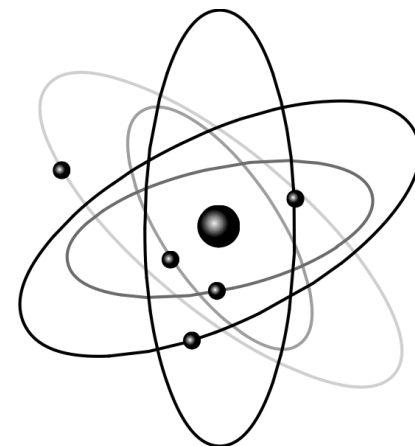




Seminarium WFiIS,
21 października 2016



Układ okresowy pierwiastków w świetle obliczeń struktury elektronowej

Andrzej Zięba

Plan:

- 1. Motywacja podjęcia tematu**
- 2. Obliczenia struktury elektronowej**
- 3. Metale: problemy (i) – (iv)**
-
- 5. Półprzewodniki, półmetale, izolatory**
- 6. Podsumowanie**

Motywacja podjęcia tematu:

a) różne określenia rodzajów pierwiastków na rysunkach układu okresowego.

W szczególności różnie przedstawiana jest:

- granica metal przejściowy-metal prosty
- granica metal prosty - półmetal
- brak pojęcia półprzewodnika
- różne określenie polonu

Resnick + Halliday, PWN 1971

Dodatek D

Okresowy układ pierwiastków

Masy atomowe wyrażone są w atomowych jednostkach masy (a.j.m.), przy czym przy wiastków nietrwałych podana jest (w nawiasach) liczba masowa najbardziej trwałego

Grupa →		I	II	III	IV
Okres	Seria				
1	1	1 H 1,00797			
2	2	3 Li 6,939	4 Be 9,0122	5 B 10,811	6 C 12,01115
3	3	11 Na 22,9898	12 Mg 24,312	13 Al 26,9815	14 Si 28,086
4	4	19 K 39,102	20 Ca 40,08	21 Sc 44,956	22 Ti 47,90
	5	29 Cu 63,54	30 Zn 65,37	31 Ga 69,72	32 Ge 72,59
5	6	37 Rb 85,47	38 Sr 87,62	39 Y 88,905	40 Zr 91,22
	7	47 Ag 107,870	48 Cd 112,40	49 In 114,82	50 Sn 118,69
6	8	55 Cs 132,905	56 Ba 137,34	57-71 Lantanowce ^{a)}	72 Hf 178,49
	9	79 Au 196,967	80 Hg 200,59	81 Tl 204,37	82 Pb 207,19
7	10	87 Fr [223]	88 Ra [226]	89 Aktynowce ^{b)}	

^{a)} Lantanowce	57 La 138,91	58 Ce 140,12	59 Pr 140,907	60 Nd 144,24	61 Pm [145]	62 Sm 150,35
--------------------------	-----------------	-----------------	------------------	-----------------	----------------	-----------------

^{b)} Aktynowce	89 Ac [227]	90 Th 232,038	91 Pa [231]	92 U 238,04	93 Np [237]	94 Pu [242]
-------------------------	----------------	------------------	----------------	----------------	----------------	----------------

jęto, że jeden atom izotopu węgla ^{12}C ma masę równą (dokładnie) 12 a.j.m. Dla pier-
lub najlepiej znanego izotopu

V	VI	VII	VIII	0
				2 He 4,0026
7 N 14,0067	8 O 15,9994	9 F 18,9984		10 Ne 20,183
15 P 30,9738	16 S 32,064	17 Cl 35,453		18 Ar 39,948
23 V 50,942	24 Cr 51,996	25 Mn 54,9380	26 Fe 27 Co 28 Ni 55,847 58,9332 58,71	
33 As 74,9216	34 Se 78,96	35 Br 79,909		36 Kr 83,80
41 Nb 92,906	42 Mo 95,94	43 Tc [99]	44 Ru 45 Rh 46 Pd 101,07 102,905 106,4	
51 Sb 121,75	52 Te 127,60	53 I 126,9044		54 Xe 131,30
73 Ta 180,948	74 W 183,85	75 Re 186,2	76 Os 77 Ir 78 Pt 190,2 192,2 195,09	
83 Bi 208,980	84 Po [210]	85 At [210]		86 Rn [222]

63 Eu 151,96	64 Gd 157,25	65 Tb 158,924	66 Dy 162,50	67 Ho 164,930	68 Er 167,26	69 Tm 168,934	70 Yb 173,04	71 Lu 174,97
95 Am [243]	96 Cm [245]	97 Bk [249]	98 Cf [249]	99 Es [254]	100 Fm [252]	101 Md [256]	102 No [254]	103 Lw [257]

Resnick, Halliday, Walker. PWN 2003

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne

metale alkaliczne
IA

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachetne
0

metale przejściowe

metale

półmetale

niemetale

gazy szlachet

lantanowce *

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu

aktynowce †

89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Klasyfikacja: alkali metals, alkaline earth metals, transition metals, post-transition metals, metalloids, other nonmetals, halogens, noble gases

Periodic Table

Klasifikacja: alkali metals, alkaline earth metals, transition metals, poor metals, other nonmetals, noble gases

Periodic Table of Elements

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18						
1 H Hydrogen 1.00794	Atomic # Symbol Name Atomic Mass																2 He Helium 4.002602						
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012182	C Solid Hg Liquid H Gas Rf Unknown																5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.0107	7 N Nitrogen 14.0067	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.9984032	10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.98976928	12 Mg Magnesium 24.3050	Alkali metals Alkaline earth metals Lanthanoids Actinoids Transition metals Poor metals Other nonmetals Noble gases																13 Al Aluminium 26.9815386	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973762	16 S Sulfur 32.065	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955912	22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938045	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933195	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.92160	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798						
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybdenum 95.96	43 Tc Technetium (97.9072)	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.293						
55 Cs Caesium 132.9054519	56 Ba Barium 137.327	57–71										81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98040	84 Po Polonium (208.9824)	85 At Astatine (209.9871)	86 Rn Radon (222.0176)						
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89–103										111 Rg Roentgenium (272)	112 Uub Ununbium (285)	113 Uut Ununtrium (284)	114 Uuq Ununquadium (289)	115 Uup Ununpentium (288)	116 Uuh Ununhexium (292)	117 Uus Ununseptium (294)	118 Uuo Ununoctium (294)				

For elements with no stable isotopes, the mass number of the isotope with the longest half-life is in parentheses.

Design and Interface Copyright © 1997 Michael Dayah (michael@dayah.com). <http://www.ptable.com/>

57 La Lanthanum 138.90547	58 Ce Cerium 140.116	59 Pr Praseodymium 140.90765	60 Nd Neodymium 144.242	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92535	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.054	71 Lu Lutetium 174.9668
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232.03806	91 Pa Protactinium 231.03588	92 U Uranium 238.02891	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (262)

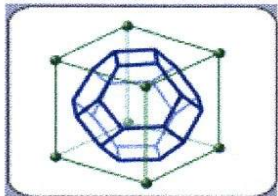
Motywacja podjęcia tematu:

b) osobista:

1981 – wspólny pobyt w Bostonie z St. Kaprzykiem
J. Slater „Scientific biography”

od 1983 r - wykład FCS dla FT, potem dla MN

opracowanie: A. Z. + Rafał Kosturek, *Teoria pasnowa
własności elektronowych ciał stałych*, OEN AGH 2003



Teoria pasmowa

własności elektronowych ciał stałych

Co to jest teoria pasmowa?

Rozwiązanie równania Schrödingera dla potencjału periodycznego

Zapełnianie pasm przez elektrony. Metale i niemetal

Komputerowe obliczenia ab initio struktury pasmowej

Ewolucja struktury elektronowej pierwiastków układu okresowego w stanie krystalicznym.

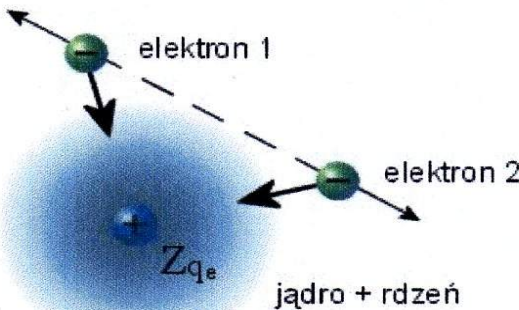
Podsumowanie: możliwości i granice teorii pasmowej

Słownik pol-ang-mat
Pytania testowe
Mapa strony
Literatura
O stronie

Projekt i wykonanie:
Rafał Kosturek

1. CO TO JEST TEORIA PASMOWA?

Teoria pasmowa jest kwantowomechanicznym opisem zachowania elektronów w krystalicznym ciele stałym. Jak pokazuje rysunek 1.1, elektron w kryształ jest przyciągany przez dodatnio naładowane jądra atomów i odpychany przez inne elektrony.



Rys. 1.1. Oddziaływanie elektronów w kryształ: elektron-jądro, elektron-elektron.

Podstawą teorii pasmowej jest założenie, że oddziaływania te można opisać przy pomocy *periodycznego* potencjału $U(\mathbf{r})$, wspólnego dla wszystkich elektronów. Matematycznie periodyczność funkcji $U(\mathbf{r})$ oznacza, że nie zmienia się ona w wyniku przesunięcia o wektor sieciowy $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$,

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}) \tag{1.1}$$

Plan:

1. Motywacja podjęcia tematu

2. Obliczenia struktury elektronowej

3. Metale: problem metali grup IIA i IIB

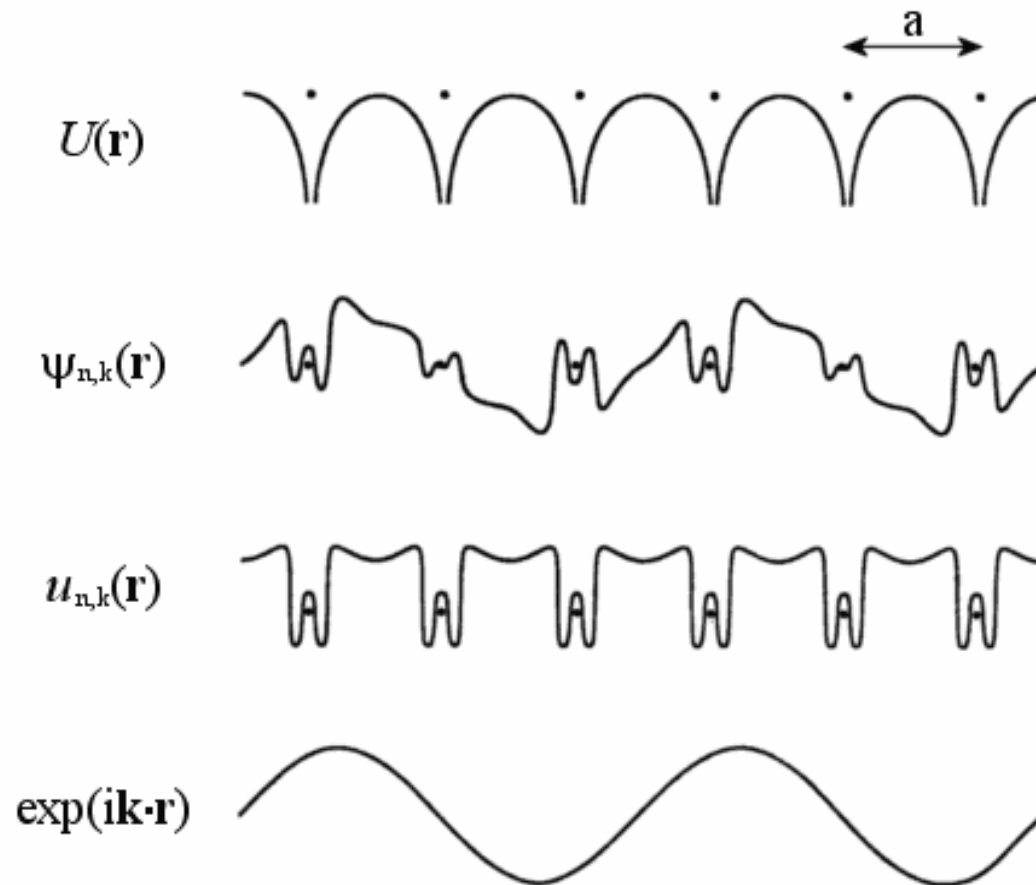
4. Metale: granica metale przejściowe –
metale proste. Polon

5. Półprzewodniki, półmetale, izolatory

6. Podsumowanie

Twierdzenie Blocha nt. postaci jednoelektronowej funkcji falowej w potencjale periodycznym $U(\mathbf{r})$

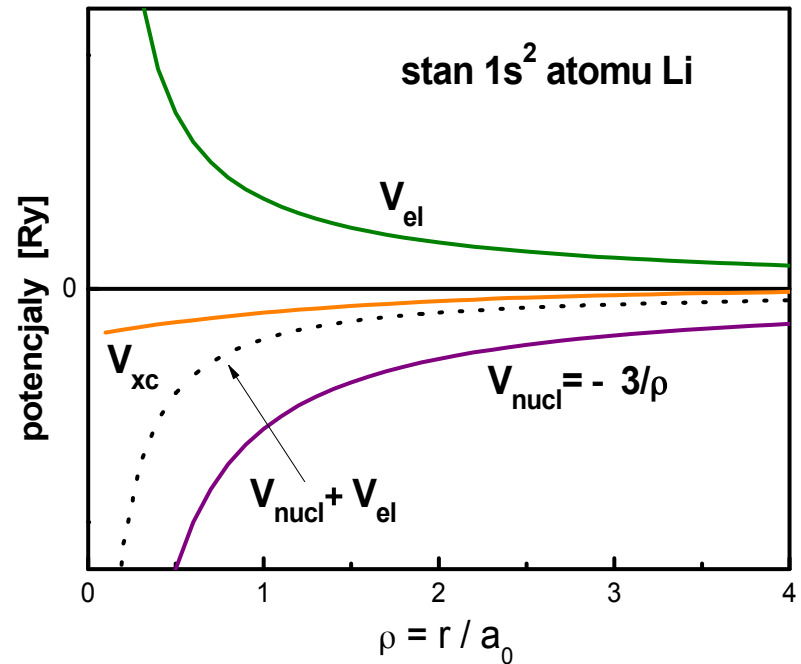
$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$



Jak skonstruować potencjał ?

- potencjał elektrostatyczny jądra
 $V_{\text{nuc1}}(\mathbf{r})$
- potencjał elektrostatyczny chmury elektronowej $V_{\text{el}}(\mathbf{r})$ (Hartree 1933)
- potencjał wymiennie-korelacyjny Slater (1951): koncepcja i wzór
 $V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = - \text{const} [n(\mathbf{r})]^{1/3}$

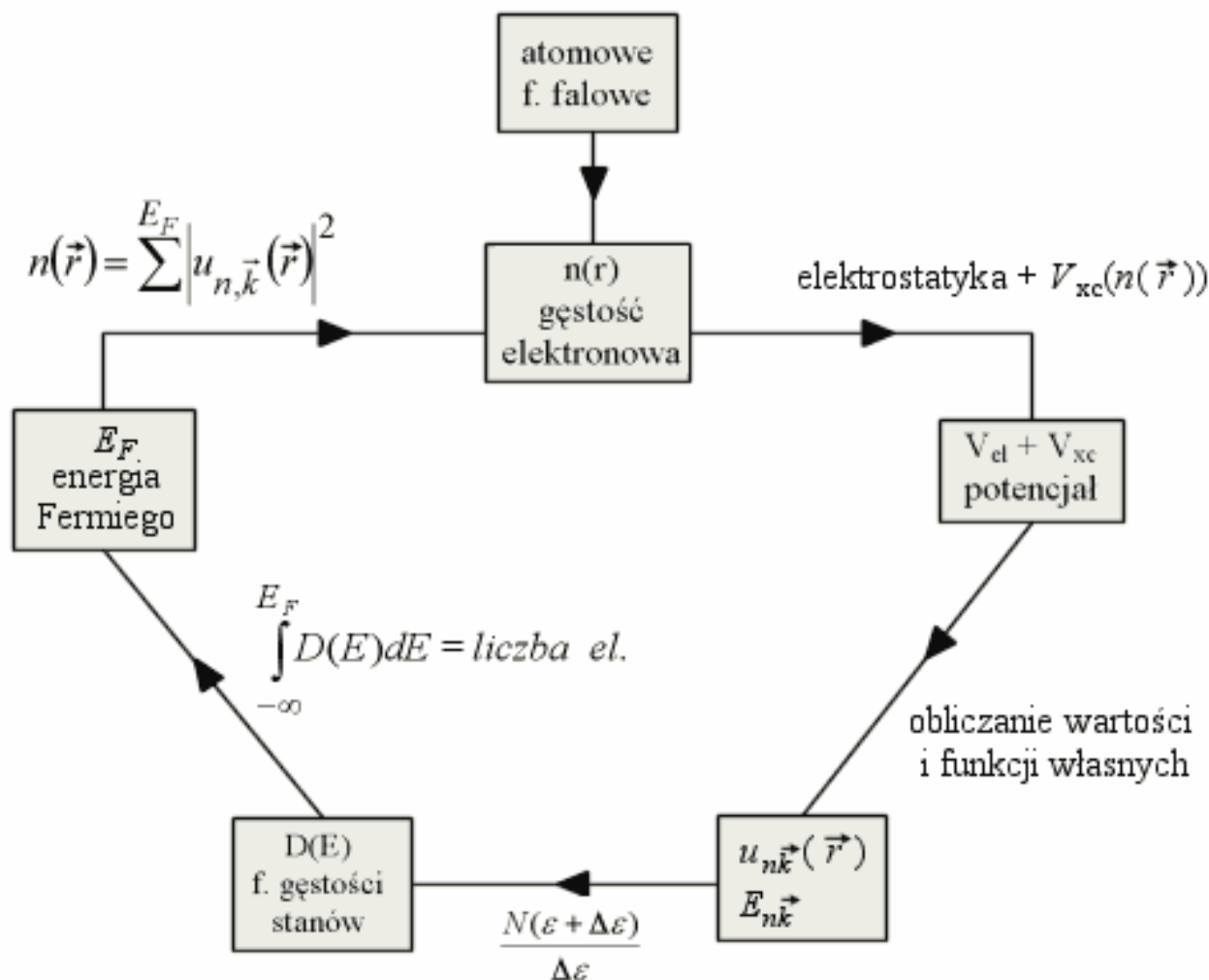
Cohn, Hohenberg, Sham:
– teoria funkcjonału gęstości
(1964)



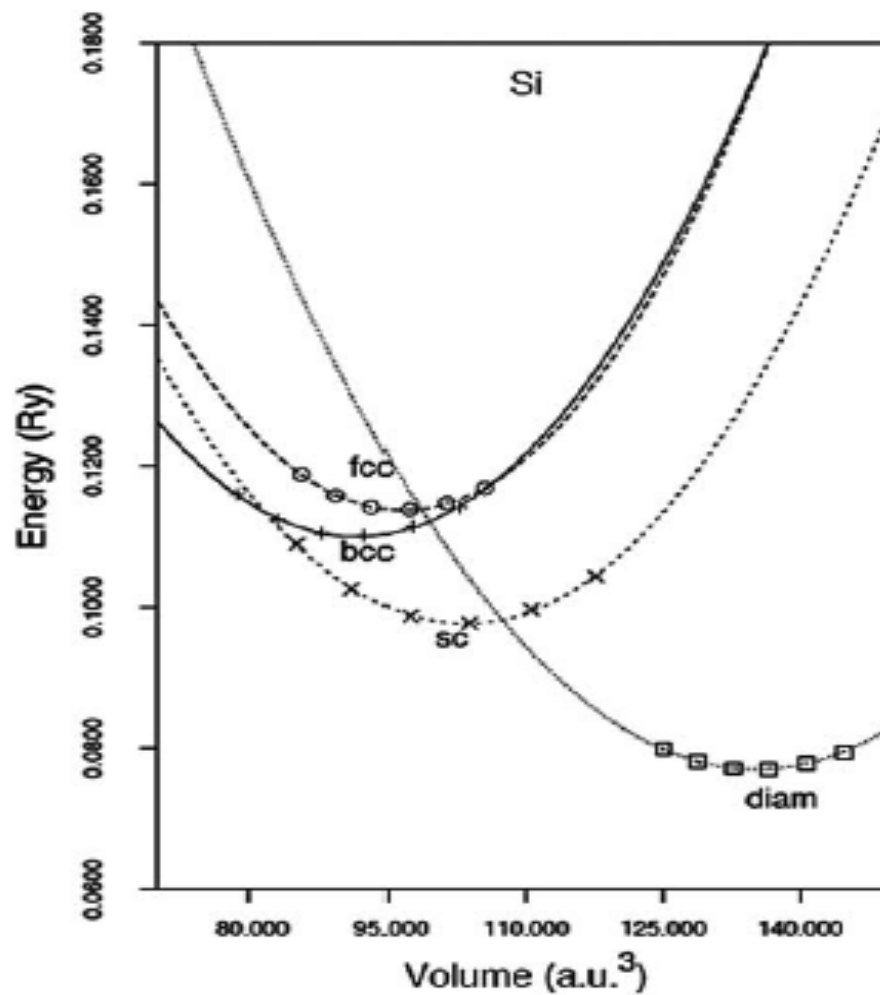
Obliczenia f. falowych i energii stanów

- Obliczenia nierelatywistyczne:
równanie Schrodingera (i metody pochodne)
- Obliczenia relatywistyczne:
Równanie Diraca (i metody pochodne)
- Potrzebne przybliżenia dotyczą:
 - postaci potencjału (np. przybliżenie potencjału miseczkowego)
 - funkcja falowa (baza funkcyjna)
 - sposobu obliczania V_{xc}

Schemat obliczeń samouzgodnionych



Obliczenia z zasad pierwszych (*ab initio*)



Kolekcje wyników dla pierwiastków:

- **Moruzzi, Janak, Williams (1976). Calculated electronic properties of metals.**
 - obliczenia nierelatywistyczne
 - tylko metale, od $Z = 1$ (metaliczny wodór) do $Z = 49$ (ind)
 - struktury tylko bcc i fcc
 -
- **Papaconstantopoulus (1986). Handbook of the Band Structure of Elemental Solids**
 - obliczenia relatywistyczne
 - wszystkie pierwiastki, do $Z = 112$
 - struktury tylko: sc, bcc, fcc, hcp, diamentu
 - → liczne bezsensowne wyniki

Plan:

1. Motywacja podjęcia tematu

2. Obliczenia struktury elektronowej

3. Metale: (i) klasyfikacja metali

5. Półprzewodniki, półmetale, izolatory

6. Podsumowanie

Definicje i rodzaje metali

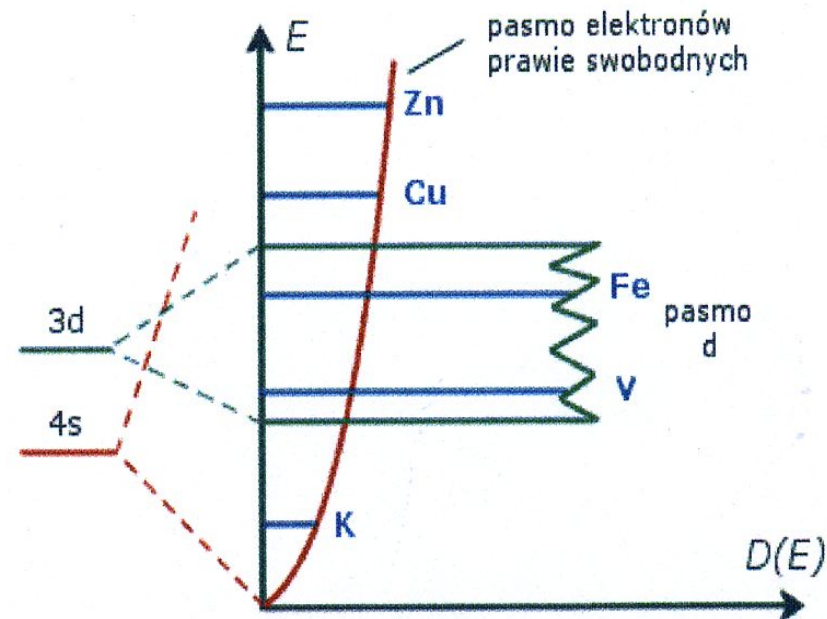
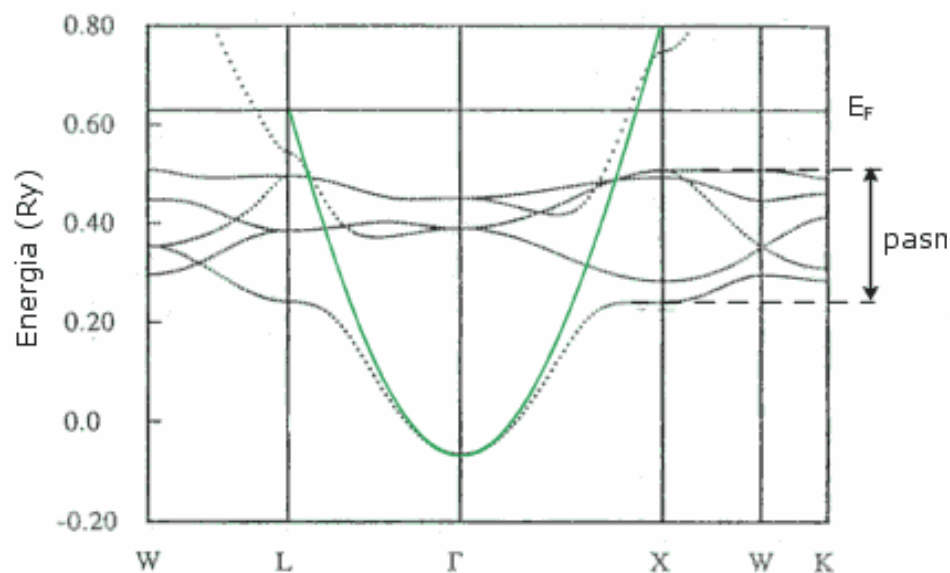
- doświadczalna: przewodzi prąd dla $T=0$ K
- w teorii pasmowej: $D(E_F) > 0$
- $D(E_F)$ można przedstawić jako suma składników od elektronów typu s, p, d i f
- przewaga f – metale ziem rzadkich i aktynowce
 - d – metale przejściowe
 - s + p – metale proste
 - półmetale: mała, ale niezerowa $D(E_F)$

Plan:

1. Motywacja podjęcia tematu
2. Obliczenia struktury elektronowej
- 3. Metale (ii): metale proste grup IA i IIA.
Miejsce Be i Mg w układzie okresowym**
4. Półprzewodniki, półmetale, izolatory
5. Podsumowanie

Charakter oraz schemat zapełnienia pasm sp oraz d

schemat zapełnienia „sztywnego” pasma:
metale proste → przejściowe → proste



Plan:

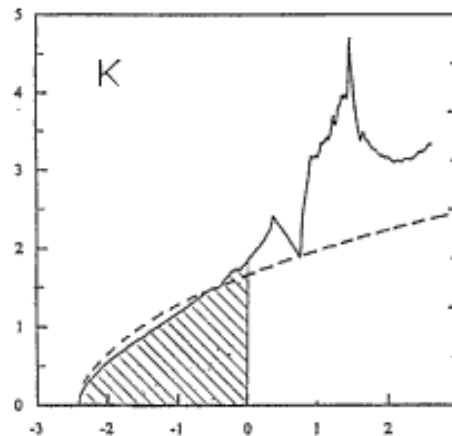
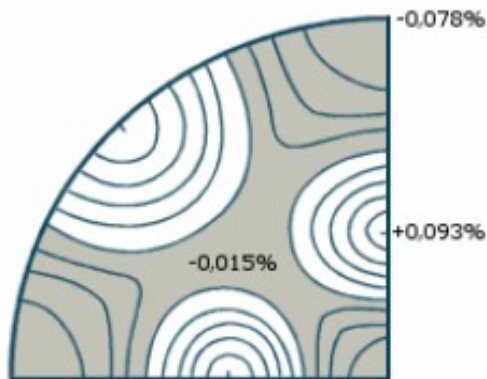
1. Motywacja podjęcia tematu
2. Obliczenia struktury elektronowej
- 3. Metale: (ii) metale proste grup I i II.
Miejsce Be i Mg w układzie okresowym**
4. Półprzewodniki, półmetale, izolatory
6. Podsumowanie

Metale proste: alkaliczne i ziem alkalicznych

alkaliczne (IA) –

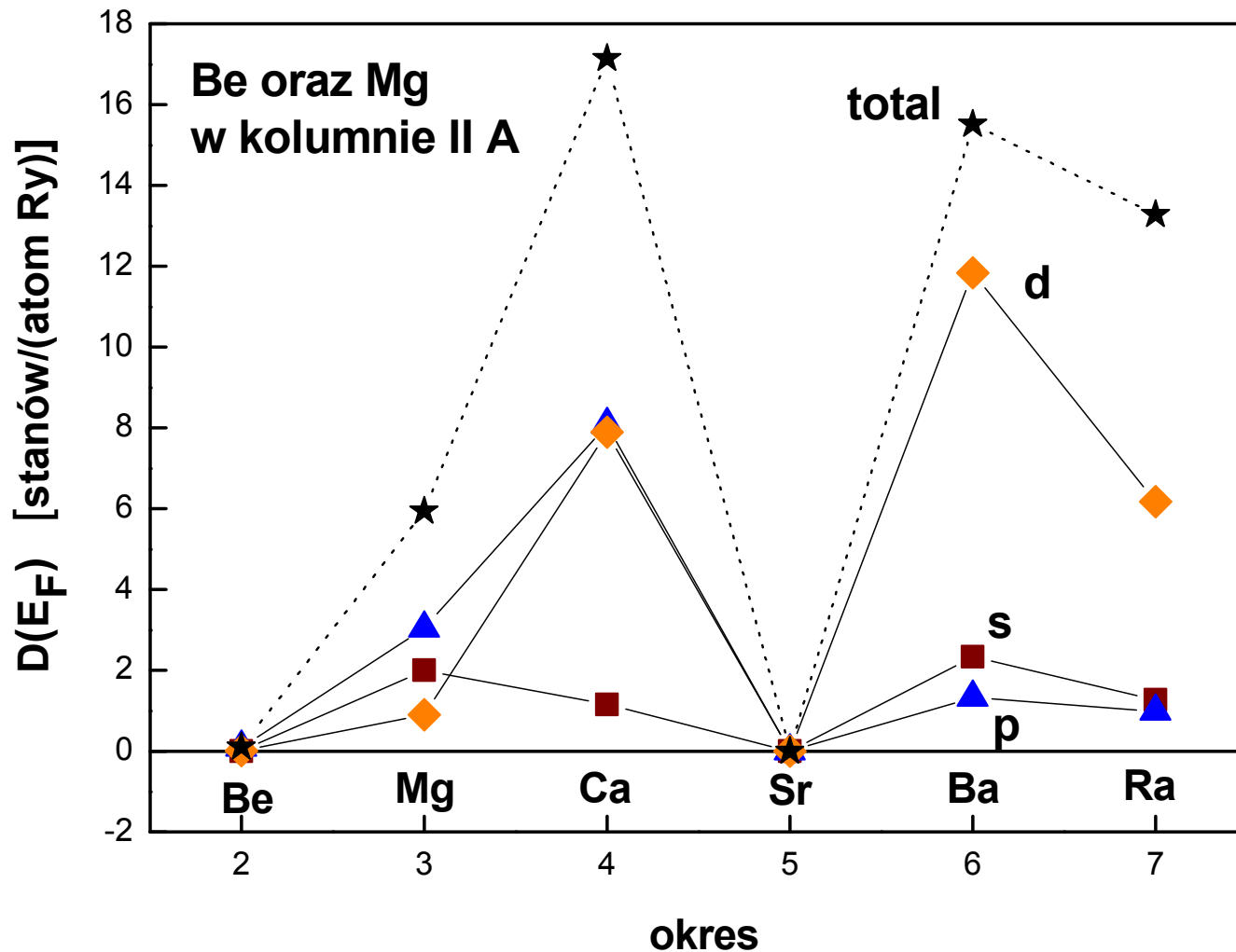
dobra zgodność z FE.

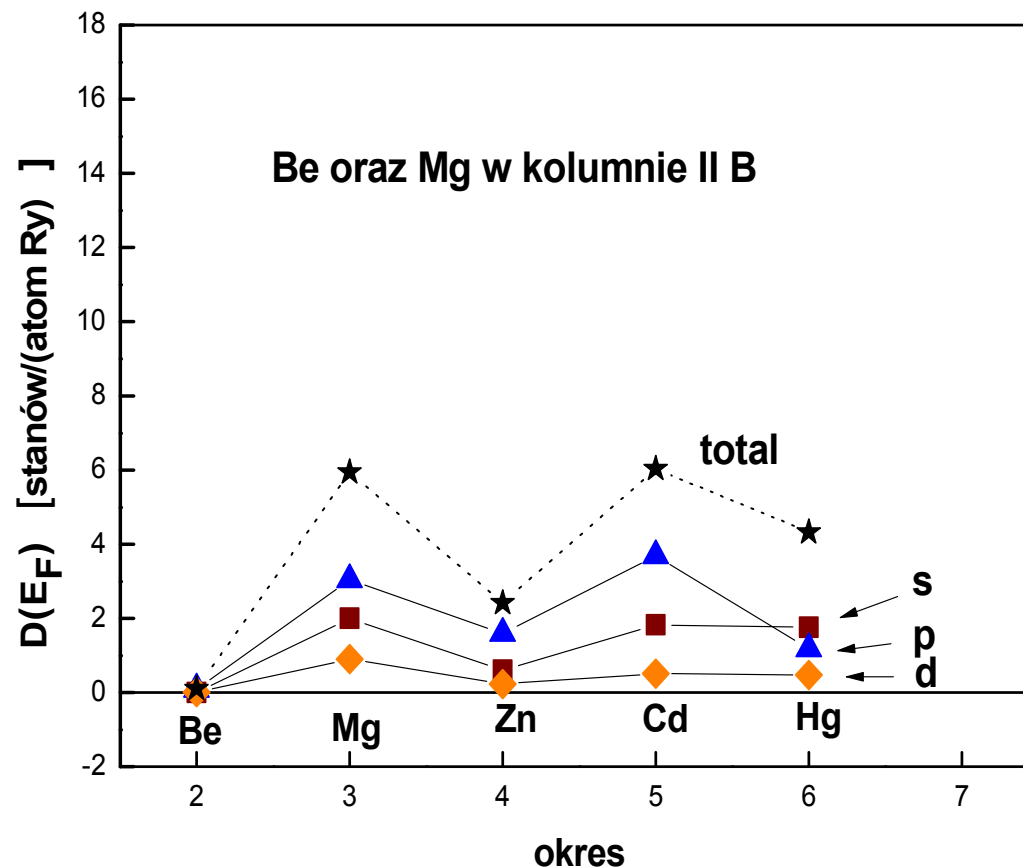
Tylko w tej kolumnie mamy
(prawie) kulę Fermiego



N_v	IA 1	II A 2
okres 2	Li □	
okres 3	Na □	
okres 4	K □	Ca ■
okres 5	Rb □	Sr ■
okres 6	Cs □	Ba □
okres 7	Fr □?	Ra □?

Problem grup IIA i IIB – gdzie umieścić Be i Mg ?

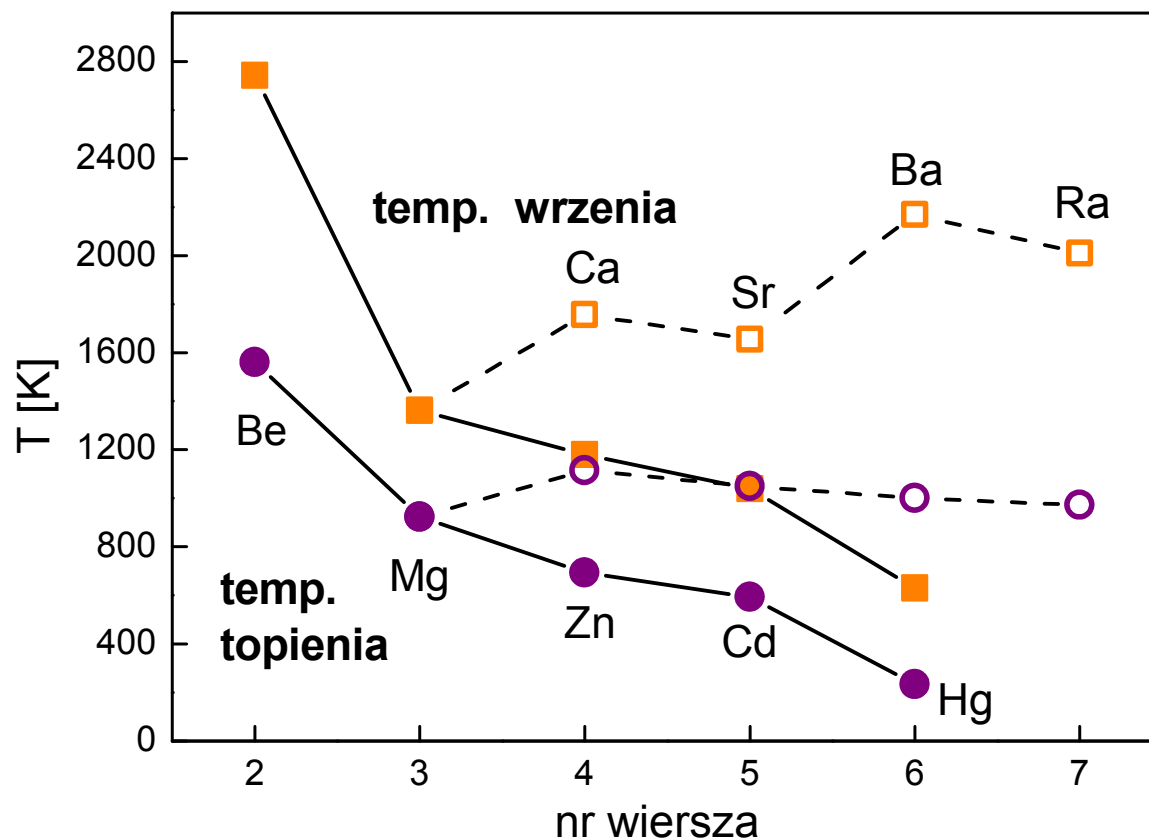




Wnioski:

- Be i Mg – metale proste, pasują lepiej do Zn, Cd, Hg
- Ca, Sr, Ba, Ra – **metale ziem alkalicznych** (ang. *alkaline earth metals*) – właściwości pośrednie między sp i d

Pogląd ten potwierdza analiza makroskopowych
własności fizycznych
i heksagonalna struktura Be, Mg, Zn



Zn

Plan:

1. Motywacja podjęcia tematu
2. Obliczenia struktury elektronowej
- 3. Metale (iii): metale przejściowe.
Cu, Ag i Au – przejściowe czy proste?**
4. Półprzewodniki, półmetale, izolatory
6. Podsumowanie

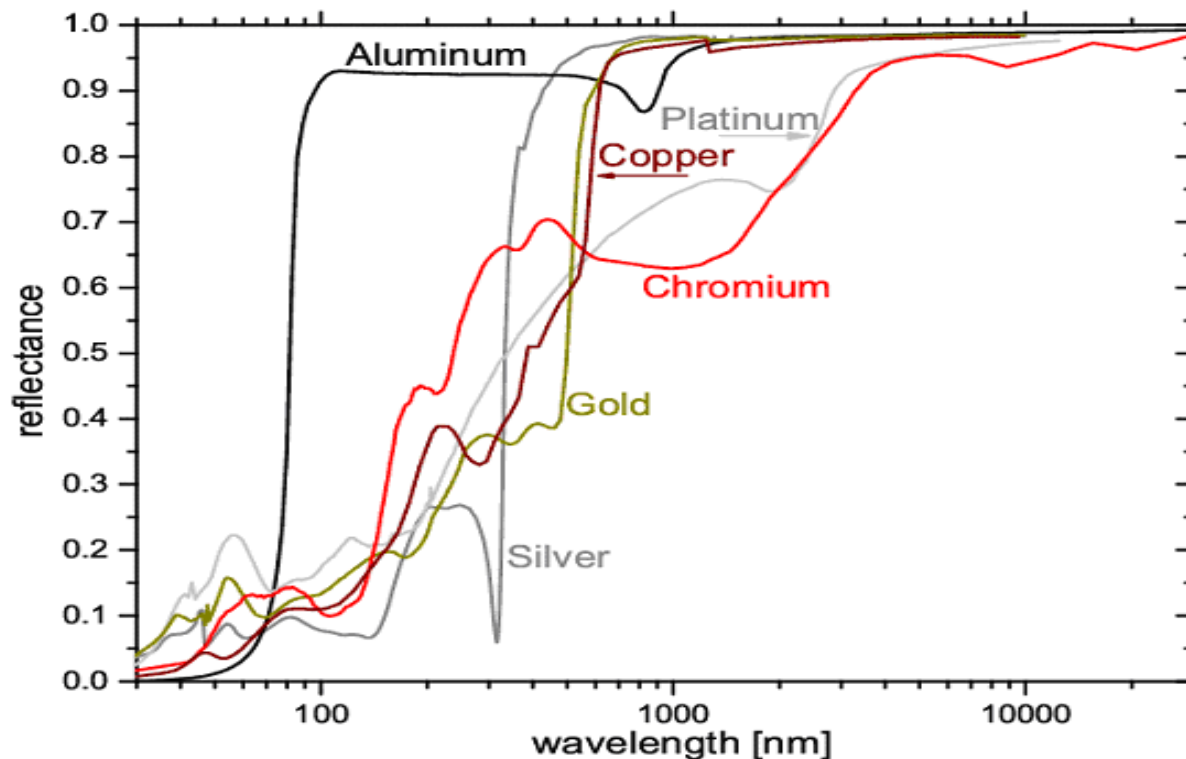
Metale przejściowe

kolumna N_v	III 3	IV 4	V 5	VI 6	VII 7	8	VIII 9	10
3d	Sc ●	Ti ●	V □	Cr □	Mn złoż.	Fe □	Co ●	Ni ■
4d	Y ●	Zr ●	Nb □	Mo □	Tc ●	Ru ●	Rh ■	Pd ■
5d	La ●	Hf ●	Ta □	W □	Re ●	Os ●	Ir ■	Pt ■

Struktury: ■ – kubiczna fcc, □ – kubiczna bcc, ● – heksagonalna hcp

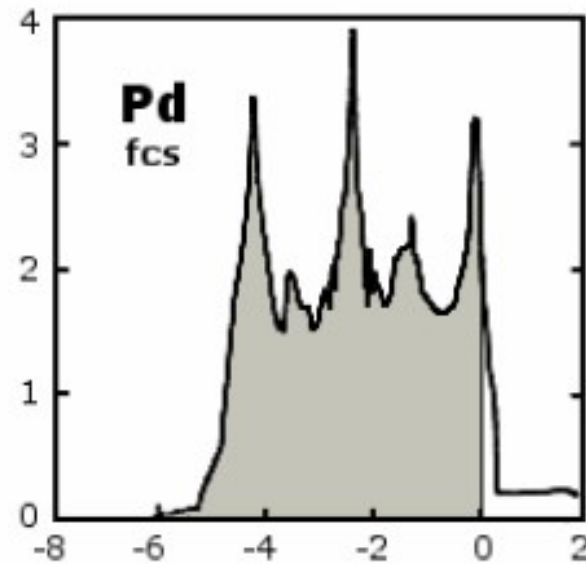
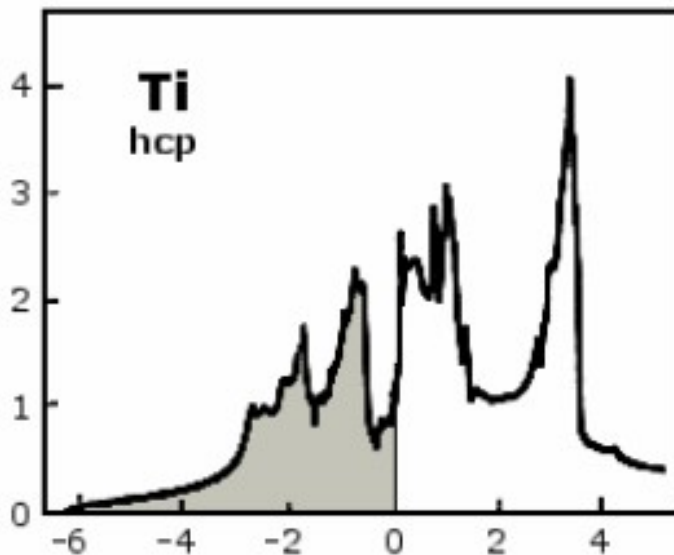
Właściwości metali przejściowych:

- słabsze odbicie światła (niż proste)
- gorsza przewodność elektryczna
- wysoka en. kohezji, oraz temperatury topienia i wrzenia
- ww. wielkości (w danej kolumnie) rosną ze wzrostem Z , natomiast maleją w metalach prostych.



Metale przejściowe – struktura elektronowa:

- stopniowe zapełnianie pasma d
- kolumna metali szlachetnych Cu, Ag, Au rozpoczyna obszar metali prostych
- Cu, Ag, Au to **pierwiastki przejściowe** (klasyfikacja chemiczna), ale **metale proste**



Plan:

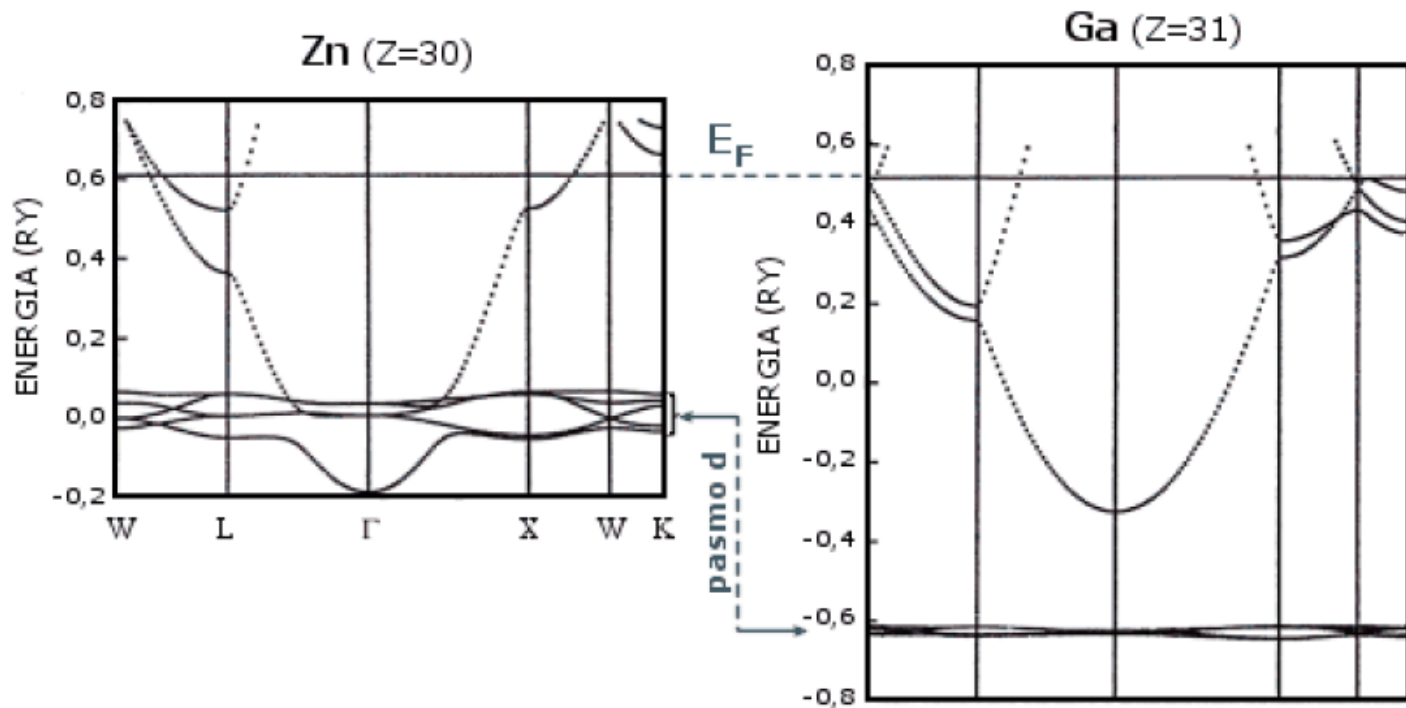
1. Motywacja podjęcia tematu
2. Obliczenia struktury elektronowej
- 3. Metale (iv): metale proste -
od metali szlachetnych do polonu.**
4. Półprzewodniki, półmetale, izolatory
5. Wybrane związki
6. Podsumowanie

Metale proste grup I B – VI B

kolumna N_v	I B 1	II A 2	III B 3	IV B 4	V B 5	VI B 6
okres 2		Be ⬢				
okres 3		Mg ⬢	Al ■			
okres 4	Cu ■	Zn ⬢	Ga złoż			
okres 5	Ag ■	Hg ■	In tetra	Sn (biała)		
okres 6	Au ■	Hg romb	Tl ⬢	Pb ■		Po □

Metale proste:

- dobrze określona liczba N_v = numer kolumny
- I B $\rightarrow$ II B $\rightarrow$ III B – coraz lepsza zgodność z modelem FE



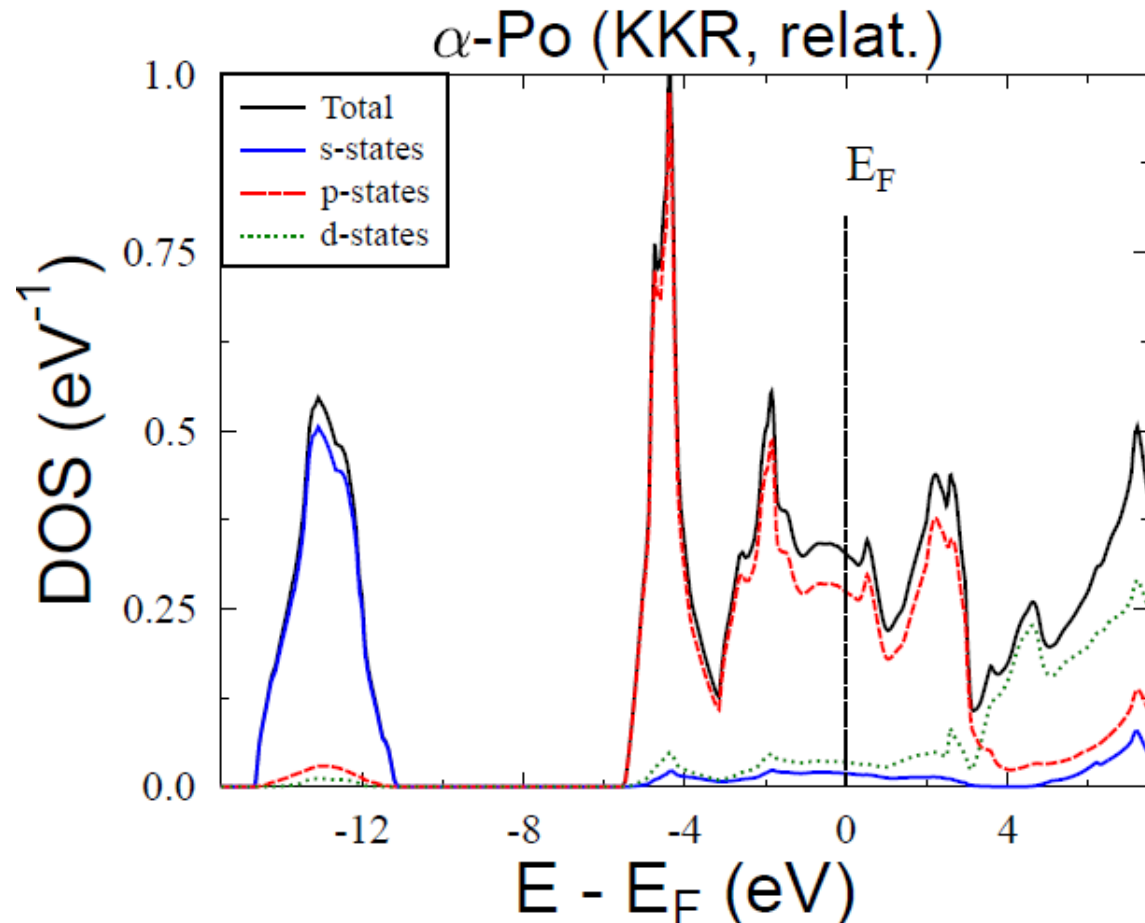
Pozostałe 3 metale proste:

grupa IV B: **Sn** biała, **Pb**

grupa VI B: **Po** – ostatni metal prosty układu okresowego

- dla Pb i Po – przerwa energetyczna poniżej E_F

obliczenia
J. Toboły
(nieopubl)



Plan:

1. Motywacja podjęcia tematu

2. Obliczenia struktury elektronowej

3. Metale

4. Półprzewodniki, półmetale, izolatory

6. Podsumowanie

Półprzewodniki

N_v	III A 3	IV A 4	V A 5	VIA 6
okres 2	B (złoż) 1,4 eV	C diament ◇ 5,4 eV		
okres 3		Si ◇ 1,1 eV		
okres 4		Ge ◇ 1,1 eV		Se (złoż) 1,1 eV
okres 5				Te złoż 0,35 eV

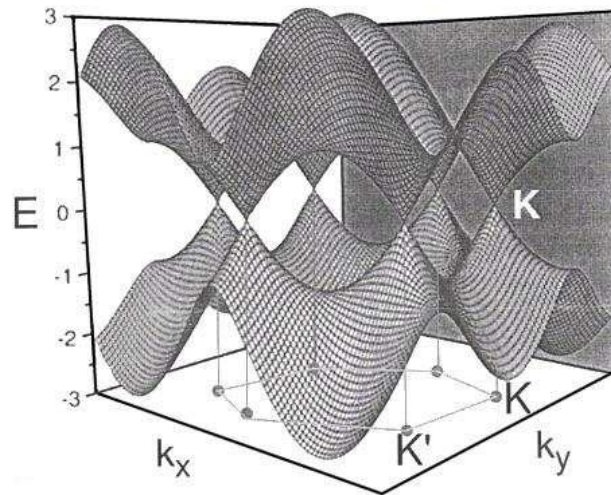
◇ - diamentu

Półmetale

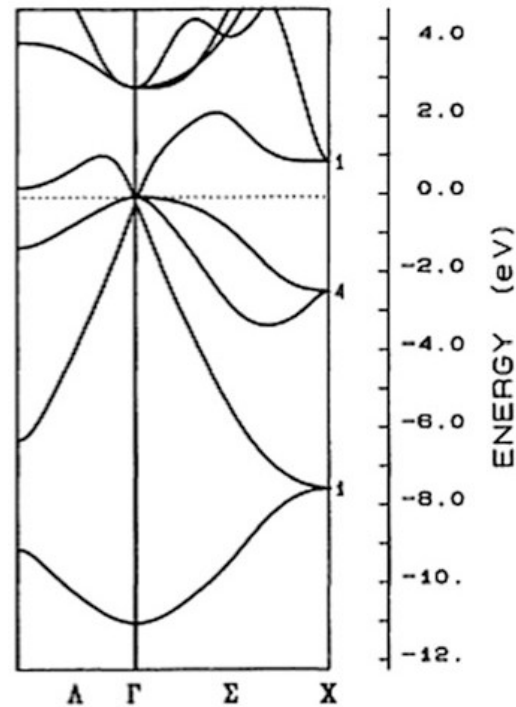
N_v	IV B 4	V B 5
okres 2	C grafit	
okres 3		
okres 4		As (czarny)
okres 5	Sn (szara) 0 eV	Sb
okres 6		Bi

Struktury pasmowe półmetali (ang. *semimetals*)

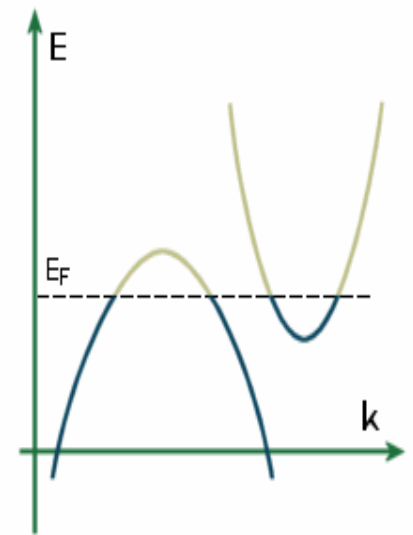
grafen & grafit



cyna szara



bismut



- Problem terminologii można uzgodnić z chemikami przez przyjęcie, że pierwiastki określone chemicznym terminem **metaloïd** (ang. *metalloïd*) dzielą się na dwa zbiory, **półmetali** (ang. *semimetal*) oraz **półprzewodników** (ang. *semiconductor*).

(jak sugeruje mniej jasno hasło *semimetal* w *Wikipedii*)

Izolatory

- „To, co powiedzieliśmy powyżej, pozwala głębiej zrozumieć różnicę pomiędzy półprzewodnikiem a izolatorem. Nie polega ona - jak się to często mówi - na arbitralnie dobranej wartości przerwy energetycznej, np. 2,5 eV. Różnica jest głębsza; dopiero uwzględnienie korelacji pozwala zrozumieć, dlaczego istnieją substancje o dużej przerwie energetycznej, zachowujące właściwości typowych półprzewodników (jak np. diament o przerwie energetycznej ok. 6 eV), a równocześnie istnieją substancje (np. jod czy siarka), wykazujące istnienie optycznej krawędzi absorpcji rzędu 1-2 eV, a nie wykazujące właściwości półprzewodników.
- Jerzy Ginter, *Wstęp do fizyki atomu, cząsteczki i ciała stałego*. PWN 1979. Str. 322.

Plan:

1. Motywacja podjęcia tematu

2. Obliczenia struktury elektronowej

3. Metale: problemy (i) – (iv)

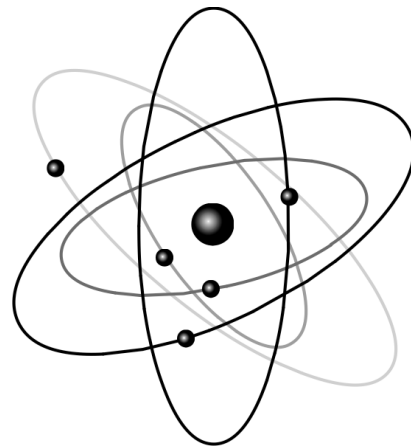
5. Półprzewodniki, półmetale, izolatory

6. Podsumowanie

Okład okresowy Mendelejewa dla faz skondensowanych

¹ H																	² He
³ Li																	
¹¹ Na																	
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
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
⁵⁵ Cs	⁵⁶ Ba	⁵⁷ La	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
⁸⁷ Fr	⁸⁸ Ra	⁸⁹ Ac															
			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	
			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	

- | | | | |
|---|--------------------------------|---|----------------------------|
|  | metale proste |  | półmetale |
|  | metale przejściowe |  | izolatory |
|  | magnetyczne metale przejściowe |  | ziemie rzadkie i aktynowce |
|  | półprzewodniki | | |



Dziękuję za uwagę