

BRANDUOLINĖS ENERGETIKOS FIZIKINIAI PAGRINDAI

Viktorija Tamulienė

Vilniaus universitetas
Fizikos fakultetas

2015–2018 rudo
II paskaita

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Kvantinės mechanikos elementai

Boro teorija gerai tiko vandenilio atomui, bet neaprašė daugiaelektronių atomų spektrų, kurie yra kur kas sudėtingesni. Tai nenuostabu, nes Boro teorija buvo nenuosekli – elektrono judėjimui taikomi Niutono mechanikos dėsniai, o spinduliavimui – kvantiniai dėsniai, nesusiję su Niutono mechanika ir Maksvelo elektrodinamika. Be to, ši teorija neatskleidžia keisto elektronų elgesio priežasties. Tai buvo padaryta vėliau, sukūrus nuoseklią kvantinę mechaniką.

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

De Broilio bangos

Prancūzų fizikas Luiji de Broilis (Broglie) 1923 m. iš analogijos, kad šviesos bangos kai kuriuose bandymuose elgiasi kaip elementariųjų dalelių – fotonų srautai, suformulavo hipotezę, kad kitos elementariosios dalelės, kaip elektronas ar protonas, gali turėti banginių savybių, o su dalele yra susijusi banga (de Broilio banga), kurios bangos ilgis

de Broilio bangos ilgis

$$\lambda = \frac{h}{mv}, \quad (1)$$

čia h – Planko konstanta, m – dalelės masė, o v – jos greitis.

De Broilio bangos

Šis sąryšis plaukia iš vadinamųjų de Broilio lygčių, kurios sieja dalelės energiją E su bangos dažniu ω ir dalelės judesio kiekį \mathbf{p} su bangos vektoriumi \mathbf{k} :

de Broilio lygtys

$$E = \hbar\omega, \quad (2)$$

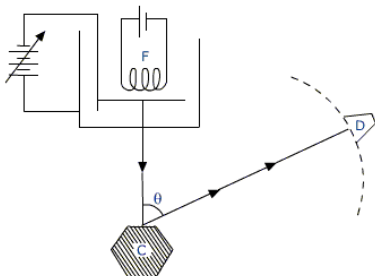
$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad (3)$$

čia ir kitur pastorinti dydžiai žymi vektorius. $\hbar = h/2\pi$.

De Broilio bangos

De Broilio bangų egzistavimą patvirtina eksperimentas, kuriame stebimas elektronų pluošto atspindys nuo kristalo paviršiaus. Tokį eksperimentą atliko Deivisonas ir Džermeris (Davisson, Germer) 1923–1927 metais.

Eksperimento schema:



Įtampos U įgretintų elektronų pluoštelis iš katodo F buvo nukreipiamas link kristalo C. Atspindėti elektronai registruojami detektoriumi D.

De Broilio bangos

Elektronų kinetinė energija randama iš šio sąryšio: $\frac{1}{2}m_e v^2 = eU$, taigi $v = \sqrt{2eU/m_e}$. Vadinasi, elektrono de Broilio bangos ilgis

Elektrono bangos ilgis

$$\lambda = 2\pi\hbar/\sqrt{2em_eU} \text{ arba, elektronui} \quad (4)$$

$$\lambda = (1,2/\sqrt{U}) \text{ nm.} \quad (5)$$

Bregos difrakcijos atveju gauname

Bregos difrakcija

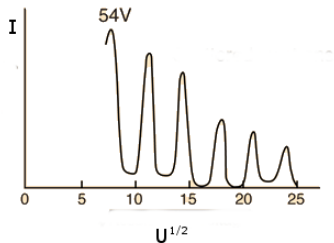
$$n\lambda_n = 2d \sin \theta \text{ arba} \quad (6)$$

$$\sqrt{U_n} = \text{const} \cdot n. \quad (7)$$

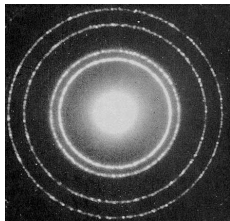
Čia n – sveikas skaičius, θ – atspindžio kampas (buvo fiksuotas). d – kristalo gardelės periodas.

De Broilio bangos

Detektuojamų atspindėtų elektronų srovės stiprio I priklausomybė nuo įtampos U :



Difrakcijos vaizdas, esant pastoviai įtampai:



Srovės stipris turi maksimumus, kurie periodiškai atsikartoja funkcijos $I(\sqrt{U})$ grafike. Taigi, elektronų pluoštelis nuo kristalo gardelės atspindi panašiai kaip Rentgeno spinduliai, kurių bangos ilgis randamas iš (5) lygties. Tai patvirtina de Broilio hipotezę apie bangines dalelių savybes.

De Broilio bangos

Pagal N. Boro teoriją leistinos orbitos atome yra tokios, kuriose susidaro stovinčios bangos, t.y. orbitoje telpa sveikas bangos ilgių skaičius.

Vandenilio atome šiose orbitose elektrono impulso mv ir orbitos ilgio $2\pi r$ sandauga yra lygi Planko konstantai h padaugintai iš sveiko skaičiaus n , t.y., $2\pi r_n mv = nh$. Arba:

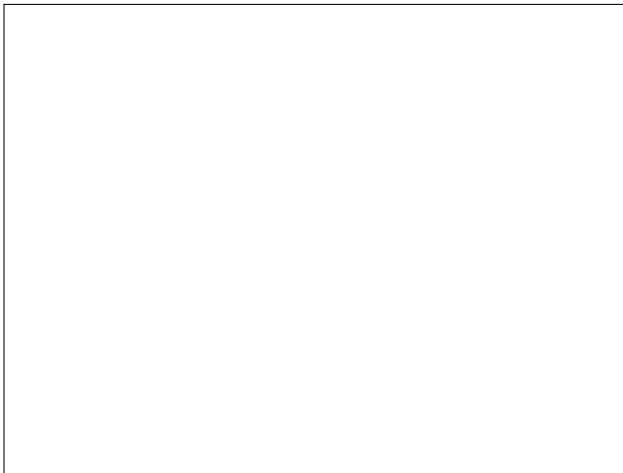
Orbitos ilgis vandenilio atome

$$2\pi r_n = n\lambda \quad (8)$$

De Broilio bangos

- Tačiau pasirodo, kad dalelė negali būti aprašyta kaip de Broilio bangų paketas. Jei bandytume sukonstruoti bangų paketą $\int A(k) \exp(i\omega t - ikx) dk$, čia $A(k)$ kinta siaurame banginių skaičių k ruože, tai toks paketas sklisdamas erdve dispersiškai plistų.
- Bangų paketo plitimas įvyksta dėl to, kad skirtingų dažnių komponentai sklinda skirtingais greičiais. Iš sąryšio $E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2}$ (gaunamas reliatyvistinėje teorijoje) gauname dispersijos sąryšį $\omega = \omega(k)$.
- Sekančioje skaidrėje pateikiama animacija, kuri demonstruoja elektrono de Broilio bangų paketo sklidimą ir plitimą. Čia dalelės greitis $v = 10^{-5}c$, pradinis bangų paketas $A(k) = \exp(-(k - k_0)^2/\Delta k^2)$. Čia $k_0 = m_e v/\hbar$, $\Delta k = k_0/10$. Laiko intervalas animacijoje 4×10^{-7} s, erdvinis (abscisių ašies) intervalas 1,6 mm.

De Broilio bangos



Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Kvantinės mechanikos pradžia

- Matome, kad toks bangų paketas per mažas sekundės dalis išplistų dvėje – dalelė smarkiai deformuotųsi. Reikia kitokio aprašymo.

Kvantinės mechanikos pradžia

- Matome, kad toks bangų paketas per mažas sekundės dalis išplistų edvėje – dalelė smarkiai deformuotųsi. Reikia kitokio aprašymo.
- 1926 m. austrų fizikas Ervinas Šrėdingeris (Schroedinger) įvedė funkciją – banginę arba psi Ψ funkciją, aprašančią elektrono bangą ir užrašė lygtį, kuri nusako banginės funkcijos kitimą. E. Šrėdingeris bandė aprašyti dalelę kaip bangų paketą, tačiau pastebėjo, kad jis per trumpą laiką išplįstų. Šrėdingerio lygtis suvienijo matricinį (matricų komutavimas) ir banginį aprašymą. Leido surasti vandenilio atomo energijų spektrą.

Kvantinės mechanikos pradžia

- Matome, kad toks bangų paketas per mažas sekundės dalis išplistų edvėje – dalelė smarkiai deformuotųsi. Reikia kitokio aprašymo.
- 1926 m. austrų fizikas Ervinas Šrėdingeris (Schroedinger) įvedė funkciją – banginę arba psi Ψ funkciją, aprašančią elektrono bangą ir užrašė lygtį, kuri nusako banginės funkcijos kitimą. E. Šrėdingeris bandė aprašyti dalelę kaip bangų paketą, tačiau pastebėjo, kad jis per trumpą laiką išplįstų. Šrėdingerio lygtis suvienijo matricinį (matricių komutavimas) ir banginį aprašymą. Leido surasti vandenilio atomo energijų spektrą.
- 1927 m. vokiečių mokslininkas V. Heizenbergas (Heisenberg, 1901 m. gimimo) suformulavo vieną iš pagrindinių kvantinės mechanikos principų – neapibrėžtumo principą, paaiškinantį, kaip tas pats objektas gali būti ir dalelė, ir banga. (1926 m. M. Bornas pasiūlo tikimybinę banginės funkcijos interpretaciją, o 1927 m. N. Boras pasiūlo principą pagal iš kurio seka dalelių–bangų dualizmas.) Kopenhagos interpretacija.

Kvantinės mechanikos pradžia

- Neapibrėžtumo principas teigia, kad vienu metu negalima kiek norima tiksliai nustatyti elektrono ar kitos dalelės padėtį ir jos judesio kiekį. Vienu metu išmatuotų elektrono koordinatės x ir judesio kiekio p neapibrėžtumų (tikslumų) Δx ir Δp sandauga negali būti mažesnė už pusę Planko konstantos

Heizenbergo neapibrėžtumo principas

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (9)$$

Kvantinės mechanikos pradžia

- Neapibrėžtumo principas teigia, kad vienu metu negalima kiek norima tiksliai nustatyti elektrono ar kitos dalelės padėtį ir jos judesio kiekį. Vienu metu išmatuotų elektrono koordinatės x ir judesio kiekio p neapibrėžtumų (tikslumų) Δx ir Δp sandauga negali būti mažesnė už pusę Planko konstantos

Heizenbergo neapibrėžtumo principas

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (9)$$

- Ši nelygybė vadinama neapibrėžtumo ryšiu. Ji rodo, kad kuo mažesnis yra elektrono padėties neapibrėžtumas, tuo didesnis yra jos judesio kiekio bei greičio neapibrėžtumas. Ir atvirkščiai: kuo tiksliau žinome dalelės judesio kiekį, o tuo pačiu ir jos de Broilio bangos ilgį (1), tuo mažiau apibrėžta dalelės padėtis erdvėje.

Kvantinės mechanikos pradžia

- Klasikinėje mechanikoje dalelės padėtį ir greitį galima nustatyti norimu tikslumu ir numatyti jos tolimesnį judėjimą. Tuo tarpu kvantinėje mechanikoje, išsprendus Šrėdingerio lygtį ir radus elektrono banginę funkciją, galima tik nustatyti tikimybę elektronui būti vienoje ar kitoje vietoje, o taip pat tikimybės elektronui peršokti į kitas būsenas. Elektrono orbitą atome reikia suprasti ne kaip judėjimą kreive, o kaip tikimybės rasti elektroną vienoje ar kitoje vietoje prie branduolio skirstinį.
- Šiais laikais kvantinė mechanika gali atsakyti į kiekvieną klausimą apie atomo sandarą ir elektronų apvalkalų savybes, nors kiekybinė daugielektroninių atomų teorija yra gana sudėtinga.

Kvantinės mechanikos pradžia

"Senoji" kvantinė mechanika

- Kirkhoff
- Planck
- Einstein
- Bohr
- de Broglie

Matricinė kvantinė mechanika

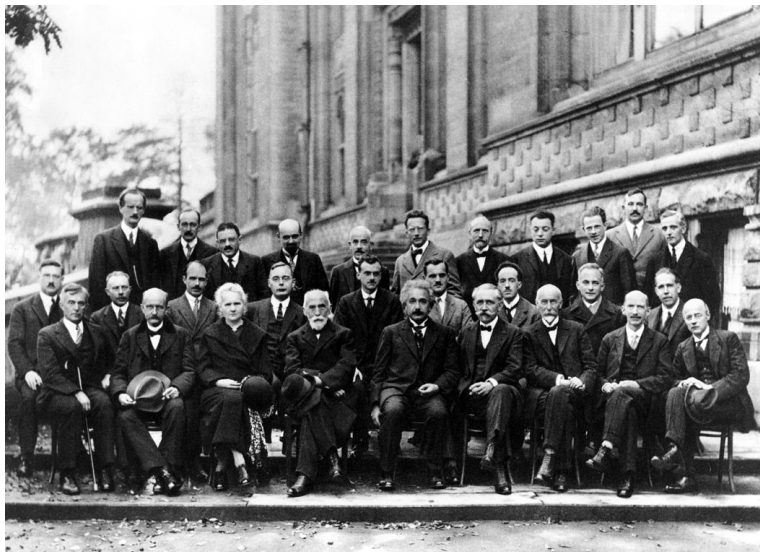
- Heisenberg
- Dirac, Pauli

Kopenhagos interpretacija

- Schroedinger
- Born, Bohr

Kvantinės mechanikos pradžia

V Solvay fizikos konferencija, 1927 m



Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Pagrindinės sąvokos

- Banginė funkcija $\Psi(\mathbf{r})$. Dydis $|\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ nusako tikimybę rasti elektroną tarp \mathbf{r} ir $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$.
- Vietoje fizikinių dydžių F įvedami fizikiniai operatoriai \hat{F} .
- Svarbi operatoriaus komutatoriaus sąvoka. Dviejų operatorių A ir B komutatorius yra $[AB] = AB - BA$. Jei komutatorius lygus nuliui, sakoma, kad operatoriai komutuoja. Jei komutatorius nelygus nuliui, tai operatoriai nekomutuoja.
- Koordinatę x pakeičia operatorius x , taigi šiuo atveju operatorius sutampa su fizikiniu dydžiu. Judesio kiekį p_x pakeičia operatorius $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Arba vektorius $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$
- Galime suformuoti judesio kiekio momento operatorių. Judesio kiekio momentas \mathbf{L} yra vektorinė sandauga $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Taigi, $\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla)$

Pagrindinės sąvokos

- Tikrinių verčių uždavinys: $\hat{A}\Psi_a = a\Psi_a$. a – tikrinė vertė, Ψ_a – tikrinė funkcija.
- Jei du operatoriai komutuoja, tai jų tikrinių verčių uždavinius tenkina tos pačios tikrinės funkcijos.
- Šrėdingerio lygtis aprašo banginės funkcijos Ψ kitimą laike:

Šrėdingerio lygtis

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \quad (10)$$

\hat{H} yra vadinamasis Hamiltono operatorius.

- Jei \hat{H} nekinta laike, tuomet $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$ ir

Tikrinių verčių uždavinys

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (11)$$

T. y., sprendžiamas tikrinių verčių uždavinys. E yra energija.

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Daugiaelektroniai atomai

- Svarbiausia problema atomo fizikoje – rasti atomo banginę funkciją, kurią turint galima apskaičiuoti visas stebimas atomų savybes. Atomams, turintiems daug elektronų, banginės funkcijos skaičiavimas tampa labai sudėtingu, tiksliai neišsprendžiamu uždaviniu. Todėl buvo sukurti supaprastinti, artutiniai sudėtingų atomų savybių apskaičiavimo metodai. Vienas iš pagrindinių artėjimų yra vienelektronis artinys, kada kiekvienas elektronas aprašomas sava bangine funkcija, o visos sistemos funkcija yra konstruojama iš atskirų elektronų banginių funkcijų.

Daugiaelektroniai atomai

- Svarbiausia problema atomo fizikoje – rasti atomo banginę funkciją, kurią turint galima apskaičiuoti visas stebimas atomų savybes. Atomams, turintiems daug elektronų, banginės funkcijos skaičiavimas tampa labai sudėtingu, tiksliai neišsprendžiamu uždaviniu. Todėl buvo sukurti supaprastinti, artutiniai sudėtingų atomų savybių apskaičiavimo metodai. Vienas iš pagrindinių artėjimų yra vienelektronis artinys, kada kiekvienas elektronas aprašomas sava bangine funkcija, o visos sistemos funkcija yra konstruojama iš atskirų elektronų banginių funkcijų.
- Paprasčiausios vienelektronės atomo banginės funkcijos – *vandeniliškosios*, t.y. sistemos, sudarytos iš nejudančio branduolio, kurio elektros krūvis Ze (Z – atomo eilės numeris periodinėje elementų lentelėje), ir apie jį skriejančio elektrono, banginės funkcijos. Tokios sistemos gali būti vandenilio atomas ($Z = 1$), helio jonas He^+ ($Z = 2$), ličio dvikrūvis jonas Li^{2+} ($Z = 3$) ir t.t.

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- **Vandeniliškasis atomas**
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Vandeniliškasis atomas

- Vandeniliškojo atomo Hamiltoniano operatorius (hamiltonianas) susideda iš dviejų dalių: kinetinės energijos ir Kulono elektrostatinio lauko potencinės energijos:

Vandeniliškojo atomo Hamiltonianas

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - k_c \frac{Ze^2}{r}. \quad (12)$$

Čia r žymi atstumą tarp elektrono ir branduolio. Pirmasis dėmuo yra kinetinės energijos operatorius, antrasis - potencinės.

Vandeniliškasis atomas

- Vandeniliškojo atomo Hamiltoniano operatorius (hamiltonianas) susideda iš dviejų dalių: kinetinės energijos ir Kulono elektrostatinio lauko potencinės energijos:

Vandeniliškojo atomo Hamiltonianas

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - k_c \frac{Ze^2}{r}. \quad (12)$$

Čia r žymi atstumą tarp elektrono ir branduolio. Pirmasis dėmuo yra kinetinės energijos operatorius, antrasis - potencinės.

- Kadangi hamiltonianas nepriklauso nuo laiko, tai tenka spręsti tikrinių verčių uždavinį (11). Šį uždavinį pavyksta išspręsti ir gauti tikrines funkcijas $\psi(\mathbf{r})$ bei tikrines vertes E .

Vandeniliškasis atomas

- Čia užrašysime atsakymą. Pažymėsime, kad hamiltoniane (12) operatorius ∇^2 sferinėje koordinačių sistemoje (r, θ, φ) gali būti užrašytas tokiu pavidalu:

Operatorius ∇^2

$$\nabla^2 = \widehat{K}_r + \frac{1}{r^2} \widehat{\Lambda}_{\theta, \varphi}, \quad \text{čia} \quad (13)$$

$$\widehat{K}_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad (14)$$

$$\widehat{\Lambda}_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = -\frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2}. \quad (15)$$

- Operatorius ∇^2 susideda iš radialiosios dalies \widehat{K}_r ir dalies, kuri priklauso nuo judesio kiekio momento kvadrato: \widehat{L}^2 .

Vandeniliškasis atomas

- Šie du operatoriai – \widehat{K}_r ir \widehat{L}^2 – tarpusavy komutuoja, todėl banginė funkcija $\psi(r, \theta, \varphi)$ užrašoma kaip sandauga šių operatorių tikrinių funkcijų.
- Be to, operatorius \widehat{L}^2 komutuoja su judesio kiekio momento projekcijos operatoriumi $\widehat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$. Ši operatorių atitinka tikrinė vertė $m\hbar$: $\widehat{L}_z \Phi_m(\varphi) = m\hbar \Phi_m(\varphi)$. Arba $L_z = m\hbar$.
- Tuomet operatoriaus \widehat{L}^2 tikrinė funkcija yra sandauga $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ ir tikrinių verčių uždavinys sprendžiamas taip: $\widehat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Arba $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$.
- Vandenilio atomo hamiltoniano tikrinė funkcija yra sandauga $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

Vandeniliškasis atomas

- Tikrinė hamiltono vertė - energija:

Energija

$$E_n = -E_0 \frac{Z^2}{2n^2} = -\frac{hR}{n^2} Z^2 \quad (16)$$

- $n = 1, 2, 3, \dots$ vadinamas pagrindiniu kvantiniu skaičiumi.
- $l = 0, 1, \dots, n - 1$ vadinamas orbitiniu kvantiniu skaičiumi.
- $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ vadinamas magnetiniu kvantiniu skaičiumi.

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- **Energijos lygmenų išsigimimas**
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Energijos lygmenų išsigimimas

Kaip matome, atomo energija priklauso tik nuo pagrindinio kvantinio skaičiaus n , tačiau esant apibrėžtai n vertei galimas tam tikras kvantinių skaičių l ir m rinkinys. Todėl kiekvieną energijos vertę E_n , išskyrus E_1 , atitinka keletas banginių funkcijų ψ_{nlm} , kurių l ar m vertės yra skirtingos. Atomas skirtingose būsenose turi tą pačią energiją – dėl to sakoma, kad atomo energijos lygmuo yra išsigimęs. Apibrėžtam pagrindiniam kvantiniam skaičiui n orbitinio kvantinio skaičiaus l galimos vertės yra nuo 0 iki $n - 1$, o kiekvieną skaičiaus l vertę atitinka $2l + 1$ magnetinio skaičiaus m vertė. Todėl būsenos su apibrėžtu n išsigimimo laipsnis yra

Išsigimimo laipsnis

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \quad (17)$$

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Elektronų konfigūracija

Elektronų pasiskirstymas atome pagal būsenas vadinamas jų konfigūracija. Ji žymima tam tikrais simboliais. Skaitmeninis simbolis rodo būsenos pagrindinį kvantinį skaičių n , orbitinio (šalutinio) kvantinio skaičiaus l vertes priimta nurodyti raidėmis.

l	0	1	2	3	4	5	6	7	...
	s	p	d	f	g	h	i	k	...

lentelė: Šalutinio kvantinio skaičiaus žymėjimas raidėmis

Pastarosios (l) raidės rodiklio vietoje esantis skaičius rodo toje būsenoje esančių elektronų skaičių. Pavyzdžiui, užrašymas $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ (tai Na atomo elektronų konfigūracija) rodo, kad būsenoje su $n = 1$, $l = 0$ yra 2 elektronai, būsenoje $n = 2$, $l = 0$ – irgi 2, būsenoje $n = 2$, $l = 1$ yra 6, o būsenoje $n = 3$, $l = 0$ randasi vienas elektronas.

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Konfigūracijos lyginumas

Konfigūracijas galima apibūdinti jų lyginumu. Jeigu pakeitus visų atomo elektronų koordinatės \mathbf{r} į priešingos krypties koordinatės $-\mathbf{r}$ sistemos banginė funkcija nepakinta, tai konfigūracija yra lyginė, o jeigu keičia ženklą – nelyginė.

Pasirodo, kad konfigūracijos lygiškumas sutampa su visų elektronų orbitinių kvantinių skaičių l_i (čia i – elektrono numeris) sumos $\sum_i l_i$ lygiškumu. Na atomo konfigūracija $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ yra lyginė, nes $2 \times 0 + 2 \times 0 + 6 \times 1 + 1 \times 0 = 6$ – lyginis skaičius.

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas

Mikrodalelės, kurių fizinės savybės yra vienodos, yra vadinamos tapatingomis. Klasikinėje fizikoje “sunumeravus” tapatingąsias daleles, galima sekti jų trajektoriją. Kvantmechaniniu požiūriu mikrodalelei nebūdingas judėjimas trajektorija. Dalelė aprašoma bangine funkcija, kurios modulio kvadratas nusako tik tikimybę aptikti dalelę tam tikroje erdvės vietoje. Tuo remiantis, kvantinėje mechanikoje suformuluotas vadinamasis *tapatingumo principas*: tapatingųjų dalelių sistemos būseną nepakinta, kai sistemos dalelės sukeičiamos vietomis. Iš šio principo seka, kad sistemos banginė funkcija dalelių sukeitimo vietomis požiūriu turi būti arba simetrinė (kai sukeitus daleles vietomis ji nekinta) arba antisimetrinė (kai banginė funkcija keičia ženklą į priešingą).

Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas

Elektronas, kaip ir daugelis kitų mikrodalelių, pasižymi savuoju judesio kiekio momentu, trumpai vadinamu sukiniu. Su sukiniu susijęs savasis magnetinis momentas. Įvairių mikrodalelių sukiniai yra skirtingi, tačiau jie, kaip ir bet koks kitas judesio kiekio momentas, kvantinėje mechanikoje yra kvantuoti ir išreiškiami formule

Sukinys

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}. \quad (18)$$

čia s – sukinio kvantinis skaičius, kuris gali būti sveikas ($s = 0, 1, 2, \dots$) arba pusinis ($s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$). Dalelės, kurių sukinio kvantinis skaičius sveikas, vadinamos *bozonais*, o kurių pusinis – *fermijonais*.

Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas

- Kvantinėje teorijoje įrodyta, kad sveikąjį sukinio kvantinį skaičių turinčios dalelės aprašomos simetrinėmis banginėmis funkcijomis, o dalelės, kurių sukinio kvantinis skaičius yra pusinis – antisimetrinėmis. Iš to, seka, kad vienoje kvantinėje sistemoje negali būti dviejų (ar daugiau) fermionų, jeigu jų visi kvantiniai skaičiai yra vienodi. Tai *Paulio draudimo taisyklė*.
- Elektrono sukinio kvantinis skaičius yra $1/2$. Elektronai – fermionai, todėl Paulio principas draudžia dviem elektronams atome turėti visai vienodus kvantinius skaičius. Tačiau sukiniui tinka bendra judesio kiekio kvantavimo sąlyga, ir jo projekcija kuria nors kryptimi gali būti $+\frac{1}{2}\hbar$ arba $-\frac{1}{2}\hbar$, nes

Sukinio projekcija

$$S_z = -m_s\hbar, \dots, +m_s\hbar, \quad (19)$$

čia m_s – sukinio projekcijos kvantinis skaičius.

Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas

Jeigu s sveikas skaičius, tai ir visi m_s – sveiki, jeigu s pusinis skaičius, tai ir visi m_s – pusiniai.

Taigi, atomo elektrono būseną pilnai aprašo keturi kvantiniai skaičiai.

Kvantinio skaičiaus pavadinimas	Žymėjimas	Galimos vertės
Pagrindinis	n	$1, 2, 3, \dots, \infty$
Orbitinis (šalutinis)	l	$0, 1, 2, \dots, n - 1$
Magnetinis	m	$0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$
Sukinio magnetinis	m_s	$\pm 1/2$

lentelė: Atomo elektrono būseną nusakantys kvantiniai skaičiai

Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas

Pagal Paulio principą būsenoje su apibrėžtais visais keturiais kvantiniais skaičiais $nlmm_s$ gali būti tik vienas elektronas (arba nebūti nei vieno), būsenose su duotais kvantiniais skaičiais, aprašančiais tik erdvinę elektrono būseną ir neapibrėžiančiais jo sukinio projekcijos nlm , gali būti iki 2-jų elektronų. Atitinkamai didžiausias elektronų skaičius posluoksnyje su apibrėžtais pagrindiniu ir šalutiniu kvantiniais skaičiais nl gali būti iki $2(2l + 1)$ elektronų. Sluoksnyje, kurio pagrindinis skaičius n , yra n^2 būsenų, kurių dydžiai l arba m skiriasi. Pagal Paulio principą kiekvienoje tokioje būsenoje gali būti 2 elektronai su skirtinga dydžio m_s verte ($m_s = 1/2$ arba $m_s = -1/2$). Taigi, būsenoje n gali būti ne daugiau kaip $2n^2$ elektronai. Šie elektronai su tuo pačiu pagrindiniu kvantiniu skaičiumi sudaro elektronų sluoksnį. Dažnai elektronų sluoksniai žymimi didžiosiomis raidėmis.

Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas

Pagrindinis kvantinis skaičius n	1	2	3	4	5	6	7	...
Sluoksnio simbolis	K	L	M	N	O	P	Q	...

lentelė: Atomo elektrono būseną nusakantys kvantiniai skaičiai

To paties sluoksnio elektronai, kurių vienodas šalutinis kvantinis skaičius l sudaro posluksnį. s posluksnyje ($l = 0$) gali būti iki 2-jų elektronų, p posluksnyje ($l = 1$) – iki 6-ių elektronų ir t.t. Toliau lentelėje išvardinti sluoksniai, juos sudarantys posluoksniai, sluoksnių ir posluoksnių žymėjimas simboliais bei juose galimas didžiausias elektronų skaičius.

Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas

Pagrindinis kvantinis skaičius n	1	2		3			4				5				
Sluoksnio simbolis	K	L		M			N				O				
Didžiausias elektronų skaičius sluoksnyje	2	8		18			32				50				
Šalutinis kvantinis skaičius l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4
Posluoksnio simbolis	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f$	$5g$
Didžiausias elektronų skaičius posluoksnyje	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18

lentelė: Elektronų pasiskirstymas sluoksniuose ir posluoksniuose

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- **Periodinė elementų sistema**
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Periodinė elementų sistema

- Kvantinė mechanika paaiškina elementų išsidėstymą periodinėje sistemoje. Atomo branduolio krūvis yra Ze , kur Z – cheminio elemento numeris periodinėje lentelėje. Periodinėje lentelėje, pereinant nuo vieno elemento prie kito, vienetu didėja branduolio krūvis, o taip pat ir atomo elektronų skaičius Z . *Elektronai atome pasiskirsto pagal mažiausios energijos principą ir pagal Paulio principą.*
- Elementai yra išsidėstę septyniuose perioduose ir aštuoniose grupėse. Pirmasis periodas prasideda vandeniliu ir baigiasi heliu. Kiti 5 periodai prasideda vienu iš šarminių metalų (Li, Na, K, Rb, Cs) ir baigiasi inertinėmis dujomis (Ne, Ar, Kr, Xe, Rn). Septintasis periodas prasideda šarminiu metalu franciu (Fr), o paskutiniojo elemento nėra. Toje pačioje grupėje esančių elementų cheminės savybės yra panašios.

Periodinė elementų sistema

Group→1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18
 ↓Period

1	1 H																2 He	
2	3 Li	4 Be										5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3	11 Na	12 Mg										13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo

*	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
**	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Periodinė elementų sistema

Šarminiai metalai yra pirmoje grupėje. Ju elektronų konfigūracijos yra pateiktos lentelėje.

${}_{3}\text{Li}$	$1s^2 2s$				
${}_{11}\text{Na}$...	$2s^2 2p^6 3s$			
${}_{19}\text{K}$	$3s^2 3p^6 4s$		
${}_{37}\text{Rb}$	$3d^{10} 4s^2 4p^6 5s$	
${}_{55}\text{Cs}$	$4d^{10} 5s^2 5p^6 6s$
${}_{87}\text{Fr}$	$4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2 6p^6 7s$

lentelė: Šarminių metalų atomų elektronų konfigūracijos

Visų šarminių metalų aukščiausiame energijos lygmenyje yra tiksliai vienas ns elektronas. Jis turi mažiausią ryšio energiją, reakcijos metu lengvai atiduodamas kitiems elementams, todėl šarminiams metalams būdingas didelis cheminis aktyvumas.

Periodinė elementų sistema

- Vandenilio atomo elektronas yra $1s$ lygmenyje. Todėl vandenilis panašus į šarminius metalus. Antra vertus, galima teigti, kad vandenilio atomo lygmenyje $1s$ trūksta vieno elektrono. Todėl vandenilio cheminės savybės yra panašios ir į septintoje grupėje esančius *halogenus* F, Cl, Br, I, At. Kiekvienas halogenas yra priešpaskutinis periodo elementas. Jų konfigūracijoje trūksta vieno elektrono viendaleliams lygmenims užpildyti.
- Antroje grupėje yra *žemės šarminiai metalai* Mg, Ca, Sr, Ba, Ra. Jų aukščiausiame lygmenyje esantys du ns^2 elektronai reakcijos metu yra atiduodami, todėl šarminiai žemės metalai yra divalenčiai.
- Aštuntos grupės elementai yra *inertinės dujos* He, Ne, Ar, Kr, Xe. Nesužadintų inertinių dujų elektroniniai lygmenys yra užpildyti: ${}_2\text{He}(1s^2)$, ${}_{10}\text{Ne}(1s^2 2s^2 2p^6)$, ${}_{18}\text{Ar}(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6)$ ir t.t. Todėl inertinių dujų cheminis aktyvumas yra silpnas.

Periodinė elementų sistema

Matome, kad periodinį išsidėstymą nulemia atomų elektronų konfigūracijų periodiškumas. Lengvųjų atomų elektronų sluoksniai ir posluoksniai užpildomi eilės tvarka – pirmiausia visiškai užpildomas tas, kurio kvantinis skaičius mažiausias, po to pradedamas pildyti kitas, kurio kvantinis skaičius vienetu didesnis ir t.t. Tačiau didėjant atomo elektronų skaičiui šis reguliarumas sutrinka. Jau kaliui ($Z = 19$) $3d$ būsenos energija yra didesnė negu $4s$ būsenos. Dėl to kalio valentinis elektronas pradeda $4s$, o ne $3d$ posluoksnį ir tik pradedant skandžiu ($Z = 21$) pradedamas pildyti $3d$ posluoksnis. Tai taip vadinamos *Klečkovskio taisyklės* pasireiškimas: pradžioje pildosi posluoksniai su mažiausia $n + l$ verte, o kai ji vienoda – su didesniu l . Taigi didėjant Z periodinėje elementų lentelėje, išorinio sluoksnio užpildymas periodiškai kartojasi.

Periodinė elementų sistema

- Elementai, kurių eilės numeriai nuo 57 iki 71, užima tą patį periodinės sistemos langelį. Jie vadinami *lantanidais*, sudaro tik $1,49 \cdot 10^{-2}$ proc. Žemės plutos masės, todėl dar vadinami *retųjų žemių* elementais. Lantanidų elektronų bendrą konfigūraciją galima užrašyti taip $\dots 4f^{1 \div 14} 5s^2 5p^6 6s^2$. Didėjant Z , elektronų daugėja ne išoriniame, o trečiame nuo išorės $4f$ sluoksnyje. Todėl jų cheminės ir fizinės savybės yra panašios.
- Analogiškai už aktinio ($Z = 89$) esančiu 14 cheminių elementų grupė vadinama *aktinidais*. Ji prasideda toriu ($Z = 90$) ir baigiasi laurenciu ($Z = 103$). Aktinidų bendra elektronų konfigūracija yra $\dots 5f^{1 \div 14} 6s^2 6p^6 7s^2$ – didėjant Z , elektronų daugėja irgi trečiame nuo išorės $5f$ sluoksnyje. Iš aktinidų tik trys (toris, protaktinis ir uranas) randami gamtoje, o kiti gaunami dirbtiniu būdu branduolinėse reakcijose. Dirbtiniai aktinidai vadinami *transuraniniais elementais*.

Periodinė elementų sistema

Group→1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18
 ↓Period

1	1 H																2 He	
2	3 Li	4 Be										5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3	11 Na	12 Mg										13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo

*	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
**	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Sudėtingų atomų būsenos. Termai

Kiekvienas atomo elektronas turi orbitinį l_i ir sukinį s_i (čia i – elektrono eilės numeris) judesio kiekio momentus. Juos visus sudėję gauname pilnutinį atomo elektronų judesio kiekio momentą \mathbf{J} . Pastarąjį galima surasti įvairiais būdais. Atsižvelgiant į sąveikų tarp elektrono orbitinių ir sukinių magnetinių momentų santykius, galimas įvairus judesio kiekio momentų sumavimas. Dažniausiai stipriau sąveikauja skirtingų elektronų orbitiniai magnetiniai ir atskirai sukinių momentai. Tokiu atveju sumuojami visų elektronų orbitiniai judesio kiekio momentai ir gaunamas pilnutinis atomo orbitinis momentas \mathbf{L} , o sumuojant visų elektronų sukinius s_i , randamas pilnutinis viso atomo sukinytis \mathbf{S} . Pastebėsime, kad visai užpildytų (uždarų) elektronų sluoksnių ir posluoksnių tiek orbitinis, tiek sukinių momentai lygūs nuliui. Todėl tenka sumuoti tik tai elektronų, esančių nevisai užpildytuose (atviruose) posluoksniuose orbitinius ir sukinių momentus. Sumuodami \mathbf{L} ir \mathbf{S} gauname pilnutinį atomo judesio kiekio momentą $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ir atitinkamus kvantinius skaičius L , S ir J .

Sudėtingų atomų būsenos. Termai

Priimta kvantinius skaičius L , S ir J nurodyti tokiu būdu. Skaičiaus L vertės žymimos raidėmis

L	0	1	2	3	4	5	6	7	...
	S	P	D	F	G	H	J	L	...

lentelė: Orbitinio momento žymėjimas

S vertės rodo skaičius $2S + 1$, rašomas orbitinį momentą L žyminčių raidžių kairėje pusėje viršuje, o kvantinis skaičius J – dešinėje pusėje apačioje:

Termų žymėjimas

$${}^{2S+1}S_J, {}^{2S+1}P_J, {}^{2S+1}D_J, \dots \quad (20)$$

Simbolis ${}^{2S+1}L$ vadinamas termu, o kvantinis skaičius J žymi *termo komponentus*. Termai 1L vadinami *singuletiniais*, 2L – *dubletiniais*, 3L – *tripletiniais* ir t.t.

Turinys

1 Kvantinės mechanikos elementai

- De Broilio bangos
- Kvantinės mechanikos pradžia
- Pagrindinės sąvokos

2 Daugiaelektroniai atomai

- Vandeniliškasis atomas
- Energijos lygmenų išsigimimas
- Elektronų konfigūracija
- Konfigūracijos lyginumas
- Mikrodalelių tapatingumas. Paulio principas
- Periodinė elementų sistema
- Sudėtingų atomų būsenos. Termai
- Jonizacijos potencialas

Jonizacijos potencialas

Nagrinėdami vandenilišką atomą gavome, kad pilnutinė atomo elektrono energija E_n yra neigiama. Kai kvantinis skaičius $n \rightarrow \infty$, energija $E_\infty \rightarrow 0$ ir elektronas tampa laisvas, o atomas – *jonizuotas*. Vandeniliškojo atomo jonizacijos energija (darbas, reikalingas norint jonizuoti atom.) yra

Jonizacijos energija

$$A_i = E_\infty - E_n = E_0 \frac{Z^2}{2n^2} = \frac{Ry}{n^2} Z^2 = \frac{hR}{n^2} Z^2. \quad (21)$$

Jis priklauso nuo elektrono energijos būsenos, nusakomos kvantiniu skaičiumi n . Jonizacijos energija dažniausiai išreiškiama elektronvoltais arba apibūdinama jonizacijos potencialu $U_i = A_i/e$.

Jonizacijos potencialas

- Gali būti apskaičiuojamas arba išmatuotas įvairių atomų pirmasis jonizacijos potencialas U_{i1} , kai pašalinamas nesužadinto atomo valentinis elektronas. Vandenilio atomui ($Z = 1, n = 1$) $U_{i1} = 13,6$ V. 2 priede pateiktos visų nesužadintų atomų pirmosios jonizacijos energijos. Matyti, kad kintant atomo eilės numeriui, E_{i1} kinta periodiškai: ji mažiausia šarminių metalų, o didžiausia – inertinių dujų.
- Sužadintųjų atomų jonizacijos energija mažesnė ir labai sparčiai mažėja, didėjant sužadintojo elektrono pagrindiniam kvantiniam skaičiui n . Jonizuotų atomų (jonų) jonizacijos potencialai pastebimai didesni negu neutraliųjų atomų ir greitai auga, didėjant jonizacijos laipsniui. Pavyzdžiui vieną kart jonizuoto Li^+ jonizacijos potencialas (antrasis) $U_{i2} = 75,64$ V, o dukart jonizuoto Li^{++} (trečiasis) jonizacijos potencialas $U_{i3} = 122,45$ V.

Jonizacijos potencialas

- Galima išmušti elektroną iš gilesnių (artimų branduoliui, vidinių) atomo sluoksnių. Tokį elektroną stipriau veikia atomo branduolio trauka, o išorinių elektronų kuriamas elektrinis potencialas arti branduolio yra palyginti nedidelis. Jonizacijos energija iš vidinių sluoksnių gali būti išreikšta pavidalu:

Jonizacijos energija iš vidinių sluoksnių

$$A_i(nl) = \frac{hR}{n^2} (Z - \sigma_{nl})^2, \quad (22)$$

čia $Z_{ef} = Z - \sigma_{nl}$ – efektyvusis branduolio krūvis, σ_{nl} vadinama ekranavimo konstanta. Jos vertė lemia arti atomo branduolio esantys elektronai, sumažinantys efektyvų branduolio lauką, kuriame juda jonizuojamas elektronas.

- Elektronas iš tolimesnio nuo branduolio sluoksnio peršokdamas į atsiradusią po vidinio sluoksnio jonizacijos vakansiją gali išspinduliuoti didelės energijos fotoną – Rentgeno spindulius.