



WYDZIAŁ CHEMICZNY
Katedra Chemii Nieorganicznej

Chemia teoretyczna

laboratorium komputerowe

Andrzej Okuniewski, Aleksander Herman

Gdańsk 2020

Wybrane wielkości

Prędkość światła:

$$c = 299792458 \frac{\text{m}}{\text{s}} \approx 3,00 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Stała Plancka:

$$h = 6.626070040(81) \cdot 10^{-34} \text{ J s} \approx 4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$$

Promień Bohra:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5,2917721067(12) \cdot 10^{-11} \text{ m} \approx 0,529 \text{ \AA}$$

Energia Hartree:

$$E_h = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} = 4,35974434(19) \cdot 10^{-18} \text{ J} \approx 2,625 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \approx 27,2 \text{ eV}$$

Wprowadzenie

Chemia teoretyczna jest nauką, która dostarcza ważnych narzędzi pozwalających lepiej lub gorzej wyjaśniać i przewidywać wyniki doświadczalne. Dzięki laboratorium komputerowemu poznasz proste metody teoretyczne umożliwiające przewidywanie wybranych właściwości atomowych.

W trakcie zajęć będziesz prowadzić obliczenia dla przypisanego pierwiastka. Do wyznaczania energii oraz orbitali atomowych dla rozmaitych konfiguracji elektronowych wykorzystasz metodę HFS zaimplementowaną w programie FDA (David Heisterberg, 1995).

W ramach sześciu kolejnych ćwiczeń podejmiesz próbę określenia konfiguracji elektronowej stanu podstawowego danego atomu, przewidzenia położenia wybranych prążków w atomowym widmie emisyjnym lub absorpcyjnym, przewidzenia widma fotoelektronowego, wyznaczenia elektroujemności Mullikena i twardości Pearsona oraz porównania tych parametrów dla sąsiednich pierwiastków w układzie okresowym. Na koniec porównasz energie orbitalne elektronów wyznaczone metodą Slatera z wyliczonymi przy pomocy modelu HFS.

Każde ćwiczenie rozpocznie się krótkim kolokwium (wejściówką) – zagadnienia znajdziesz w karcie przedmiotu.

Efekt Twojej pracy będzie sprawozdanie, które przygotujesz wypełniając szablon dostępny w karcie przedmiotu. Po zakończeniu pracy plik zapisz w formacie PDF i wyślij w wyznaczonym terminie na adres: andrzej.okuniewski@pg.edu.pl.

Program FDA

Program FDA (Finite-Difference Approximation) autorstwa Davida Heisterberga powstał w 1995 roku. Wykorzystuje on metodę HFS (Hartree-Focka-Slatera) z potencjałem $X\alpha$ do obliczania energii i orbitali atomowych.

FDA jest programem wsadowym – wczytuje on plik wejściowy, którego nazwa (bez rozszerzenia .inp) stanowi jedyny argument podczas uruchamiania programu, a wyniki obliczeń zapisuje do plików .out i .dmp. Nazwa pliku wejściowego nie powinna zawierać znaków specjalnych oraz spacji, a zakończona musi być rozszerzeniem .inp.

Plik wejściowy programu FDA to plik tekstowy z rozszerzeniem .inp. Na komputerach w pracowni rozszerzenie to jest domyślnie powiązane z edytorem tekstu.

Pierwszy wiersz w pliku określa parametry siatki (grid), na której prowadzone są obliczenia, drugi definiuje parametry metody HFS, a trzeci opisuje atom stanowiący przedmiot obliczeń. Czwarty i kolejne wiersze opisują obsadzenie kolejnych poziomów energetycznych atomu.

Przykładowy plik wejściowy dla atomu wodoru o konfiguracji $1s^1$:

1:	300	0.0001	30.0			
	N_{grid}	x_0	x_n			
2:	50	0.00001	0.10	0.50	0.667	0.0042
	N_{iter}	ΔE_{cnv}	mix_1	mix_2	α	β
3:	1	1				
	Z	N_{orb}				
4:	1	0	1	0		
	n	l	N_{\uparrow}	N_{\downarrow}		

Linia 1:

int N_{grid} – liczba punktów siatki

double x_0 – współrzędna pierwszego punktu siatki (w jednostkach Bohra)

double x_n – współrzędna ostatniego punktu siatki (w jednostkach Bohra)

Linia 2:

int N_{iter} – maksymalna liczba iteracji

double ΔE_{cnv} – warunek zbieżności

double mix_1 – początkowe mieszanie funkcji rozkładu gęstości

double mix_2 – asymptotyczne mieszanie funkcji rozkładu gęstości

double α – parameter funkcyjonału $X\alpha$ (patrz: Dodatek A)

double β – parametr Beckego (wymagany, ale nie używany przez program)

Linia 3:

double Z – ładunek jądra

int N_{orb} – liczba orbitali

Linia 4 (i ew. kolejne; tyle linii ile wynosi parametr N_{orb}):

int n – główna liczba kwantowa

int l – poboczna liczba kwantowa

double N_{\uparrow} – obsadzenie orbitalu elektronami ze spinem „w górę”

double N_{\downarrow} – obsadzenie orbitalu elektronami ze spinem „w dół”

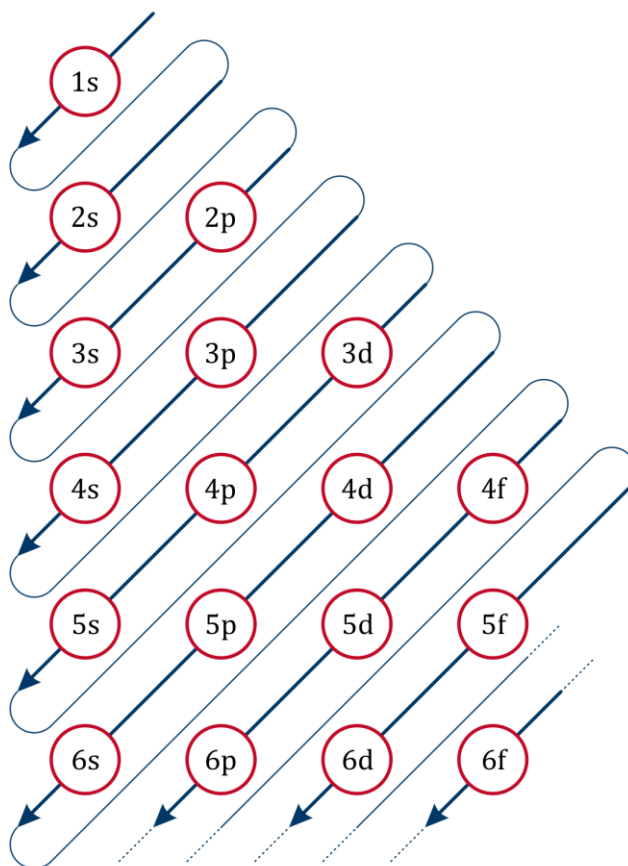
int – liczba całkowita, **double** – liczba zmiennoprzecinkowa podwójnej precyzji

Wartości w obrębie linii muszą być oddzielone przynajmniej jednym znakiem spacji, a znakiem dziesiętnym jest kropka (nie przecinek!).

Ćwiczenie 1

Sprawdzenie słuszności reguł zabudowy powłok elektronowych

Teoria orbitali atomowych wraz z zakazem Pauliego wyjaśnia uporządkowanie pierwiastków w układzie okresowym. Konfigurację elektronową stanu podstawowego każdego pierwiastka można otrzymać, umieszczając elektrony na orbitalach atomowych w kolejności wzrastającej energii aż do osiągnięcia liczby Z elektronów na atom. Ten sposób postępowania nazywany jest **zasadą rozbudowy powłok elektronowych**. Kolejność obsadzania orbitali jest zazwyczaj następująca:



Zadania do wykonania

1. Zapoznaj się z obsługą programu FDA. Stwórz plik wejściowy zgodnie ze wskazówkami prowadzącego. Pamiętaj o wpisaniu prawidłowego parametru α (Dodatek A).
2. Zbuduj atom X dodając kolejno po jednym elektronie. Dla każdego stopnia jonizacji oblicz energię całkowitą układu w konfiguracji zgodnej z regułami zabudowy oraz dla możliwie prawdopodobnej konfiguracji alternatywnej. Wyniki ujmij w tabeli.
3. Uzyskane wyniki przedstaw też na wykresie energii w funkcji liczby elektronów posiadanych przez układ. Wyniki dla konfiguracji zgodnych i niezgodnych z regułami zabudowy oznacz na wykresie w odmienny sposób.
4. Przeprowadź dyskusję otrzymanych wyników.

Ćwiczenie 2

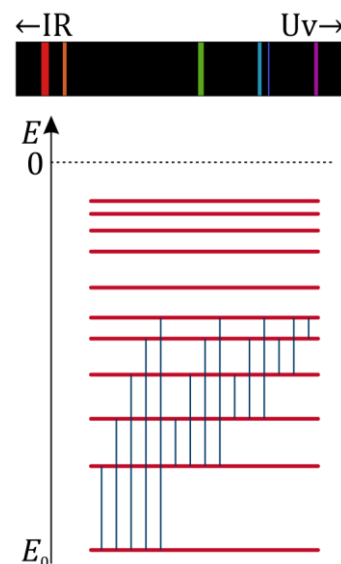
Wyznaczanie energii wzbudzeń elektronowych

Oprócz układu okresowego pierwiastków można za pomocą orbitali atomowych wytłumaczyć i usystematyzować drugi bardzo ważny zespół faktów doświadczalnych, a mianowicie ogromny materiał dotyczący widm atomowych.

Jak wiadomo emisyjne i absorpcyjne widma atomowe są widmami liniowymi, składającymi się z poszczególnych prążków przy określonej długości fali, a zatem o określonej częstotliwości. Każdy z nich odpowiada określonemu kwantowi energii $h\nu$. Zgodnie z wnioskami płynącymi z mechaniki kwantowej, a mianowicie z istnieniem kwantowanych poziomów energii w atomie, każdy taki kwant odpowiada przejściu atomu z jakiegoś określonego poziomu energetycznego E_2 na niższy, również określony poziom energetyczny E_1 .

Różnica energii ΔE w obu tych stanach atomu wyemitowana zostaje w postaci kwantu światła o takiej częstotliwości ν , że:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$



Zadania do wykonania

1. Metodą prób i błędów wyznacz energie dziesięciu prawdopodobnie niskoenergetycznych stanów wzbudzonych atomu X (wzbudzenia jednoelektronowe z powłok walencyjnych).
2. Uzyskane wyniki przelicz na elektronowolty i przedstaw na osi energii w postaci pionowego diagramu (patrz: Dodatek C).
3. Opisz jak zmienia się średnia odległość elektronów od jądra $\langle r \rangle$ dla poszczególnych poziomów energetycznych w procesie wzbudzenia.
4. Dla pięciu najniżej energetycznych stanów wzbudzonych oraz stanu podstawowego oblicz wszystkie możliwe energie przejść (jest ich 15).
5. Dokonaj symulacji widma atomowego przeliczając otrzymane energie przejść na długości fali w nm i nanosząc te wartości na poziomy diagram (patrz: Dodatek C).
6. Wyniki porównaj z danymi doświadczalnymi dotyczącymi pasm absorpcji/emisji¹ i przeprowadź dyskusję otrzymanych wyników.

¹ physics.nist.gov/PhysRefData/Handbook/periodictable.htm

Ćwiczenie 3

Wyznaczanie energii jonizacji

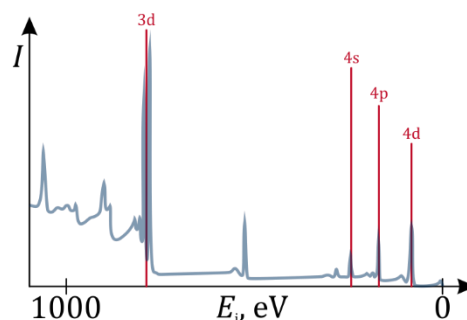
Znakomitym potwierdzeniem koncepcji poziomów energetycznych jest widmo fotoelektronów. Podstawą tej spektroskopii jest efekt fotoelektryczny. Widmo rejestruje się, napromieniowując monochromatyczną wiązką fotonów o dużej energii daną substancję w fazie gazowej (np. helowa lampa wyładowcza: 58,4 nm, przejście $1s^1 2p^1 \rightarrow 1s^2$). Nadmiar energii fotonu transformuje się w energię kinetyczną elektronu (E_k):

$$E_k = h\nu - E_i$$

gdzie: $h\nu$ – energia fotonu, E_i – energia jonizacji.

Wybite fotoelektrony zlicza się w funkcji ich energii kinetycznej, którą przelicza się na energię jonizacji ($h\nu$ jest wartością znaną). Powstały obraz nazywa się widmem fotoelektronów.

Światło o długości fali 58,4 nm odpowiada energii fotonów 21,2 eV, a więc może zjonizować jedynie elektrony o energii mniejszej. Przy energii większej (np. promieniowanie chromowej lampy rentgenowskiej $CrK\alpha$, 5414,7 eV) można zjonizować również elektrony z niższych powłok – otrzymujemy wtedy widma XPS (ang. *X-ray Photoelectron Spectroscopy*).



Zgodnie z twierdzeniem Koopmansa dla danego poziomu energetycznego (n) potencjały jonizacji (E_i) są bliskie wartościom własny orbitali (ε) wziętym z przeciwnym znakiem:

$$E_{i,n} \cong -\varepsilon_n$$

Niewielka różnica stanowi energię relaksacji (E_R) układu po usunięciu elektronu:

$$E_{R,n} = -\varepsilon_n - E_{i,n}$$

Zadania do wykonania

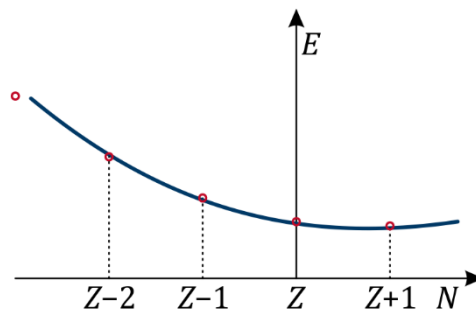
1. Porównaj wyliczone wartości własne orbitali atomu X z energią fotonów helowej lampy wyładowczej oraz promieniowania rentgenowskiego $CrK\alpha$. Określ ile pasm można się spodziewać w każdym z tych widm fotoelektronowych dla atomu X.
2. Oblicz energie całkowite wszystkich możliwych kationów X^+ usuwając każdorazowo elektron z innego poziomu energetycznego. Odpowiednie potencjały jonizacji oblicz odejmując od uzyskanych wartości energię stanu podstawowego atomu X.
3. Dokonaj graficznej symulacji widma fotoelektronowego. Na poziomy diagram (patrz: Dodatek C) nanieś energie (w elektronowoltach) uzyskane dwiema metodami (w punkcie 1 i 2). Serie oznacz w odmienny sposób.
4. Z różnicy wartości otrzymanych w punkcie 1 i 2 oblicz energie relaksacji układu podczas odpowiednich jonizacji.
5. Odszukaj w literaturze² wartości eksperymentalne położenia sygnałów w widmie XPS dla atomu X i przeprowadź dyskusję otrzymanych wyników.

² xpssimplified.com/periodictable.php

Ćwiczenie 4

Wyznaczanie elektroujemności Mullikena i twardości Pearsona

Jeśli wykonamy wykres energii atomu w funkcji posiadanych przezeń elektronów, to przekonamy się, że w pobliżu $N = Z$ zależność taka jest w przybliżeniu kwadratowa. Wartość pierwszej pochodnej powyższej funkcji w punkcie $N = Z$ stanowi tzw. potencjał chemiczny (μ).



Mulliken zaproponował, że potencjał ten wzięty z przeciwnym znakiem może definiować elektroujemność (χ). Natomiast Pearson zdefiniował pojęcie twardości chemicznej (η) jako połowę pochodnej potencjału chemicznego po liczbie elektronów posiadanych przez atom.

$$\chi = -\mu = -\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_Z \qquad \eta = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_Z = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial N^2}\right)_Z$$

Znając energię jonizacji $E_i = E_{Z-1} - E_Z$ i powinowactwo elektronowe $E_{ea} = E_{Z+1} - E_Z$ (wyrażone w elektronowoltach) możemy, stosując przybliżenie różnic skończonych, wyznaczyć elektroujemność i twardość jako:

$$\chi = \frac{E_i + E_{ea}}{2} \qquad \eta = \frac{E_i - E_{ea}}{2}$$

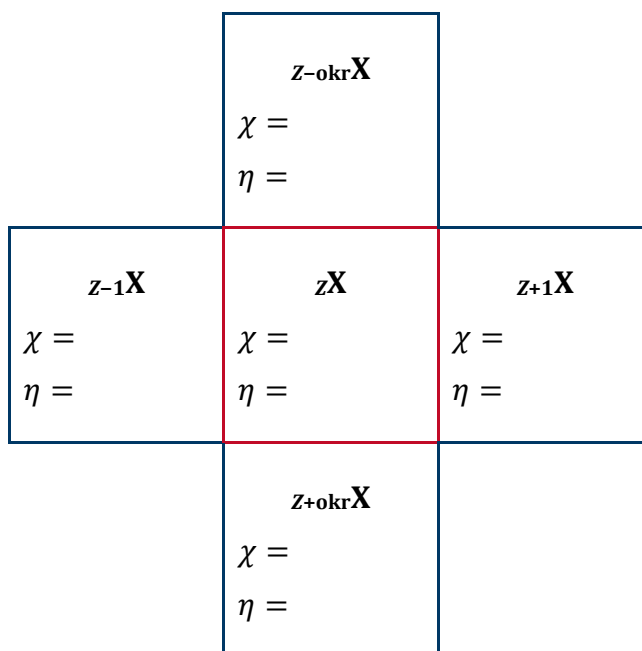
Zadania do wykonania

1. Oblicz energię całkowitą badanego atomu oraz jego jonów (X^{4+} , X^{3+} , X^{2+} , X^+ , X^0 , X^- , X^{2-}). Konfiguracje jonów dobierz tak, aby wynikowe energie całkowite były jak najniższe. Energie przeliczone na elektronowolty ujmij w tabeli.
2. Uzyskane energie nanieś na wykres w funkcji liczby elektronów. Metodą najmniejszych kwadratów znajdź równanie paraboli aproksymujące punkty z obliczeń w pobliżu $N = Z$ (punkty wyraźnie odbiegające od trendu umieść w osobnej serii i nie bierz ich pod uwagę przy dopasowywaniu paraboli).
3. Oblicz elektroujemność i twardość atomu jako odpowiednie pochodne funkcji aproksymacyjnej w punkcie $N = Z$.
4. Na podstawie energii dla X^+ , X^0 , X^- wyznacz energię jonizacji i powinowactwo elektronowe (w elektronowoltach), a następnie oblicz elektroujemność i twardość metodą różnic skończonych.
5. Przedyskutuj różnice pomiędzy dwiema metodami wyznaczania elektroujemności i twardości. Wyznacz też elektroujemność Mullikena i twardość Pearsona na podstawie danych doświadczalnych (Dodatek B). Porównaj wartości obliczone obiema metodami wynikami eksperymentalnymi.

Ćwiczenie 5

Badanie zmienności elektroujemności oraz twardości w układzie okresowym

Teoria orbitali atomowych wraz z zakazem Pauliego wyjaśnia uporządkowanie pierwiastków w układzie okresowym oraz zmienność ich właściwości. W tym ćwiczeniu chcemy zbadać jak zmienia się elektroujemność Mullikena i twardość chemiczna Pearsona w obrębie grupy i okresu dla najbliższych sąsiadów badanego atomu. Sprowadza się to do wypełnienia poniższego diagramu:



Zadania do wykonania

1. Wyznacz energie X^+ , X^0 , X^- dla atomów sąsiednich pierwiastków w układzie okresowym (pamiętaj o zmianie wartości parametrów Z i α w pliku wejściowym .inp – Dodatek A). Nie wszystkie pierwiastki posiadają komplet czterech sąsiadów.
2. Na podstawie otrzymanych wartości oblicz odpowiednie energie jonizacji oraz powinowactwa elektronowe. Energie przelicz na elektronowolty.
3. Metodą różnic skończonych wyznacz elektroujemność i twardość atomów sąsiednich pierwiastków (w eV). Wyniki przedstaw w postaci powyższego diagramu.
4. Przedyskutuj zmienność elektroujemności i twardości atomów w ramach grupy i okresu.

Ćwiczenie 6

Ładunek jądra i jego ekranowanie

Jak wykazał Slater, zachowanie elektronów w atomach wieloelektronowych można opisać w przybliżeniu posługując się orbitalami obliczonymi dla atomu wodoru pod warunkiem, że wprowadzi się do obliczeń skorygowaną wartość efektywnego ładunku jądra $Z^* = Z - \sigma$. Energię orbitalną danego elektronu wyraża wówczas skorygowany wzór (będący wzorem ścisłym dla atomu wodoru):

$$E = -\frac{Z^{*2}m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -13,6 \left(\frac{Z - \sigma}{n}\right)^2 \text{ [eV]}$$

Slater podał empiryczne reguły pozwalające na obliczenie stałej ekranowania σ wyrażającej różnicę pomiędzy wartościami Z i Z^* . Dla przeprowadzenia takiego obliczenia zapisujemy najpierw konfigurację elektronową danego atomu przy zachowaniu następujących ugrupowań orbitali i ich kolejności:

$$(1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p) \dots$$

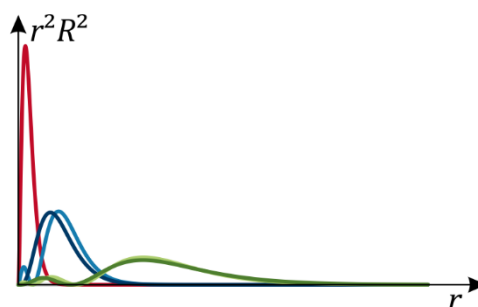
Obliczając stałą σ dla elektronu ns lub np przyjmujemy, że:

1. Elektrony położone w ugrupowaniach w prawo od ugrupowania (ns, np) nie wnoszą żadnego udziału do stałej.
2. Pozostałe elektrony w ugrupowaniu (ns, np) wnoszą udział w wysokości 0,35; wyjątek stanowią elektrony $1s$ wnoszące udział 0,30.
3. Każdy z elektronów w powłoce $(n - 1)$ wnosi udział 0,85.
4. Każdy z elektronów w powłoce $(n - 2)$ i w powłokach położonych jeszcze bliżej jądra wnosi udział 1,00.

Obliczenie stałej ekranowania dla elektronów nd i nf następuje w taki sam sposób, z tą jednak różnicą, że udział każdego z elektronów należących do wszystkich ugrupowań w lewo od nd lub nf liczy się jako równy 1,00.

Zadania do wykonania

1. Wyznacz metodą Slatera energie poziomów energetycznych w atomie X i porównaj je z wartościami obliczonymi w programie FDA. Wyniki ujmij w tabeli.
2. Korzystając z danych wynikowych zawartych w pliku .dmp stwórz wykres ilustrujący rozkłady gęstości elektronowej r^2R^2 w funkcji r dla poszczególnych orbitali (patrz: Dodatek D).
3. W oparciu o wykres uzasadnij słuszność reguł Slatera. Wytlumacz skąd mogą pochodzić rozbieżności w wartościach energii.



Dodatek A.

Parametry metody $X\alpha$

$1H$ 0,667		zX α																$2He$ 0,687					
$3Li$ 0,540	$4Be$ 0,757																	$5B$ 0,784	$6C$ 0,785	$7N$ 0,791	$8O$ 0,602	$9F$ 0,647	$10Ne$ 0,683
$11Na$ 0,627	$12Mg$ 0,732																	$13Al$ 0,779	$14Si$ 0,781	$15P$ 0,785	$16S$ 0,635	$17Cl$ 0,665	$18Ar$ 0,689
$19K$ 0,697	$20Ca$ 0,739	$21Sc$ 0,736	$22Ti$ 0,718	$23V$ 0,657	$24Cr$ 0,828	$25Mn$ 0,668	$26Fe$ 0,691	$27Co$ 0,654	$28Ni$ 0,585	$29Cu$ 0,775	$30Zn$ 0,736	$31Ga$ 0,777	$32Ge$ 0,777	$33As$ 0,773	$34Se$ 0,644	$35Br$ 0,665	$36Kr$ 0,684						
$37Rb$ 0,725	$38Sr$ 0,742	$39Y$ 0,735	$40Zr$ 0,731	$41Nb$ 0,869	$42Mo$ 0,874	$43Tc$ 0,693	$44Ru$ 0,845	$45Rh$ 0,832	$46Pd$ 0,650	$47Ag$ 0,804	$48Cd$ 0,763	$49In$ 0,780	$50Sn$ 0,773	$51Sb$ 0,744	$52Te$ 0,660	$53I$ 0,660	$54Xe$ 0,673						
$55Cs$ 0,764	$56Ba$ 0,760	*	$72Hf$ 0,738	$73Ta$ 0,782	$74W$ 0,780	$75Re$ 0,746	$76Os$ 0,783	$77Ir$ 0,812	$78Pt$ 0,948	$79Au$ 0,956	$80Hg$ 0,884	$81Tl$ 0,826	$82Pb$ 0,797	$83Bi$ 0,657	$84Po$ 0,645	$85At$ 0,667	$86Rn$ 0,631						
$87Fr$ 0,854	$88Ra$ 0,808	**	$104Rf$ 0,690	$105Db$	$106Sg$	$107Bh$	$108Hs$	$109Mt$	$110Ds$	$111Rg$	$112Cn$	$113Nh$	$114Fl$	$115Mc$	$116Lv$	$117Ts$	$118Og$						
		*	$57La$ 0,745	$58Ce$ 0,729	$59Pr$ 0,769	$60Nd$ 0,768	$61Pm$ 0,768	$62Sm$ 0,769	$63Eu$ 0,764	$64Gd$ 0,763	$65Tb$ 0,778	$66Dy$ 0,781	$67Ho$ 0,786	$68Er$ 0,790	$69Tm$ 0,794	$70Yb$ 0,797	$71Lu$ 0,640						
		**	$89Ac$ 0,721	$90Th$ 0,827	$91Pa$ 0,808	$92U$ 0,840	$93Np$ 0,843	$94Pu$ 0,860	$95Am$ 0,846	$96Cm$ 0,785	$97Bk$ 0,864	$98Cf$ 0,869	$99Es$ 0,881	$100Fm$ 0,886	$101Md$ 0,891	$102No$ 0,895	$103Lr$ 0,847						

A. Herman: *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **12** (2003) 21-32.

Dodatek B.

Doświadczalne wartości potencjałów jonizacji i powinowactwa elektronowego

$1H$ 13,59 0,75		zX E_i eV E_{ea} eV																$2He$ 24,58 0,00					
$3Li$ 5,39 0,62	$4Be$ 9,32 0,00																	$5B$ 8,29 0,28	$6C$ 11,26 1,59	$7N$ 14,53 0,07	$8O$ 13,61 1,46	$9F$ 17,42 3,40	$10Ne$ 21,56 0,00
$11Na$ 5,14 0,55	$12Mg$ 7,64 0,00																	$13Al$ 5,98 0,44	$14Si$ 8,15 1,38	$15P$ 10,48 0,75	$16S$ 10,36 2,07	$17Cl$ 12,96 3,62	$18Ar$ 15,75 0,00
$19K$ 4,34 0,50	$20Ca$ 6,11 0,02	$21Sc$ 6,56 0,19	$22Ti$ 6,83 0,08	$23V$ 6,74 0,52	$24Cr$ 6,76 0,67	$25Mn$ 7,43 0,00	$26Fe$ 7,90 0,16	$27Co$ 7,88 0,66	$28Ni$ 7,64 1,16	$29Cu$ 7,72 1,23	$30Zn$ 9,39 0,00	$31Ga$ 6,00 0,30	$32Ge$ 7,89 1,23	$33As$ 9,81 0,81	$34Se$ 9,75 2,02	$35Br$ 11,81 3,36	$36Kr$ 13,99 0,00						
$37Rb$ 4,18 0,49	$38Sr$ 5,69 0,05	$39Y$ 6,22 0,31	$40Zr$ 6,63 0,43	$41Nb$ 6,76 0,89	$42Mo$ 7,09 0,74	$43Tc$ 7,27 0,55	$44Ru$ 7,36 1,15	$45Rh$ 7,46 1,14	$46Pd$ 8,33 0,56	$47Ag$ 7,57 1,30	$48Cd$ 8,99 0,00	$49In$ 5,78 0,30	$50Sn$ 7,34 1,11	$51Sb$ 8,64 1,07	$52Te$ 9,01 1,97	$53I$ 10,45 3,06	$54Xe$ 12,13 0,00						
$55Cs$ 3,89 0,47	$56Ba$ 5,21 0,14	*	$72Hf$ 6,82 0,10	$73Ta$ 7,89 0,32	$74W$ 7,98 0,81	$75Re$ 7,88 0,15	$76Os$ 8,71 1,10	$77Ir$ 9,12 1,57	$78Pt$ 9,02 2,13	$79Au$ 9,23 2,31	$80Hg$ 10,44 0,00	$81Tl$ 6,11 0,20	$82Pb$ 7,42 0,36	$83Bi$ 7,29 0,95	$84Po$ 8,42 1,90	$85At$ 9,54 2,80	$86Rn$ 10,75 0,00						
$87Fr$ 3,94	$88Ra$ 5,28	**	$104Rf$	$105Db$	$106Sg$	$107Bh$	$108Hs$	$109Mt$	$110Ds$	$111Rg$	$112Cn$	$113Nh$	$114Fl$	$115Mc$	$116Lv$	$117Ts$	$118Og$						
		*	$57La$ 5,58 0,50	$58Ce$ 5,54 0,52	$59Pr$ 5,46 0,52	$60Nd$ 5,53 0,52	$61Pm$ 5,60 0,52	$62Sm$ 5,64 0,52	$63Eu$ 5,67 0,52	$64Gd$ 6,15 0,52	$65Tb$ 5,88 0,52	$66Dy$ 5,94 0,52	$67Ho$ 6,02 0,52	$68Er$ 6,11 0,52	$69Tm$ 6,18 0,52	$70Yb$ 6,25 0,52	$71Lu$ 5,43 0,34						
		**	$89Ac$ 5,17	$90Th$ 6,08	$91Pa$ 5,89	$92U$ 6,19	$93Np$ 6,27	$94Pu$ 6,06	$95Am$ 5,99	$96Cm$ 6,02	$97Bk$ 6,23	$98Cf$ 6,30	$99Es$ 6,42	$100Fm$ 6,50	$101Md$ 6,58	$102No$ 6,65	$103Lr$						

webelements.com

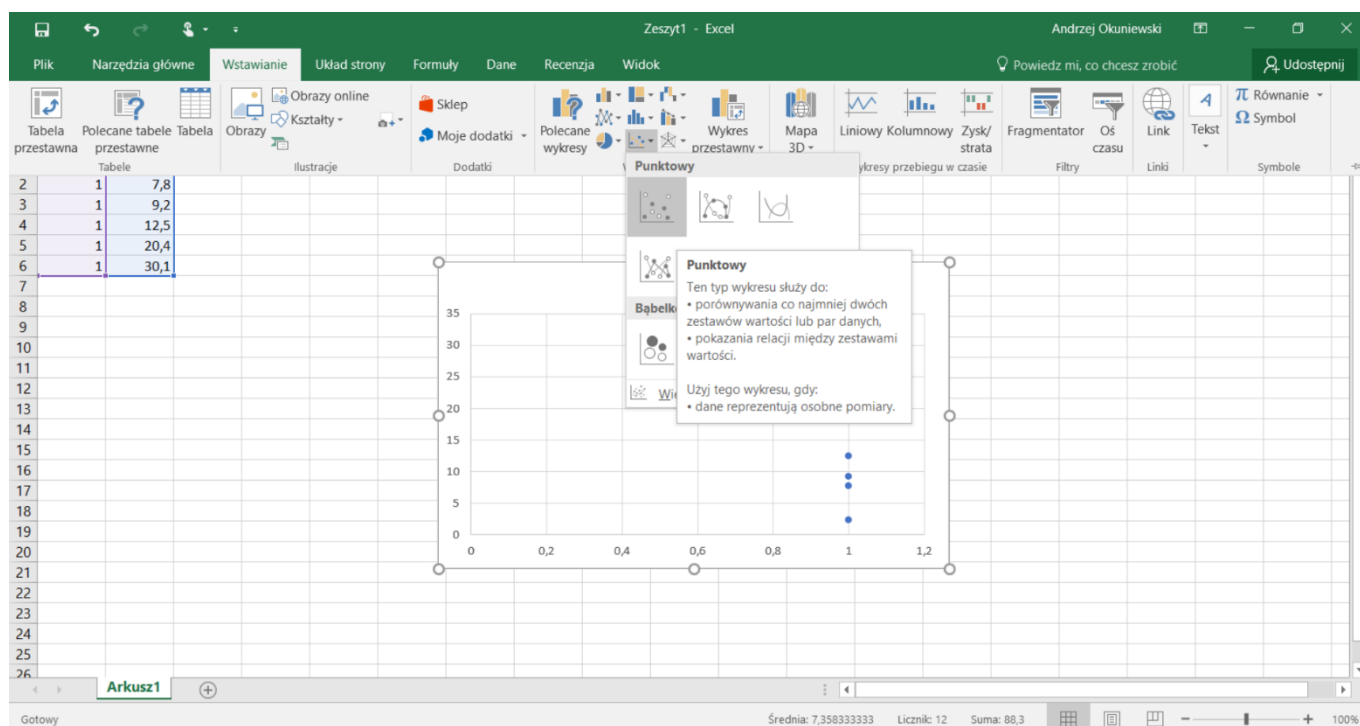
Dodatek C.

Wykonywanie diagramów liniowych w programie Excel

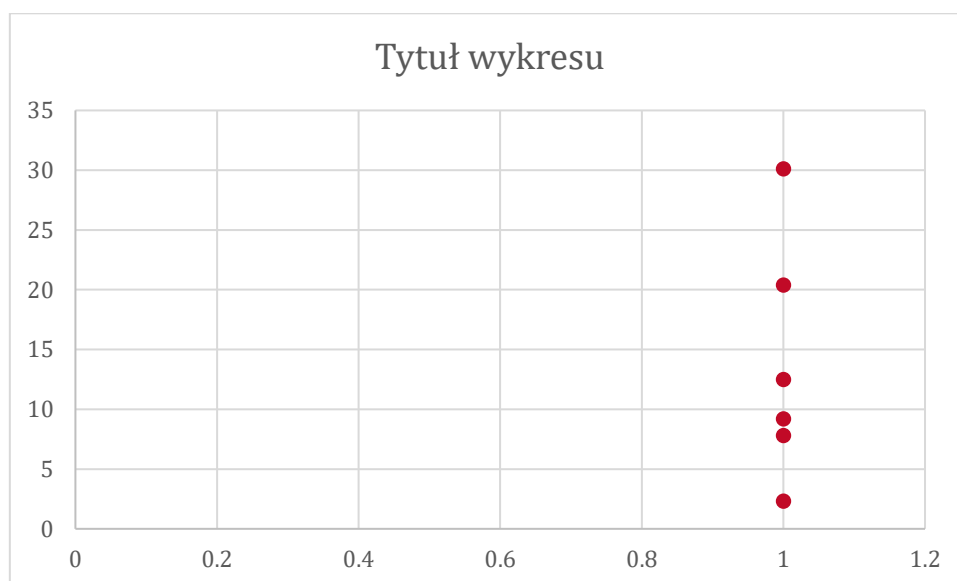
W programie Excel nie ma *de facto* opcji tworzenia pionowych i poziomych diagramów. Istnieje jednak sposób na ominięcie tej niedogodności. Poniżej zostanie opisana metoda tworzenia takich diagramów na przykładzie programu Excel 2016.

Aby rozpocząć należy umieścić wartości liczbowe, które mają zostać naniesione na diagram w jednej z kolumn programu Excel. Pamiętaj by w zależności od ustawień systemu miejsca dziesiętne oddzielać kropką lub przecinkiem.

Aby uzyskać diagram pionowy w kolumnie po lewej stronie wprowadzamy liczby „1”. Następnie zaznaczamy obie kolumny i wybieramy opcję *Wstawianie > Wykres > Punktowy* (ang. *scatter plot*).



Uzyskany wykres przerobimy na diagram pionowy.

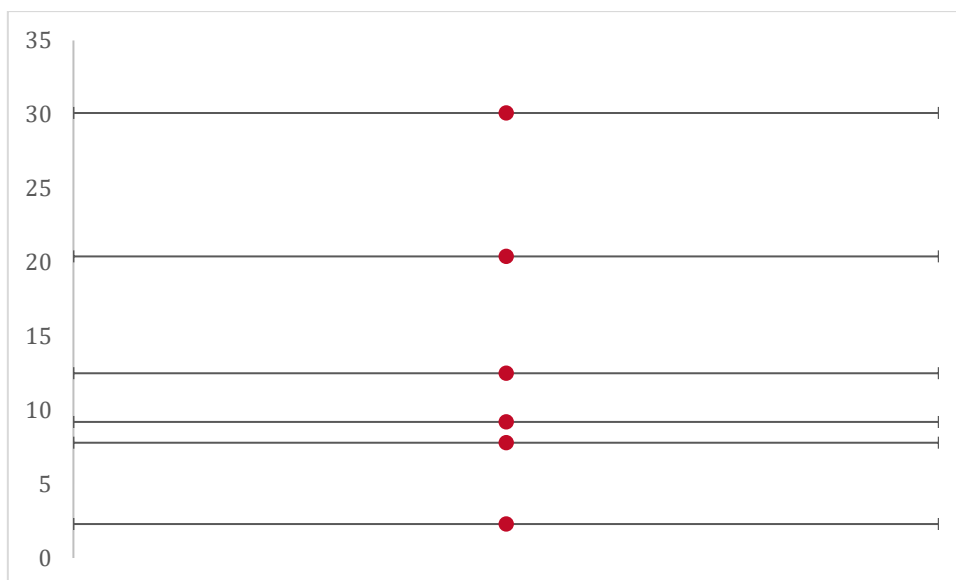


Zakres osi poziomej należy jest ustawić na (0, 2) tak, by punkty serii znajdowały się na środku, natomiast samą oś należy usunąć, gdyż nie ma ona żadnego znaczenia fizycznego. Skasować też należy linie siatki które zaciemnią obraz.



Tytuł wykresu można zmienić wg potrzeby lub usunąć. Aby stworzyć poziome linie (zamiast punktów) można dodać słupki błędów o określonej szerokości. Zaznaczamy punkty serii i wybieramy opcję *Projektowanie > Dodaj element wykresu > Słupki błędów > Więcej opcji...* I zamykamy okno z ustawieniami.

Dodane zostaną zarówno słupki poziome, jak i pionowe. W związku z tym te drugie należy usunąć klikając na jeden z nich i wciskając klawisz DEL lub prawym przyciskiem myszy > *Usuń*.

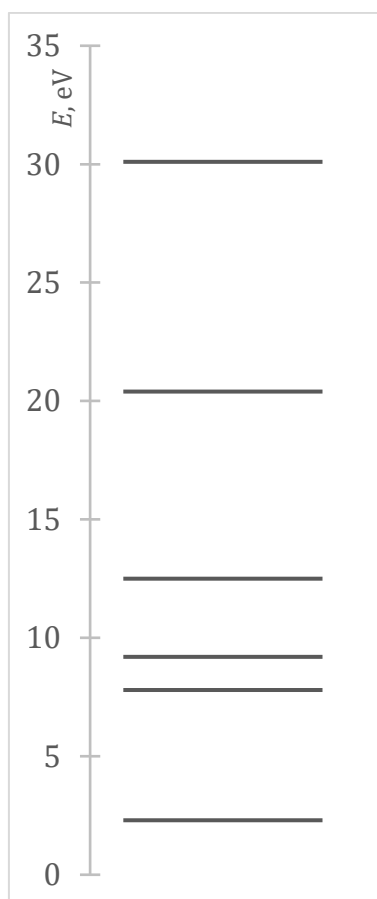


Następnie klikamy poziome słupki błędów prawym klawiszem myszy i wybieramy opcję *Formatuj słupki błędów*. W wyświetlonym panelu zaznaczamy opcję *Bez zakończenia* oraz w polu *Stała wartość* wpisujemy wartość 0,75. Zamykamy panel.

Zaznaczamy punkty serii i klikając prawym przyciskiem myszy w otwartym panelu wybieramy opcję *Wypełnienie i linia > Znacznik > Opcje znaczników > Brak*.



Dopasowujemy grubość linii, etykiety i format osi oraz rozmiar wykresu.



Taki diagram pionowy nadaje się już do sprawozdania.

Aby stworzyć diagram poziomy postępujemy analogicznie, tylko liczby „1” umieszczamy w kolumnie po prawej stronie danych (dzięki czemu będą one tym razem stanowiły oś y).



Dodatek D.

Wykonywanie wykresów rozkładów gęstości elektronowej $r^2R^2(r)$

Na początku należy wykonać obliczenia HFS dla stanu podstawowego atomu X i otworzyć plik wynikowy .dmp. W pliku tym znajdziemy następujące informacje:

Linia 1:

string s – wersja programu

Linia 2:

int N_{grid} – liczba punktów siatki

double x_0 – współrzędna pierwszego punktu siatki (w jednostkach Bohra)

double x_n – współrzędna ostatniego punktu siatki (w jednostkach Bohra)

Linia 3:

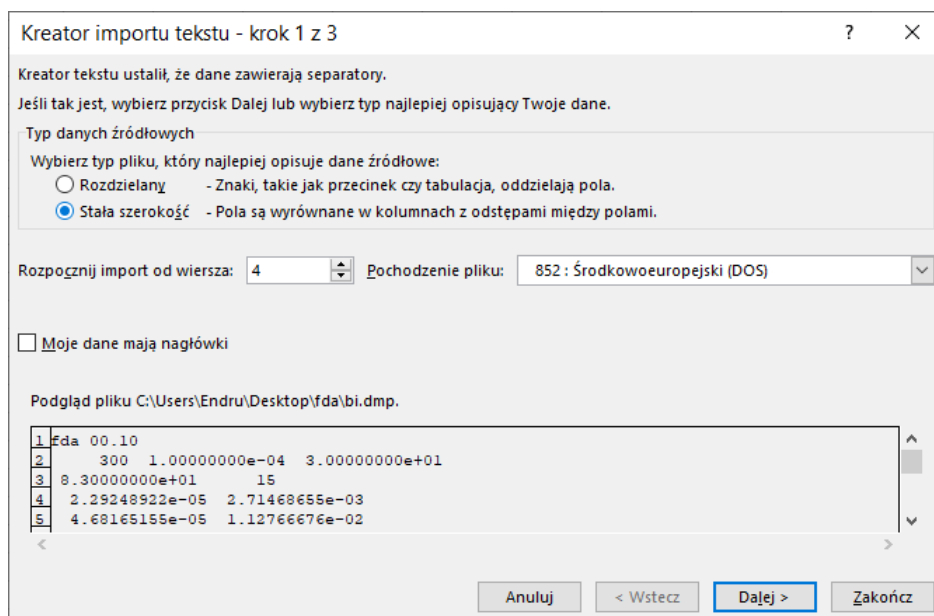
double Z – ładunek jądra

int N_{orb} – liczba orbitali

W kolejnych 300 liniach (4-303) znajdziemy pary liczb (r, ρ) , gdzie r to odległość od jądra (w jednostkach atomowych a_0), a ρ to całkowita gęstość elektronowa. Następnie w linii 304 pojawia się informacja o liczbach kwantowych, obsadzeniu i energii pierwszego orbitalu (zwykle 1s). W następnych 300 liniach odnajdujemy wartości funkcji radialnych $rR(r)$ dla tegoż orbitalu – wartości r są takie same jak w liniach 4-303. Kolejne linie zawierają informacje dla kolejnych orbitali.

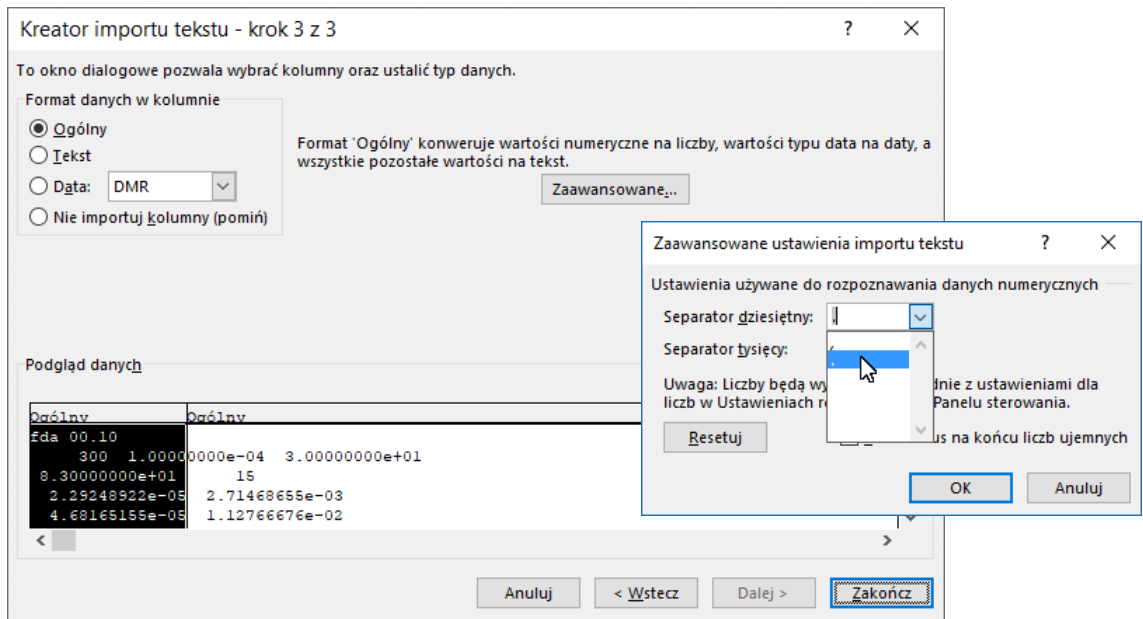
W celu wykonania wykresu $r^2R^2(r)$ dla poszczególnych orbitali otwieramy program Excel i wybieramy opcję *Dane > Z tekstu*. Wybieramy opcję *Wszystkie pliki (*.*)*, po czym odnajdujemy i otwieramy plik .dmp.

Jako typ danych źródłowych wybieramy *Stała szerokość* i w polu *Rozpocznij import od wiersza* wpisujemy 4, po czym klikamy *Dalej*.

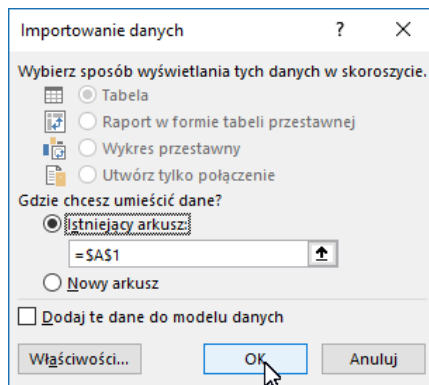


W kroku 2 pozostawiamy znacznik kolumny w domyślnej pozycji (16) i klikamy *Dalej*.

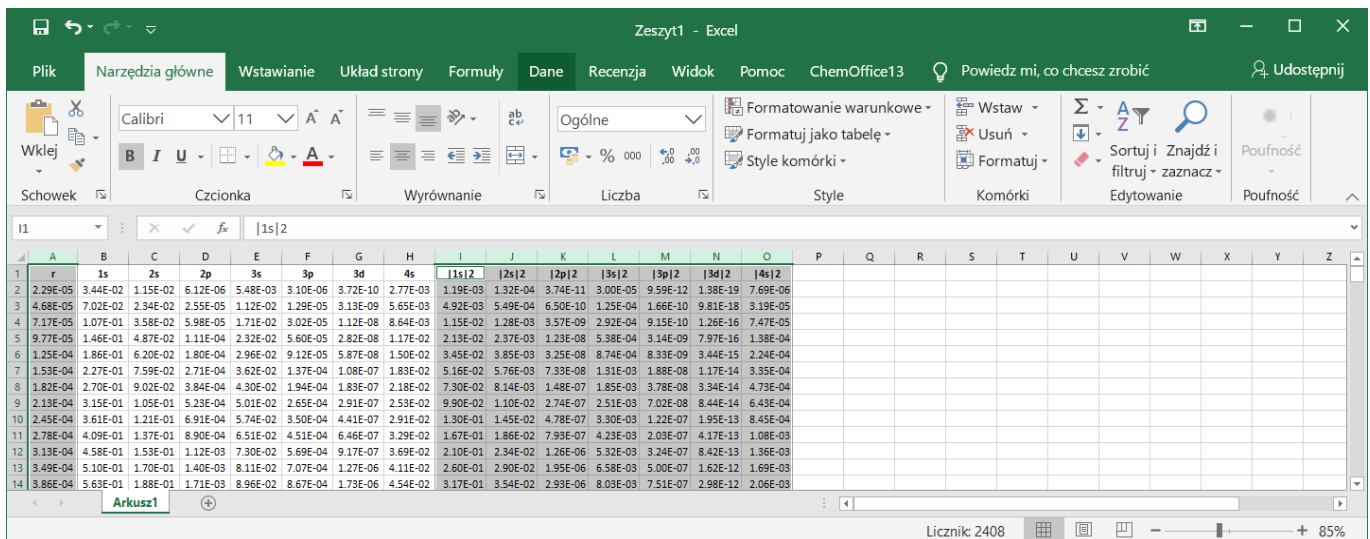
W kroku 3 klikamy opcję *Zaawansowane* i jako separator dziesiętny wybieramy znak kropki. Następnie klikamy *OK* i *Zakończ*.



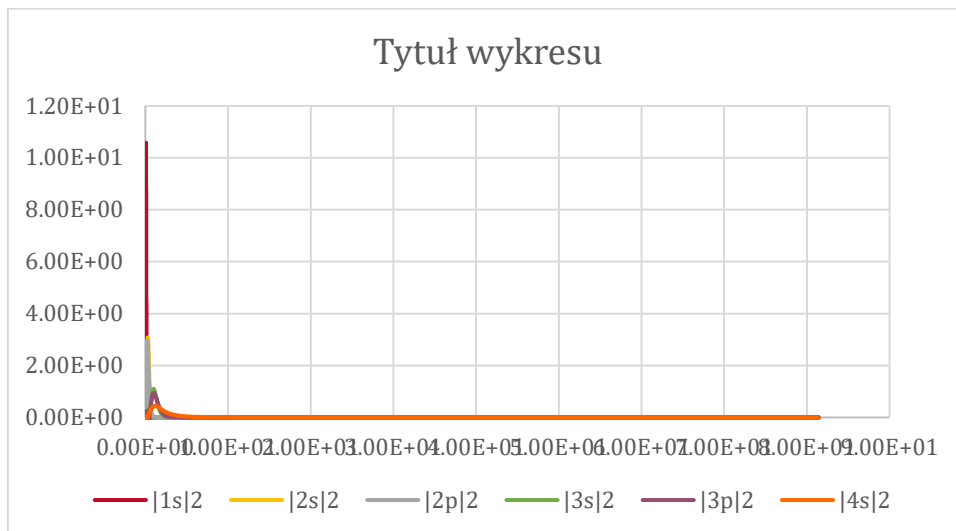
W oknie *Importowanie danych* wybieramy czy chcemy wstawić dane w bieżącym, czy w nowym arkuszu i klikamy *OK*.



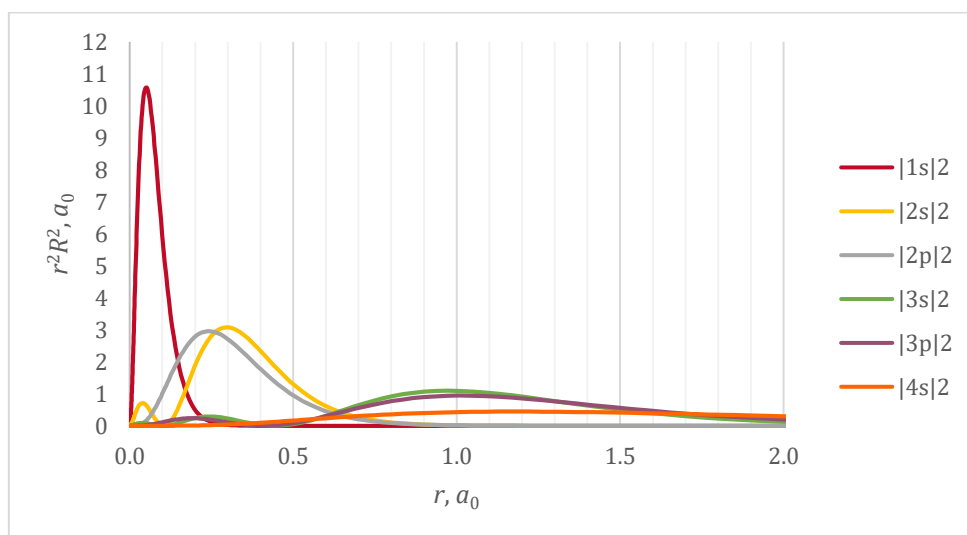
Kasujemy kolumnę B. Kolejne segmenty kolumny A oddzielone są parami liczb kwantowych (główniej i pobocznej). Należy je ustawić w postaci tabeli zmieniając tytuły kolumn kolejno na „r, a0” oraz „1s”, „2s”, itd... Następnie należy utworzyć kolejny zestaw kolumn, w których będą obliczone kwadraty funkcji falowych.



Aby utworzyć wykres zaznaczamy kolumnę pierwszą oraz kolumny z kwadratami funkcji i wybieramy *Wstawianie > Wstaw wykres punktowy (x, y) > Punktowy z prostymi liniami*.



Dostosowujemy format wykresu, liczb oraz osi do naszych potrzeb.



Tak przygotowany wykres nadaje się już do sprawozdania.