

Fakultet elektrotehnike, strojarstva i brodogradnje

Razlikovni studiji (910/920/930/940/950)

Fizika 2

Predavanje 11

Struktura atoma

Dr. sc. Damir Lelas

(Damir.Lelas@fesb.hr,

damir.lelas@cern.ch)

Danas ćemo raditi:

(V. Henč-Bartolić i P. Kulišić: "Valovi i optika", poglavlje 10)

□ Struktura atoma

- Linijski spektri
- Bohrov model atoma
- Linijski spektar vodika
- Energijska stanja vodikova atoma
- Princip korespondencija klasične i kvantne fizike
- Kvantni brojevi elektrona u atomu
- Paulijevo načelo

Priča

- ❑ Ova snimka Helix maglice (spiralnog oblika) je načinjena kao kompozicija ultra-oštih slika snimljenih NASA-inim Hubble Space Teleskopom, kombiniranih sa slikama 0.9-metarskog teleskopa Kitt Peak National Observatorije pokraj Tucsona, Arizona, SAD.
- ❑ Udaljena 650 svjetlosnih godina, Helix maglica je jedna od Zemlji najbližih planetarnih maglica.
- ❑ Planetarna maglica je usijani plin koji okružuje umiruću zvijezdu, vrlo sličnu našem suncu.

Kako je moguće odrediti kemijski sastav zvijezda?



Preuzeto sa: <http://hubblesite.org/newscenter/archive/2003/11/image/a>

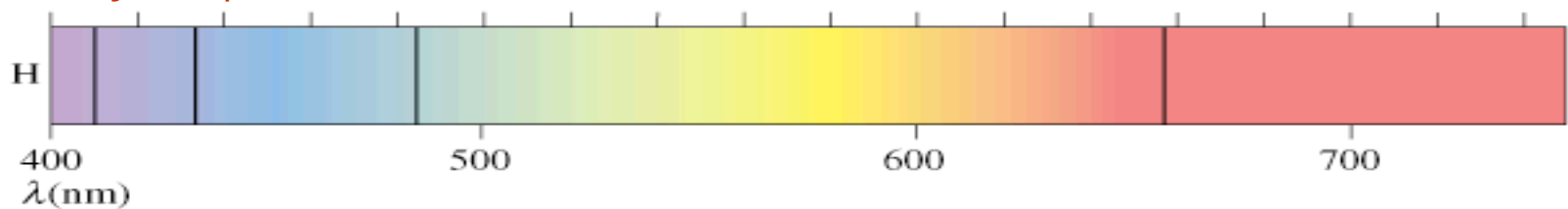
Odgovor ćete saznati na današnjem predavanju.

Spektri atoma

- Užarena čvrsta tijela, tekućine i plinovi pri visokom tlaku i temperaturi emitiraju svjetlost s kontinuiranim valnim duljinama.
- Razrijeđeni plinovi i pare metala emitiraju diskretni - linijski spektar:

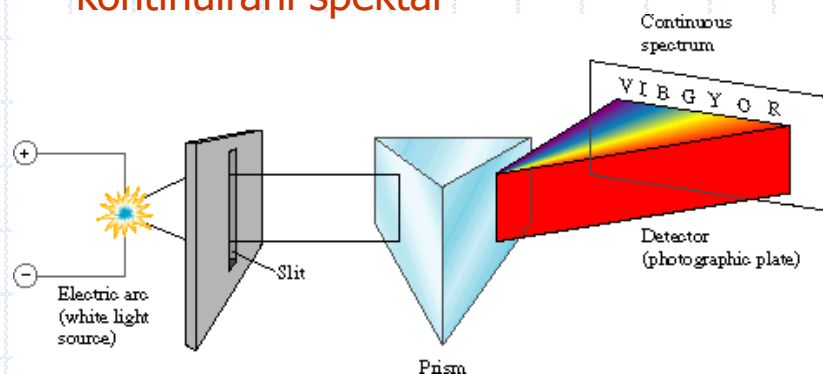


Apsorpcijski spektar vodika - svjetlost koju emitira izvor kontinuiranog spektra (bijela svjetlost) prolazi kroz razrijeđeni plin vodika, uočite tamne linije na istim valnim duljinama koje emitira i razrijeđeni plin vodika

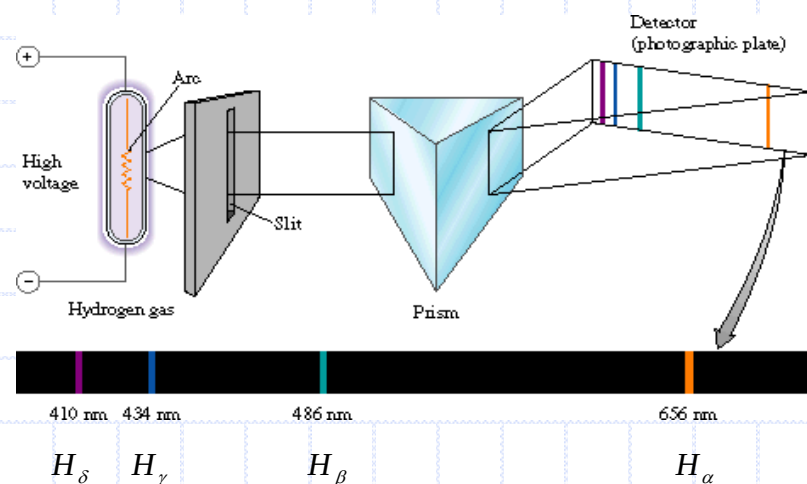


Linijski spektri

Izvor - zagrijano čvrsto tijelo
- kontinuirani spektar



Izvor - Razrijeđeni plin vodika - linijski spektar



Balmerova serija (više na slijedećoj stranici)

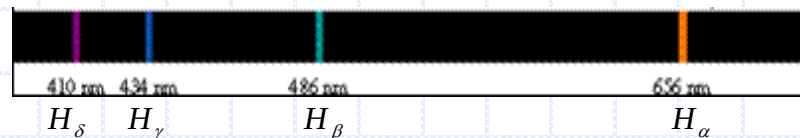
- ✓ Ideja: proučavajući linijske spektre atoma (elemenata) saznati više o strukturi atoma
- ✓ Emisijski i apsorpcijski spektri su jedinstveni za svaki element
- ✓ Linijski spektar vodika (jedan od najjednostavnijih spektara) proučavan je još krajem 19. stoljeća
- ✓ Iako se spektar vodika sastoji od mnogo linija u ultraljubičastom, vidljivom i infracrvenom području, one se ipak mogu grupirati u pojedine serije, što bitno olakšava njihovo proučavanje

Linijski spektri - vodik

- ✓ Švicarski fizičar Johann Balmer prvi je uočio vezu među pojedinim valnim duljinama vodikova spektra. On je proučavao linije serije koju danas zovemo njegovim imenom.
- ✓ Balmerova formula daje zakon po kojem se može izračunati valna duljina ili frekvencija svake linije te serije:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, 6, \dots$$

Balmerova serija (1885)



$$R = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad \text{Rydbergova konstanta, } \lambda - \text{valna duljina}$$

- ✓ Usavršavanjem spektrografskih aparata pronađene su i druge serije u ultraljubičastom i infracrvenom dijelu spektra vodika:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2, 3, 4, \dots$$

Lymanova serija (1916)

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 4, 5, 6, \dots$$

Pashenova serija (1908)

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 5, 6, 7, \dots$$

Brackettova serija (1922)

Općenita relacija

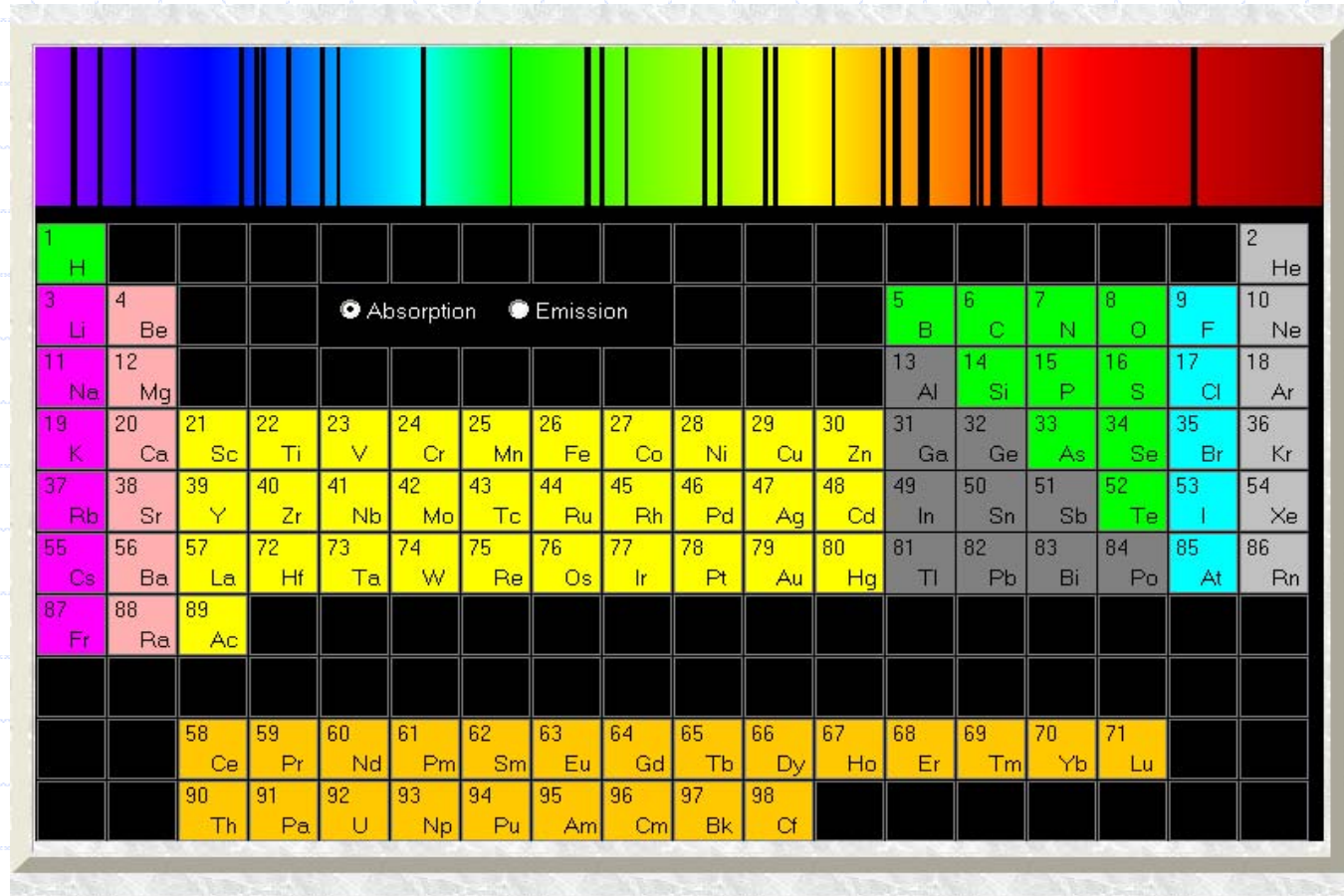
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = m + 1, m + 2, m + 3, \dots$$

- ✓ Valne duljine slijede precizni matematički izraz
- ✓ Ovakovi eksperimentalni podaci koji se precizno daju matematičku opisati odražavaju određenu strukturu atoma!

http://jers

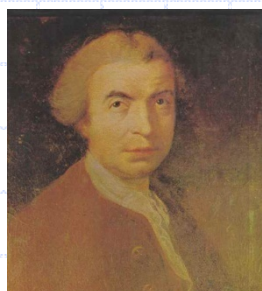
1 H	
3 Li	4 Be

-



Atomistička struktura tvari - povijest (I)

- Grčki filozofi Leukip i Demokrit (5. stoljeće prije Krista) zastupaju ideju da se tvar sastoji od atoma – nedjeljivih čestica, koji se nalaze u neprekidnom gibanju u praznom prostoru.
- Galilei, Descartes i Newton bili su skloni atomističkom shvaćanju.
- Teorija Ruđera Boškovića preteča je modernih teorija o sastavu tvari:

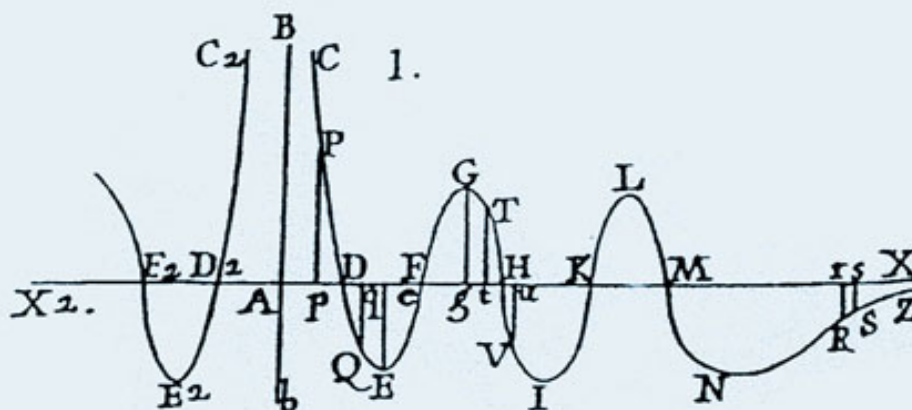


- *Theoria Philosophiae naturalis* (Beč 1758).
- Werner Heisenberg je zapisao slijedeće (oko 1950., slobodan prijevod): "Među znanstvenicima 18. stoljeća, Bošković zauzima posebno mjesto kao teolog, filozof, matematičar i astronom. Njegova "Theoria philosophiae naturalis" sadrži hipoteze koje su potvrđene razvojem fizike u proteklih pola stoljeća".

Preuzeto sa: <http://nippur.irb.hr/eng/scientist/rudjer.html>

"Po mojem mišljenju osnovni su elementi tvari posve nedjeljive i neprotežne točke koje su u beskrajnem vakuumu ..."

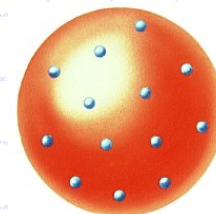
"Zakon tih sila jest takav da su one pri neznatnim udaljenostima odbojne i povećavaju se beskonačno što se te udaljenosti smanjuju ..., povećavanjem udaljenosti prelaze u privlačne ... zatim odbojne sve dok ne počnu postajati trajno privlačne i približno obrnuto razmjerne kvadratima udaljenosti ..."



Boškovićeva krivulja (curva Boscovichiana).

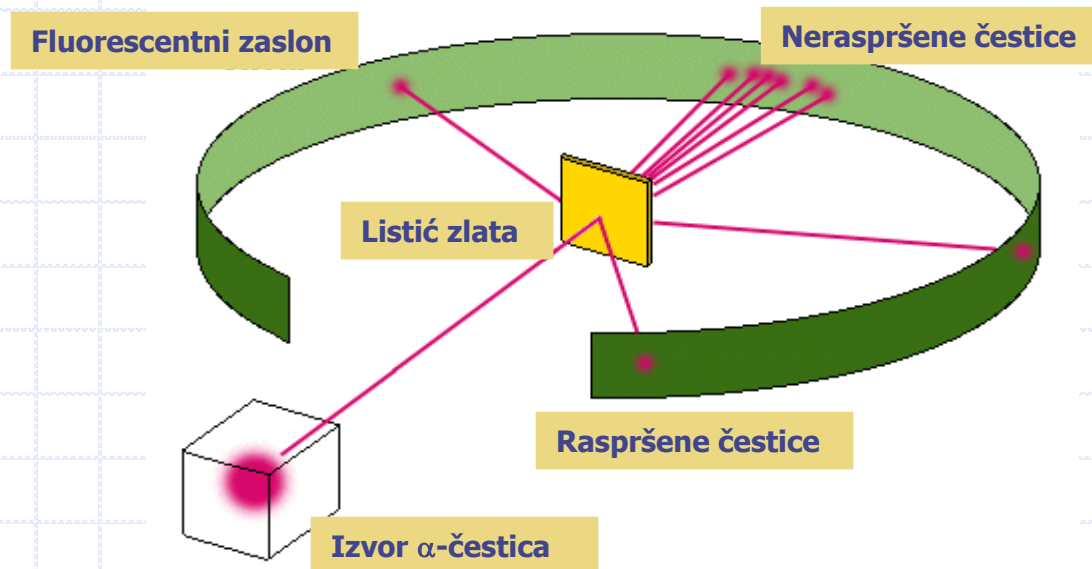
Atomistička struktura tvari - povijest (II)

- ❑ Moderna teorija o atomima započinje eksperimentalnim radovima Daltona i Avogadra (18. i 19. stoljeće).
 - Prema Daltonu tvar je izgrađena od kemijskih elemenata čiji su najmanji dijelovi atomi.
 - Avogadro tvrdi da se kemijski spojevi sastoje od molekula koje su izgrađene od atoma jednog ili više elemenata.
- ❑ U eksperimentima s razrijeđenim plinom otkrivene su katodne (Goldstein 1876.) i kanalne zrake (Goldstein 1886.).
- ❑ Daljnji eksperimenti su pokazali da su **katodne zrake elektroni**, a **kanalne zrake pozitivni ioni**.
- ❑ J.J. Thomson je prvi, 1897. godine, izmjerio omjer naboja i mase elektrona e/m .
- ❑ J.J. Thomson, 1898., pretpostavlja da se atom sastoji od pozitivnog, jednoliko raspoređenog, naboja unutar kugle i vrlo sitnih elektrona koji su razmješteni ravnomjerno u toj kugli ("sirnica s groždicama").



Rutherford-Geiger-Marsdenov eksperiment

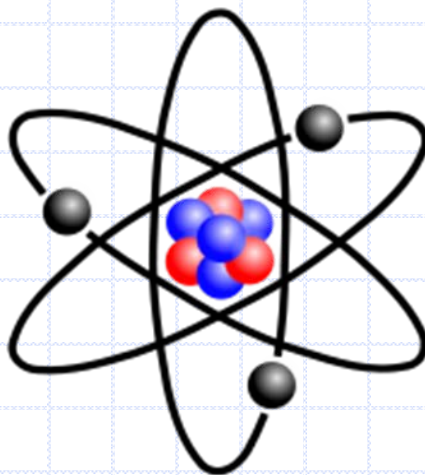
- Da bi preciznije ispitali strukturu atoma (Thomsonov model), Ernest Rutherford, H. Geiger i E. Marsden bombardirali su 1909. tanke listiće zlata α -česticama i promatrali promjenu njihova smjera pri prolasku kroz foliju:



- Mjerenja su zapanjujuće pokazala da se otprilike 1 u 8000 α -čestica raspršivala pod vrlo velikim kutem (preko 90°), dok su ostale čestice prolazile (gotovo) bez raspršenja
- Rutherford je izmjerio broj raspršenih α -čestica kao funkciju kuta raspršenja
- Thomsonovim se modelom ne mogu objasniti rezultati ovog eksperimenta

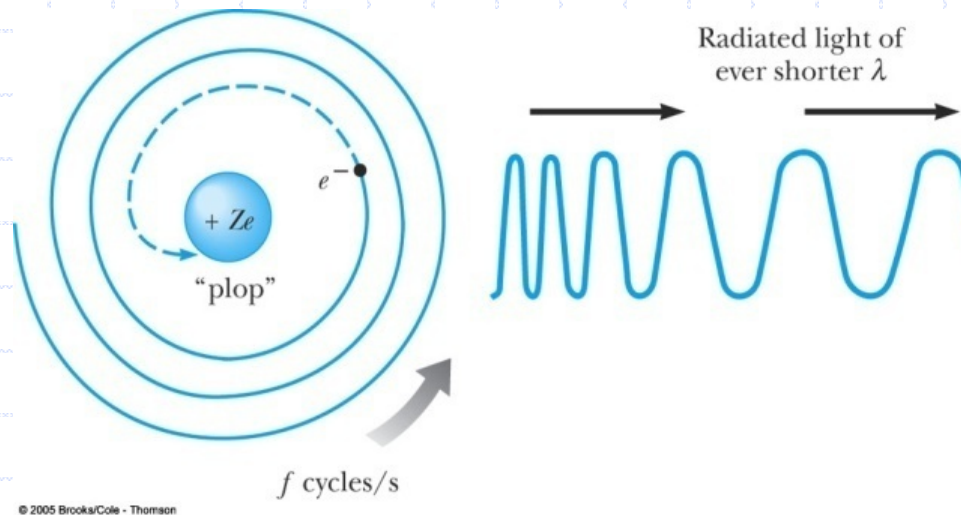
Rutherfordov model atoma (1911 god.)

- ❑ Atom se sastoji od vrlo male jezgre u kojoj je skoncentrirana gotovo sva masa atoma i elektrona koji kruže oko jezgre, kao planeti oko sunca.
- ❑ Rutherford u svom modelu po prvi put uvodi pojam atomske jezgre
- ❑ Jezgra ima pozitivan naboj Ze (Z -redni broj kemijskog elementa, e -naboj elektrona), a oko jezgre kruži Z elektrona pa je atom kao cjelina neutralan.
- ❑ Veći dio atoma je prazan, iz eksperimentalnih podataka Rutherford je dobio da je promjer jezgre oko 10^{-14} metara, 10^5 puta manji od promjera atoma.



Nedostaci Rutherfordova modela atoma

- ❑ Po klasičnoj teoriji, elektron koji kruži zrači elektromagnetski val čija je frekvencija jednaka frekvenciji kruženja elektrona i, naravno, pri tome gubi energiju te se u spiralnoj putanji približava jezgri.
- ❑ Kako se približava jezgri elektronu se smanjuje polumjer putanje, a povećava frekvencija pa bi atom zračio kontinuirani spektar frekvencija.
- ❑ Po klasičnoj fizici atom je nestabilan i emitira kontinuirani spektar što je sasvim suprotno od eksperimentalno utvrđene stabilnosti atoma i linijskog spektra koje zrače atomi.



Bohrovi postulati i model atoma - 1913

- ❑ Elektron se kreće oko atomske jezgre u kružnim putanjama, pod djelovanjem privlačne kulonske sile, a u skladu s Newtonovim zakonima gibanja.
- ❑ Dopuštene su samo one kružne staze za koje moment količine gibanja elektrona može biti cjelobrojni višekratnik od $h/2\pi$, tj. mora biti:

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar, \quad \text{za } n = 1, 2, 3, \dots$$

- ❑ Gibajući se dopuštenom putanjom (stacionarno stanje), elektron ne zrači energiju.
- ❑ Sve dok je elektron vezan u atomu, može primiti samo iznose energije koji su jednaki razlici energija između dva stacionarna stanja.
- ❑ Elektron spontano prelazi iz stanja više energije (pobuđenog stanja) u stanje niže energije i pri tome emitira kvant svjetlosti, energije:

$$h\nu = E_n - E_m$$

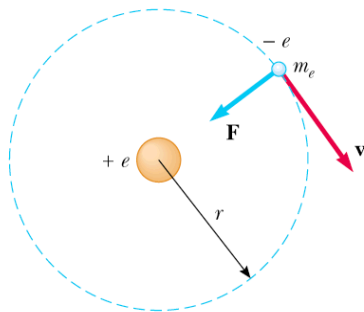
Vodikov atom – Energijska stanja

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad \text{i} \quad L = mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

$$r = n^2 \frac{h^2 \epsilon_0}{m \pi e^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

n – glavni kvantni broj

$$E = E_k + E_p = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r} + \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right)$$



$$n = 1 \quad r_1 = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$r_n = n^2 r_1$$

Polumjer atoma vodika –
Bohrov radijus

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}, \text{ za } n = 1, 2, 3, \dots$$

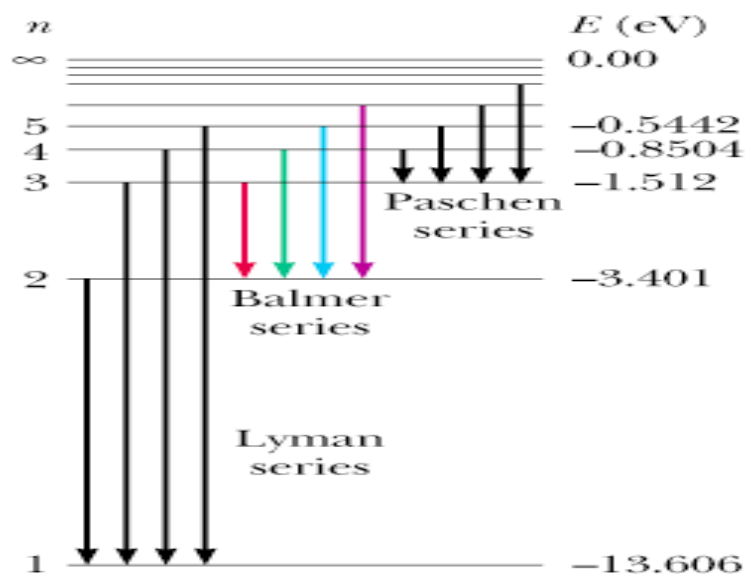
m – masa elektorna

$$E_\infty = 0 \text{ – slobodni elektron}$$

Energija ionizacije – energija koju treba utrošiti da se elektron koji se nalazi u stabilnom (osnovnom) stanju otrgne iz atoma tj. iz kvantnog stanja n dovede u stanje $n=\infty$ kad mu je energija $E=0$:

$$E_\infty - E_1 = 0 - (-13,6 \text{ eV}) = 13,6 \text{ eV}$$

Objašnjenje linijskih spektara vodika



- Zadivljujuće je da se iz Bohrovog modela dobiju teorijski izrazi koji su identični empirijskim izrazima za linijske spektre.

- Vrijednost Rydbergove konstante u empirijskim formulama za linijske spektre se jednostavno može izračunati temeljem Bohrovog modela:

- Teorijska vrijednost Rydbergove konstante u izvrsnom je slaganju s njenom empirijskom vrijednošću.

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{c} \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{1}{h} \frac{me^4}{8c\epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$



$$R_H = \frac{me^4}{8h^3\epsilon_0^2 c} = 1,1 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Empirijska relacija

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = m+1, m+2, m+3, \dots$$

$$R = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad \text{Rydbergova konstanta}$$

Bohrov model – atomi slični atomu vodika

- Bohrov model uspješno opisuje i spektre atoma sličnih atomu vodika tj. onih atoma koji su ionizirani tako da u njima kruži samo jedan elektron npr. He^+ , Li^{++} , Be^{+++}
- U ovako ioniziranim atomima naboj jezgre je $+Ze$, a oko jezgre kruži jedan elektron, te se lako nalaze izrazi za polumjere i energije stacionarnih stanja:

$$r_n = n^2 \frac{h^2 \epsilon_0}{m \pi Z e^2} = n^2 \frac{r_1}{Z}$$

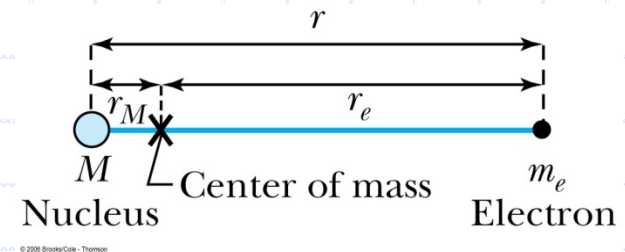
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2}, \text{ za } n = 1, 2, 3, \dots$$

- U dosadašnjim razmatranjima nije uračunata konačna masa jezgre, izraz za Rydbergovu konstantu je dobiven uz pretpostavku da je masa jezgre beskonačna R_∞ .

- Strogim računom dobije se: M-masa jezgre.

$$R_H = \frac{m e^4}{8 h^3 \epsilon_0^2 c} \frac{M}{m + M} = R_\infty \frac{M}{m + M}$$

- Kako je masa protona ($m_p = 1,67 \times 10^{-27}$ kg) znatno veća od mase elektrona ($m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg) popravka Rydbergove konstante je neznatna



Objašnjenje priče s početka predavanja

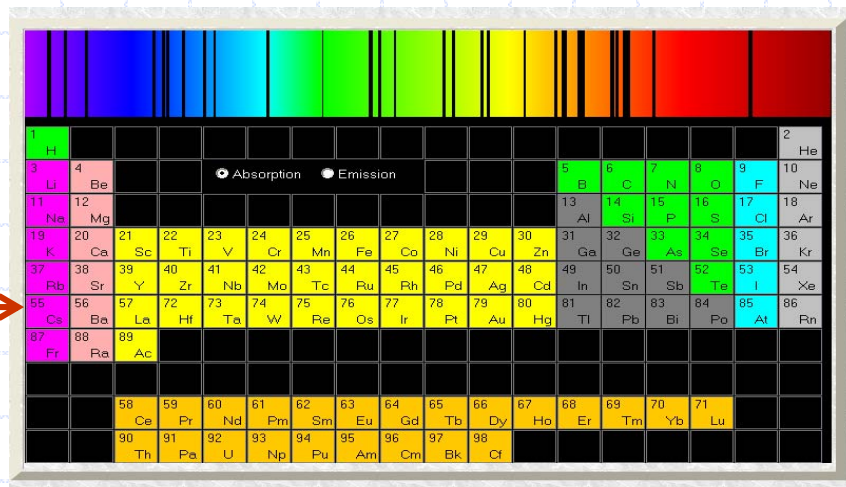
- Ova snimka Helix maglice (spiralnog oblika) je načinjena kao kompozicija ultra-oštrih slika snimljenih NASA-inim Hubble Space Teleskopom, kombiniranih sa slikama 0.9-metarskog teleskopa Kitt Peak National Observatorije, pokraj Tucsona, Arizona, SAD.
- Udaljena 650 svjetlosnih godina, Helix maglica je jedna od Zemlji najbližih planetarnih maglica.
- Planetarna maglica je usijani plin koji okružuje umiruću zvijezdu, vrlo sličnu Suncu.



Preuzeto sa: <http://hubblesite.org/newscenter/archive/2003/11/image/a>

Pitanje: Kako je moguće odrediti kemijski sastav zvijezda?

Kemijski sastav zvijezda je moguće odrediti spektralnom analizom svjetlosti koja dolazi s tih zvijezda



Energija ionizacije atoma Li^{2+}

Odredite energiju ionizacije atoma Li^{2+} ?

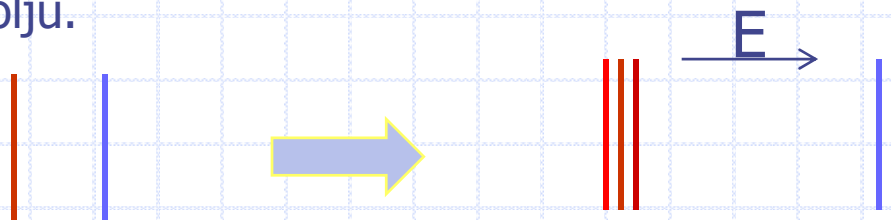
Li^{2+} ($Z=3$) ima 3 protona u jezgri i jedan elektron koji kruži oko jezgre.

$$E_n = -(13.6 \text{ eV}) \frac{Z^2}{n^2} = -(13.6 \text{ eV}) \frac{3^2}{1^2} = -122 \text{ eV}$$

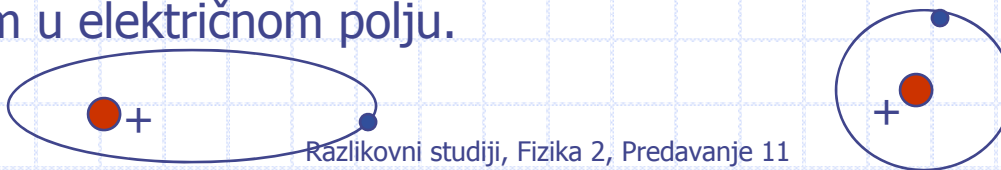
Energija ionizacije = +122 eV

Eliptični model atoma

- **Starkov efekt** - Mjerenjem linijskih spektara u jakom električnom polju (10^7 V/m), uočava se cijepanje spektralnih linija (Starkov efekt), što ukazuje na finiju strukturu energijskih razina koje se očituju kad se atom nalazi u električnom polju.



- Starkov efekt se daje objasniti **eliptičnim modelom atoma** (Sommerfeld 1916), po kojem se elektroni gibaju ne samo po kružnicama već i po elipsama.
- Za isti glavni kvantni broj, n , može biti više staza.
- Svaka staza ima svoj moment količine gibanja (angularni moment) određen **orbitalnim kvantnim brojem** (l), $\vec{L} = l\hbar, l = 1, 2, 3, \dots, n$.
- Kad se elektron giba po elipsi onda električni dipolni moment, $\vec{p}_e$, atoma nije jednak nuli, te u vanjskom električnom polju doprinosi potencijalnoj energiji elektrona ($E_p = -\vec{p}_e \cdot \vec{E}$) i tako se jedna energijska razina cijepa u više bliskih energijskih razina.
- Elektron na različitim elipsama, istog kvantnog broja n , ima različite energije kad je atom u električnom polju.



Magnetski dipolni moment elektrona

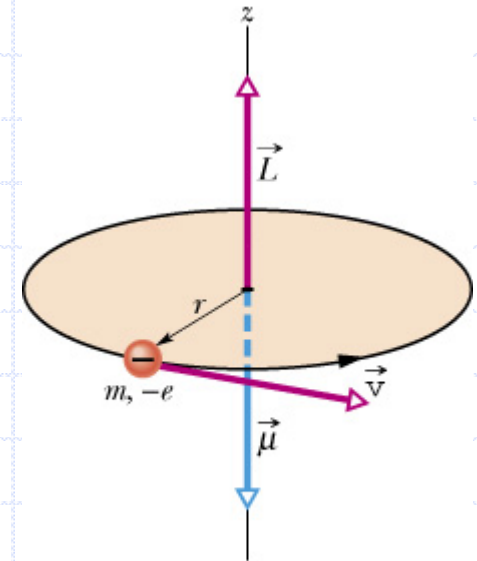
- Struja zbog kružnog gibanja elektrona:

$$i = \frac{e}{T} = \frac{e\omega}{2\pi} = \frac{ev}{2\pi r}$$

- Magnetski dipolni moment elektrona zbog kružnog gibanja.

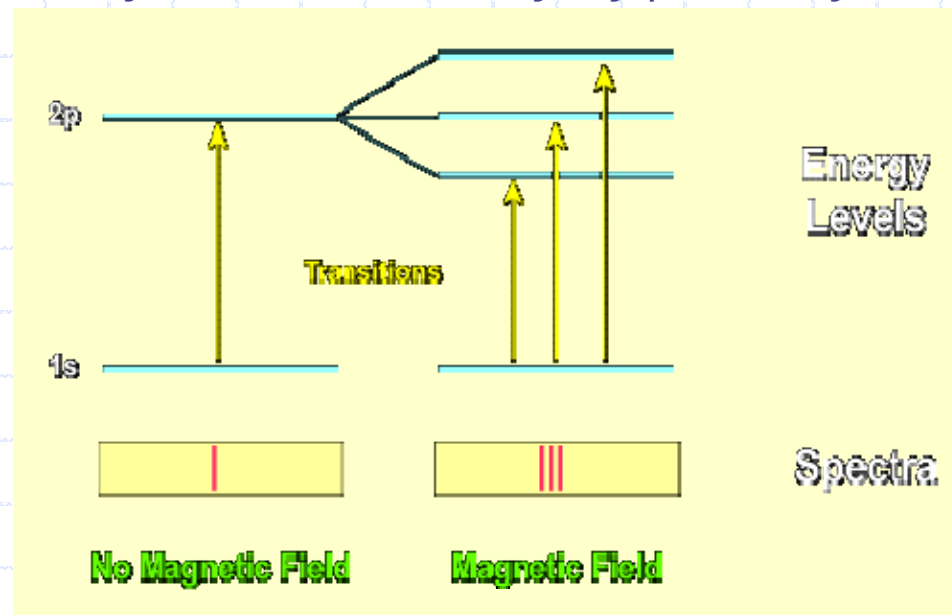
$$\mu = iS = \frac{ev}{2\pi} r^2 \pi = \frac{emvr}{2m} = \frac{e}{2m} L$$

- Magnetski dipolni moment elektrona proporcionalan je momentu količine gibanja elektrona.



Zeemanov efekt (I)

- ❑ **Zeemanov efekt** – mjerenjem linijskih spektara u magnetskom polju također se uočava cijepanje spektralnih linija, što također ukazuje na finiju strukturu energijskih razina koja se javlja samo kad se atom nađe u magnetskom polju.
- ❑ Preciznije kad se atom nalazi u vanjskom magnetskom polju stalnog iznosa i smjera tada se svaka linija cijepa u 3 linije.



- ❑ Zeemanov efekt ukazuje da atom odnosno elektron posjeduje neko svojstvo koje ostvaruje interakciju s magnetskim poljem.
- ❑ Najjednostavnije je pretpostaviti da atom posjeduje magnetski dipolni moment, tj. da svaki atom "predstavlja mali magneti"ć".

Zeemanov efekt (II)

- ❑ Pretpostavka je da svaki atom "predstavlja mali magnetič".
- ❑ Magnetski dipolni moment elektrona koji se giba po kružnici oko jezgre:

$$\vec{p}_m = -\frac{e}{2m} \vec{L} \text{ magnetski dipolni moment}$$

$$E_p = -\vec{p}_m \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m} L_z B; \text{ potencijal na enegija magnetskog dipola u magn. polju}$$

Zeemanov efekt se može objasniti samo ako se prepostavi da je projekcija momenta količine gibanja kvantizirana

$$L_z = m_l \hbar \quad m_l - \text{magnetski orbitalni kvantni broj}$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$$
$$\Delta m_l = 0, \pm 1, \Delta l = \pm 1 \quad \text{izborna pravilo}$$

Izborna pravilo: može se pokazati (povezano sa zakonom očuvanja momenta) količine gibanja) da nisu svi prijelazi mogući, već samo oni za koje je promjena orbitalnog kvantnog broja jednaka +1 ili -1.

Zeemanov efekt (III)

- Dok nema vanjskog magnetskog polja, ravnina gibanja elektrona može ležati po volji usmjerena u prostoru.
- Kad se atom nađe u magnetskom polju, ravnina gibanja elektrona, a time kut θ između smjera vektora vanjskog magnetskog polja B i angularnog momenta L , postaje kvantizirana.
- Za svaki l ima $2l+1$ vrijednosti kvantnog broja m_l

$$\cos \theta = \frac{L_z}{|L|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

Iz kvantne mehanike...

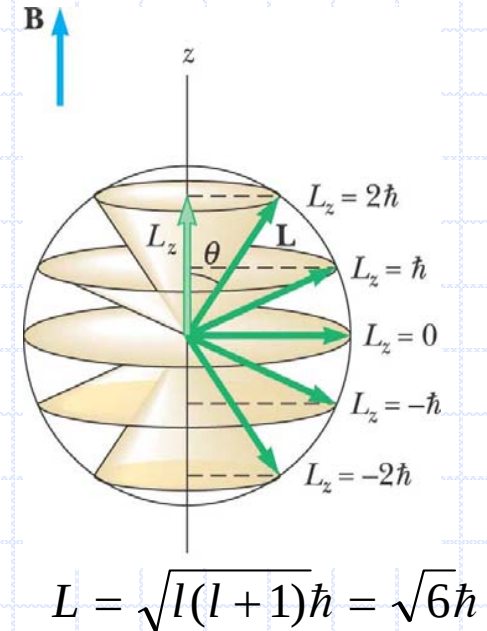
- Orbitalni dipolni moment elektrona:

$$E_p = \frac{e}{2m} L_z B = \frac{e}{2m} m_l \frac{h}{2\pi} B = m_l \frac{eh}{4\pi m} B = m_l \mu_B B$$

$$\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T} - \text{Bohrov magneton}$$

- U magnetskom polju energija elektrona u atomu vodika koji se nalazi u vanjskom magnetskom polju je:

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} + m_l \mu_B B$$



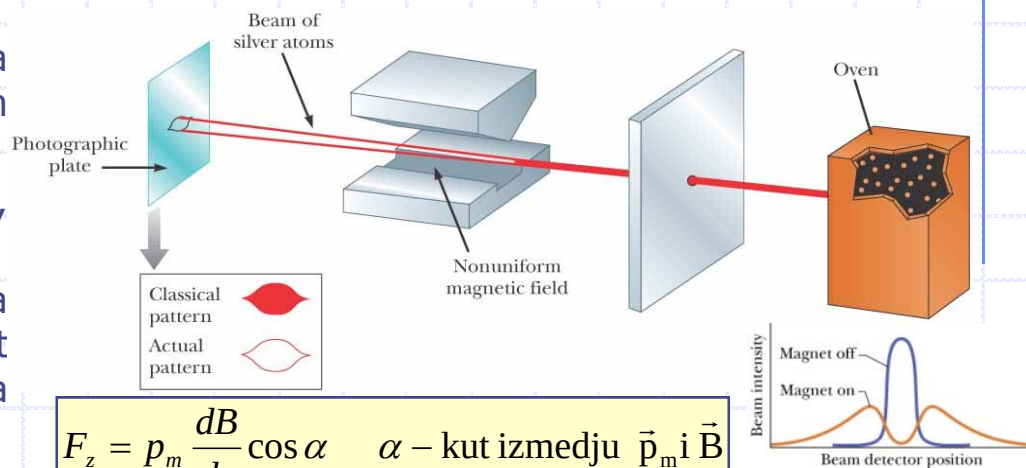
Spin elektrona, spinski kvantni brojevi, s i m_s (I)

O. Stern i W. Gerlach su 1924. uočili da se snop atoma srebra u nehomogenom magnetskom polju cijepa u dva snopa.

U nehomogenom magnetskom polju, $B=B(z)$, na magnetski dipol djeluje sila.

Dijeljenje snopa u dva simetrična snopa ukazuje da magnetski dipolni moment elektrona ima dvije projekcije duž smjera vanjskog magnetskog polja.

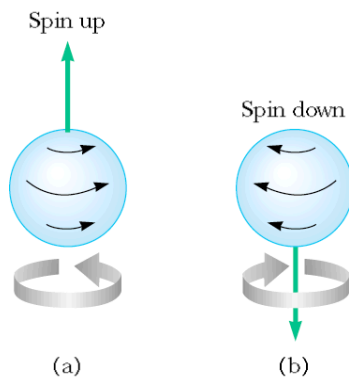
S. Goudsmith i G. Uhlenbeck protumačili su to pretpostavkom da se elektroni ne gibaju samo oko jezgre već i oko svoje osi, tj. da imaju vlastiti moment količine gibanja kojeg zovemo **spin**.



$$F_z = p_m \frac{dB}{dz} \cos \alpha \quad \alpha - \text{kut između } \vec{p}_m \text{ i } \vec{B}$$

$$\mu_{\text{spin}} = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S}$$

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \quad s = \frac{1}{2}$$

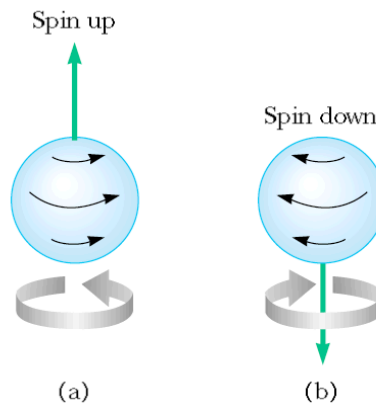


$$S = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}\hbar = \sqrt{\frac{3}{4}}\hbar$$

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

Spin elektrona, spinski kvantni brojevi, s i m_s (II)

- Klasična predodžba da se elektron vrti oko svoje vlastite osi je u biti neprecizna/netočna, ali je nedvojbeno da elektron posjeduje vlastiti angularni moment.
- **P. Dirac** je pokazao da spinski kvantni broj proizlazi iz specijalne teorije relativnosti, te da je spin fundamentalno svojstvo elektrona koje se nikad ne mijenja.
- **Vrijednost spina se koristi za klasifikaciju čestica:**
Fermioni su čestice čiji je spin $s=1/2$, a
Bozoni su čestice čiji je spin $s=0,1,2$ (cjelobrojan).



Princip korespondencije

- ❑ Klasična fizika je specijalni slučaj kvantne fizike.
- ❑ Princip korespondencije kaže da za velike iznose kvantnih brojeva ($n \rightarrow \infty$), kvantna fizika prelazi u klasičnu fiziku.
- ❑ Drugim riječima, razlika u energiji između dvije susjedne energijske razine, $(n, n+1)$, za velike iznose kvantnih brojeve je zanemariva, te energiju možemo smatrati kontinuiranom i primijeniti klasičnu fiziku.
- ❑ U procesima u kojima se može zanemariti Planckova konstanta h , klasična fizika je dovoljno precizan opis ponašanja prirode.
- ❑ Za elektron koji kruži oko protona u atomu vodika, a čiji je kvantni broj $n > 10000$, klasično razmatranje po kojem elektron emitira elektromagnetski val čija je frekvencija jednaka frekvenciji elektrona se neznatno razlikuje od rezultata koji se dobije kvantnom mehanikom, razlika je oko 0,015 %.

Schrödingerova valna jednačina

- ❑ **Bohrova kvantna teorija (stara kvantna teorija)** ("prva aproksimacija istine") – objašnjava neke pojave, ali nema jasnog fizikalnog tumačenja zašto su putanje elektrona kvantizirane.
- ❑ Bohrova teorija nije konzistentno ni klasična ni kvantna teorija, ali vrlo je korisna za razumijevanje kvantne prirode materije preko svog zornog prikaza.
- ❑ E. Schrödinger je razmatrajući elektron kao val materije došao do jednačine:

Schrödingerova valna jednačina

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2}\right) + U\psi = E\psi$$

ψ - valna funkcija

U - potencijalna energija čestice mase m

E - ukupna energija čestice mase m

- ❑ U strogoj kvantnoj mehanici, kvantiziranost proizlazi iz rješenja Schrödingerove valne jednačine za elektron u atomu.
- ❑ Schrödingerova valna jednačina se može egzaktno riješiti samo za vodikov atom.
- ❑ Za ostale atome račun je kompliciraniji, ali počiva na istim pretpostavkama.

Kvantni brojevi (I)

- ❑ Rješavanjem Schrödingerove jednačbe dobiju se kvantni brojevi koji jednoznačno specificiraju stanje elektrona u atomu:

- ❑ ***n*-glavni kvantni broj** određuje energiju elektrona u atomu:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{mZ^2 e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \quad n = 1, \dots, \infty$$

<i>n</i>	1	2	3	4	5
ljuska	K	L	M	N	O

- ❑ ***l* - orbitalni kvantni broj** određuje moment količine gibanja:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

<i>l</i>	0	1	2	3	4	5
oznaka	s	p	d	f	g	h

- ❑ ***m_l* - magnetski kvantni broj** određuje projekciju momenta količine gibanja:

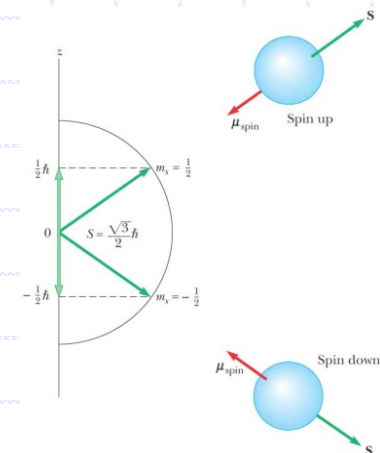
$$L_z = m_l \hbar$$

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

- ❑ ***s* - spinski kvantni broj (za elektron *s*=1/2):**

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

$$S_z = m_s \hbar \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$



©2004 Thomson - Brooks/Cole

Kvantni brojevi (II)

1. Glavni kvantni broj n

- Određuje energiju elektrona u atomu; npr. za H
- Svi elektroni istog kvantnog broja n pripadaju istoj ljuski:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$$

Kvantni broj n	1	2	3	4	5	...
Oznaka ljuske	K	L	M	N	O	...

2. Orbitalni kvantni broj l

- Opisuje kvantizaciju momenta količine gibanja
- Moment količine gibanja jednak je $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$
- Gdje l može (za određeni n) poprimiti vrijednosti $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

Kvantni broj l	0	1	2	3	4	5	...
Oznaka stanja	s	p	d	f	g	h	...

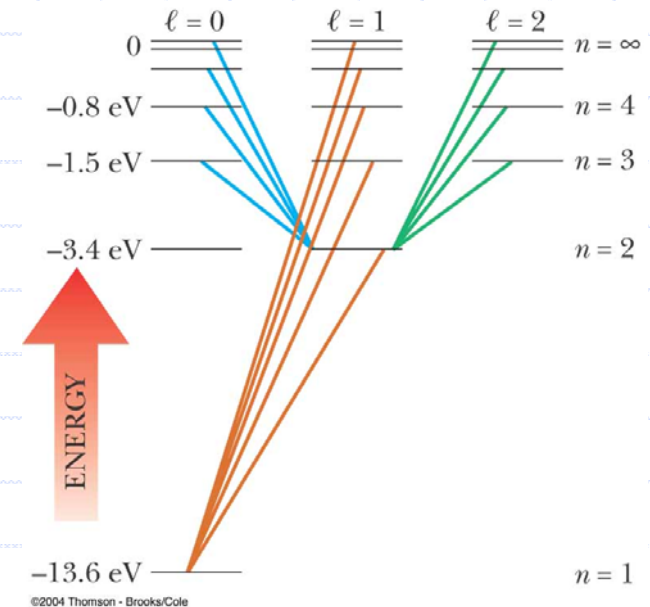
Kvantni brojevi (III)

- ❑ **Osnovno stanje** atoma je ono kad je elektron u najnižem, tj. 1s stanju; kada je atom pobuđen to znači da se elektron nalazi u jednom od ostalih stanja.
- ❑ Kada se uzmu u obzir relativistički efekti može se pokazati da energija, osim o kvantnom broju n , ovisi i o kvantnom broju l .
- ❑ Pri emisiji fotona elektron prelazi iz stanja više energije E_m u stanje niže energije E_n .
- ❑ **Zakon očuvanja energije** zahtijeva da bude ispunjen uvjet: $h\nu = E_m - E_n$.
- ❑ Može se pokazati da **zakon očuvanja količine gibanja** dozvoljava samo one prijelaze za koje je promjena orbitalnog kvantnog broja jednaka $+1$ ili -1 , tj.:

Izborna pravila:

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1$$



Kvantni brojevi (IV)

3. Magnetski kvantni broj m_l

- Opisuje kvantizaciju projekcije vektora momenta količine gibanja na smjer vanjskog magnetskog polja (L_z), $L_z = m_l \hbar$
- Za određeni l , magnetski kvantni broj može poprimiti samo $2l+1$ cjelobrojnih vrijednosti između $-l$ i $+l$, tj.

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

4. Spinski kvantni broj m_s

- Opisuje kvantizaciju vlastitog momenta količine gibanja, tj. spina (Spin je unutrašnja osobina elektrona!)
- Čestice s polucjelobrojnim spinom – fermioni (npr. elektron i proton imaju spin $1/2$)
- Čestice sa cjelobrojnim spinom – bozoni (npr. foton ima spin 1)
- Iznos vektora spina elektrona je: $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \hbar\sqrt{3}/2$
- Komponenta vektora spina u zadanom smjeru je kvantizirana spinskim magnetskim kvantnim brojem m_s (spinski kvantni broj) koji može poprimiti samo dvije vrijednosti:
- Spin elektrona direktno proizlazi iz relativističke kvantne mehanike (Diracova jednačba)

$$S_z = m_s \hbar$$

$$m_s = \frac{1}{2} \quad i \quad m_s = -\frac{1}{2}$$

➤ Ukupni moment količine gibanja atoma:

$$\vec{J} = \vec{L}_{uk} + \vec{S}_{uk} = \sum_i \vec{L}_i + \sum_i \vec{S}_i; \quad J = \sqrt{j(j+1)}\hbar; \quad J_z = m_j \hbar$$

Paulijevo načelo

- ❑ Četiri kvantna broja n, l, m_l, m_s određuju pojedino stacionarno stanje atoma.
- ❑ U složenijim atomima gibanja elektrona (energije) su u stanovitoj mjeri modificirane zbog uzajamnog djelovanja elektrona, ali to međudjelovanje ne stvara nova stacionarna stanja niti razara ona koja se dobiju teorijskim razmatranjem samo sile između elektrona i jezgre uz zanemarenje sile između elektrona.
- ❑ **W. Pauli, 1925., uvodi jednostavnu pretpostavku: Dva elektrona u atomu ne mogu imati sva četiri kvantna broja jednaka (Paulijev princip isključenja).**
- ❑ Paulijevo načelo, uz razumijevanje kvantnih brojeva koji jednoznačno definiraju stanje svakog pojedinog elektrona u atomu, objašnjava periodni sustav elemenata.

Kvantni brojevi - sažetak

<i>Kvantni broj</i>	<i>Simbol</i>	<i>Dozvoljene vrijednosti</i>	<i>Povezan s</i>
Glavni	n	1, 2, 3, ...	Udaljenost od jezgre (energija)
Orbitalni	l	0, 1, 2, ..., (n-1)	Moment količine gibanja
Magnetski	m_l	0, ± 1 , ± 2 , ..., $\pm l$	Komponenta momenta količine gibanja
Spinski	m_s	$\pm 1/2$	Komponenta spina

- ❑ Sva stanja s istom vrijednošću glavnog kvantnog broja **n** formiraju **ljusku**. U jednoj ljuski ima **$2n^2$** stanja.
- ❑ Sva stanja s istom vrijednošću **n** i **l** formiraju **podljusku**. U jednoj podljuski ima **$2(2l+1)$** stanja.
- **Paulijev princip:** dva elektrona u atomu ne mogu imati sva četiri kvantna broja jednaka.

Dimitri Ivanović Mendeljev (1834-1907)



Između 1868-1870 piše knjigu iz opće kemije u kojoj je definirao metodu klasificiranja elemenata temeljem njihovih svojstava i masa.

“I began to look about and write down the elements with their atomic weights and typical properties, analogous elements and like atomic weights on separate cards, and this soon convinced me that the properties of elements are in periodic dependence upon their atomic weights.”

--Mendeleev, Principles of Chemistry, 1905, Vol. II

PERIODIC SYSTEM OF THE ELEMENTS IN GROUPS AND SERIES.										
Series	GROUPS OF ELEMENTS									
	0	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	
1	—	Hydrogen H 1.008	—	—	—	—	—	—	—	
2	Helium He 4.0	Lithium Li 7.03	Beryllium Be 9.1	Boron B 11.0	Carbon C 12.0	Nitrogen N 14.04	Oxygen O 16.00	Fluorine F 19.0	—	
3	Neon Ne 19.9	Sodium Na 23.05	Magnesium Mg 24.3	Aluminum Al 27.0	Silicon Si 28.4	Phosphorus P 31.0	Sulphur S 32.06	Chlorine Cl 35.46	—	
4	Argon Ar 38	Potassium K 39.1	Calcium Ca 40.1	Scandium Sc 44.1	Titanium Ti 48.1	Vanadium V 51.4	Chromium Cr 52.1	Manganese Mn 55.0	Iron Fe 55.9	Cobalt Co 59
5	—	Copper Cu 63.6	Zinc Zn 65.4	Gallium Ga 70.0	Germanium Ge 72.3	Arsenic As 75	Selenium Se 79	Bromine Br 79.95	Nickel Ni 59	Cu
6	Krypton Kr 81.8	Rubidium Rb 85.4	Strontium Sr 87.6	Yttrium Y 89.0	Zirconium Zr 90.6	Niobium Nb 94.0	Molybdenum Mo 96.0	—	Ruthenium Ru 101.7	Rhodium Rh 103
7	—	Silver Ag 107.9	Cadmium Cd 112.4	Indium In 114.0	Tin Sn 119.0	Antimony Sb 120.0	Tellurium Te 127	Iodine I 127	Palladium Pd 106.5	Ag
8	Xenon Xe 128	Cesium Cs 132.9	Barium Ba 137.4	Lanthanum La 139	Cerium Ce 140	—	—	—	—	—
9	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
10	—	—	—	Ytterbium Yb 173	—	Tantalum Ta 183	Tungsten W 184	—	Osmium Os 191	Iridium Ir 193
11	—	Gold Au 197.2	Mercury Hg 200.0	Thallium Tl 204.1	Lead Pb 206.9	Bismuth Bi 208	—	—	Platinum Pt 194.9	Au
12	—	—	Radium Ra 224	Thorium Th 232	—	Uranium U 239	—	—	—	—
HIGHER SALINE OXIDES										
R R ₂ O RO R ₂ O ₃ RO ₂ R ₂ O ₅ RO ₃ R ₂ O ₇ RO ₄										
HIGHER GASEOUS HYDROGEN COMPOUNDS										
RH ₄ RH ₃ RH ₂ RH										

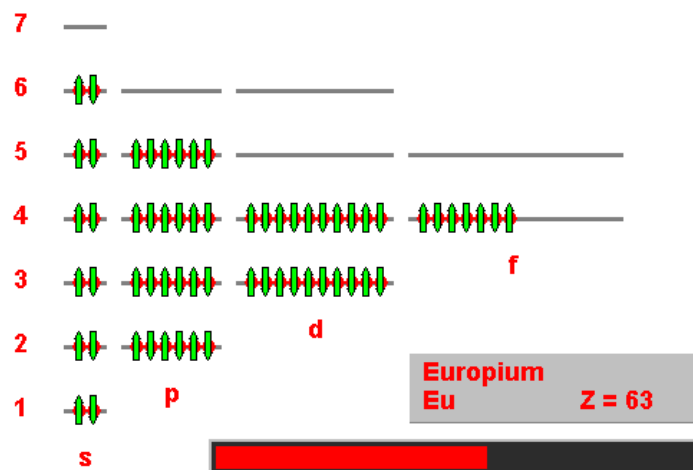
Izgradnja periodnog sustava elemenata

- **Paulijev princip isključenja (1925):** Ne mogu u atomu dva elektrona imati sva četiri kvantna broja sita.
- <http://lectureonline.cl.msu.edu/~mmp/period/electron.htm>



java applet

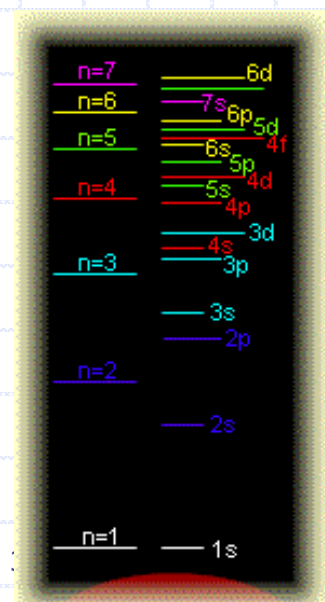
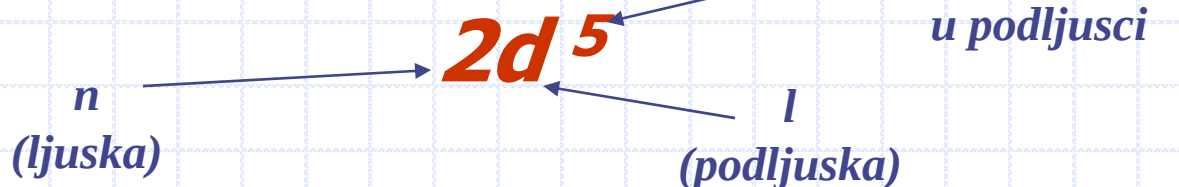
Applet: Electron Configurations



Maksimalni broj elektrona u pojedinoj ljusci

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

➤ Elektronsku konfiguraciju označavamo s:



The diagram shows a portion of the periodic table with the following elements and their atomic numbers and atomic weights:

Element	Atomic Number	Atomic Weight
H	1	1.0094
Li	3	6.941
Na	11	22.990
K	19	39.098

The diagram is labeled with "s-block" and "p-block".

1 s-block																		Non-Metals										s-block 18																			
1 New Designation																												VIII A																			
1A Original Designation																																															
1	1	H	2	He															2	He																											
	1.0094			4.00260															4.00260																												
s-block																		p-block																													
																		Atomic #																													
																		Symbol																													
																		Atomic Mass																													
3	Li	4	Be	d-block										5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne																						
6.941	9.0122											10.81	12.011	14.007	15.999	18.998	20.179																														
11	Na	12	Mg	Transition Metals										13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar																						
22.990	24.305											26.982	28.086	30.974	32.06	35.453	39.948																														
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												
39.098	40.08	44.956	47.88	50.942	51.996	54.938	55.847	58.933	58.69	63.546	65.39	69.72	72.59	74.922	78.96	79.904	83.80																														
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												
85.468	87.62	88.906	91.224	92.906	95.94	(98)	101.07	102.91	106.42	107.87	112.41	114.82	118.71	121.75	127.60	126.91	131.29																														
55	Cs	56	Ba	57	to 71	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												
132.91	137.33				178.49	180.95	183.85	186.21	190.2	192.22	195.08	196.97	200.59	204.38	207.2	208.98	(209)	(210)	(222)																												
87	Fr	88	Ra	89	to 103	104	Unq	105	Unp	106	Unh	107	Uns	108	Uno	109	Une	110	Uun	(Mass Numbers in Parentheses are from the most stable of common isotopes.)																											
(223)	226.03				(261)	(262)	(263)	(262)	(265)	(266)	(267)																																				
Metals																		Phases																													
																		Solid																													
																		Liquid																													
																		Gas																													
Rare Earth Elements																		f-block																													
Lanthanide Series																		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
																		138.91	140.12	140.91	144.24	(145)	150.36	151.96	157.25	158.93	162.50	164.93	167.26	168.93	173.04	174.97															
Actinide Series																		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
																		227.03	232.04	231.04	238.03	237.05	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(258)	(259)	(260)															

Iscrpne informacije o svakom elementu na:

<http://www.webelements.com/> <http://www.ktf-split.hr/periodni/index.html>

Pitanja za provjeru znanja

- ❑ **Navedite Bohrove postulate.**
- ❑ **Koji kvantni brojevi jednoznačno određuju stanje elektrona u atomu?**
- ❑ **Kako glasi Paulijev princip isključenja, ilustrirajte ga na primjeru atoma helija ($Z=2$) i litija ($Z=3$)?**
- ❑ Navedite Bohrove postulate i iz njih izvedite izraze za polumjere i energije stacionarnih stanja vodikova atoma.
- ❑ Objasnite linijske spektre vodikova atoma: navedite eksperimentalno dobivene izraze za spektralne linije i kako su ti izrazi objašnjeni pomoću Bohrova modela atoma?
- ❑ Objasnite princip korespondencije klasične i kvantne fizike.