dV = 1$$