

Atomteori

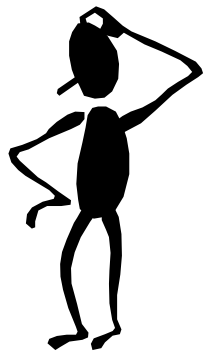
Sannolikhet och osäkerhet...

Chang, kapitel 7.5 – 7.9



Chance favours the prepared mind.





När koppar bombarderas med högenergielektroner så genereras röntgenstrålning. Beräkna fotonernas energi om våglängden är 0,154 nm.

$$E = h \times \nu$$

$$E = h \times c / \lambda$$

$$E = 6.63 \times 10^{-34} \text{ (J}\cdot\text{s)} \times 3.00 \times 10^8 \text{ (m/s)} / 0,154 \times 10^{-9} \text{ (m)}$$

$$E = 1,29 \times 10^{-15} \text{ J}$$



Den fotoelektriska effekten

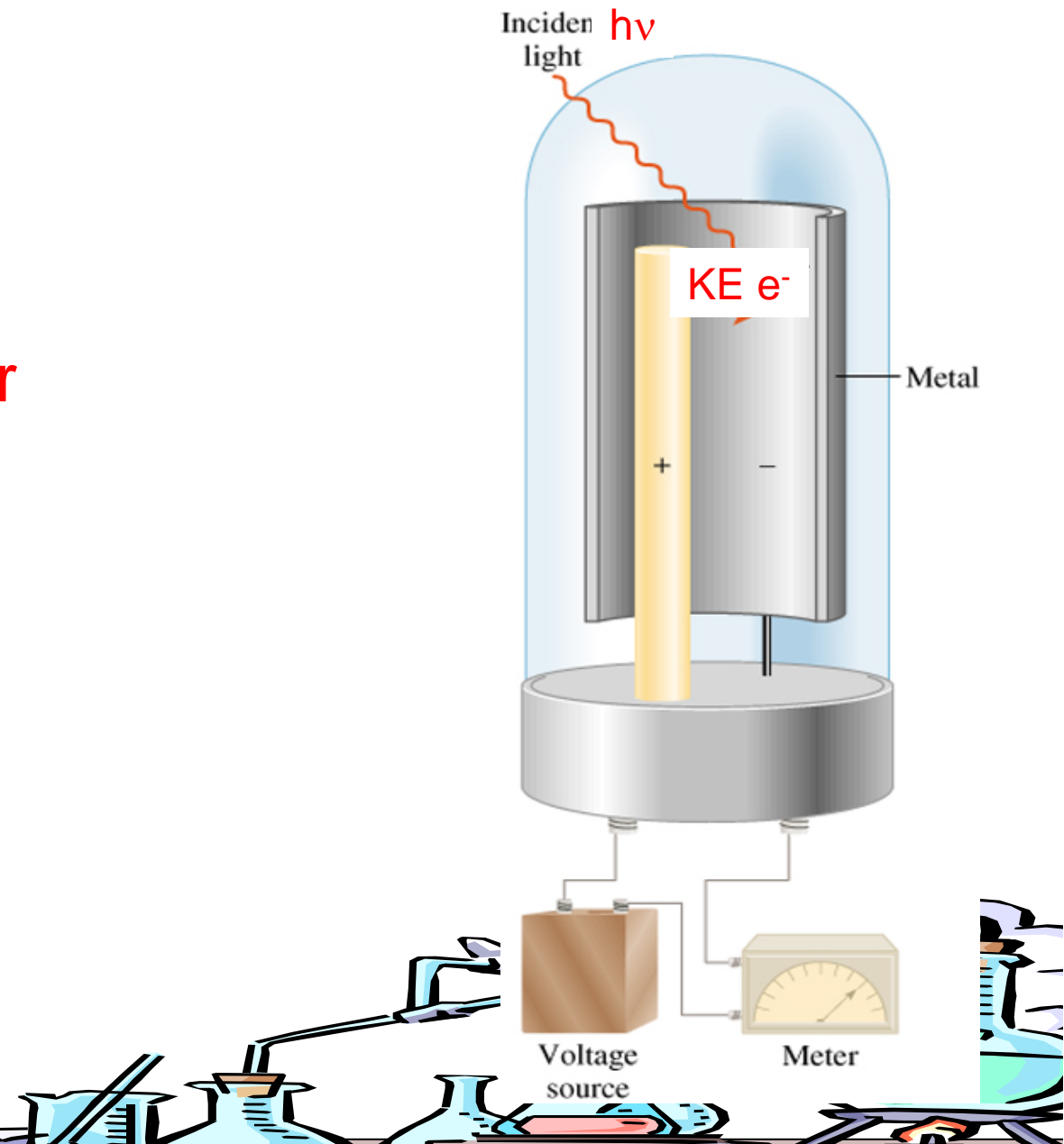
Ljus har både:

1. vågegenskaper
2. partikelegenskaper

En foton är en ljuspartikel

$$h\nu = KE + BE$$

$$KE = h\nu - BE$$



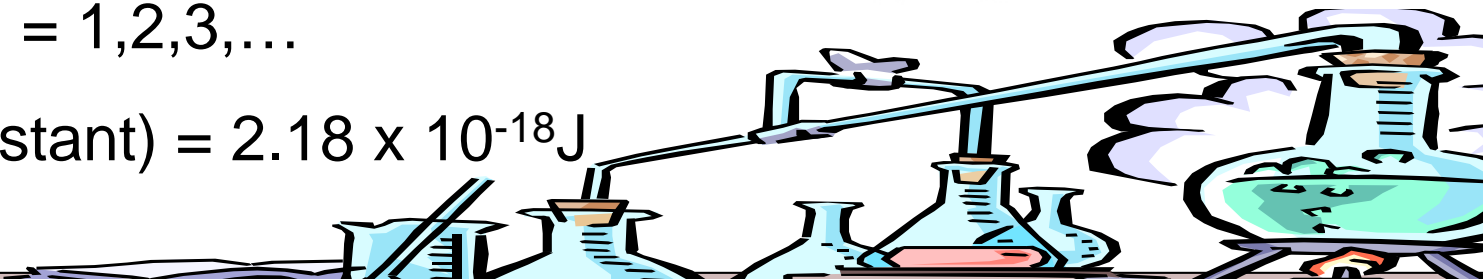
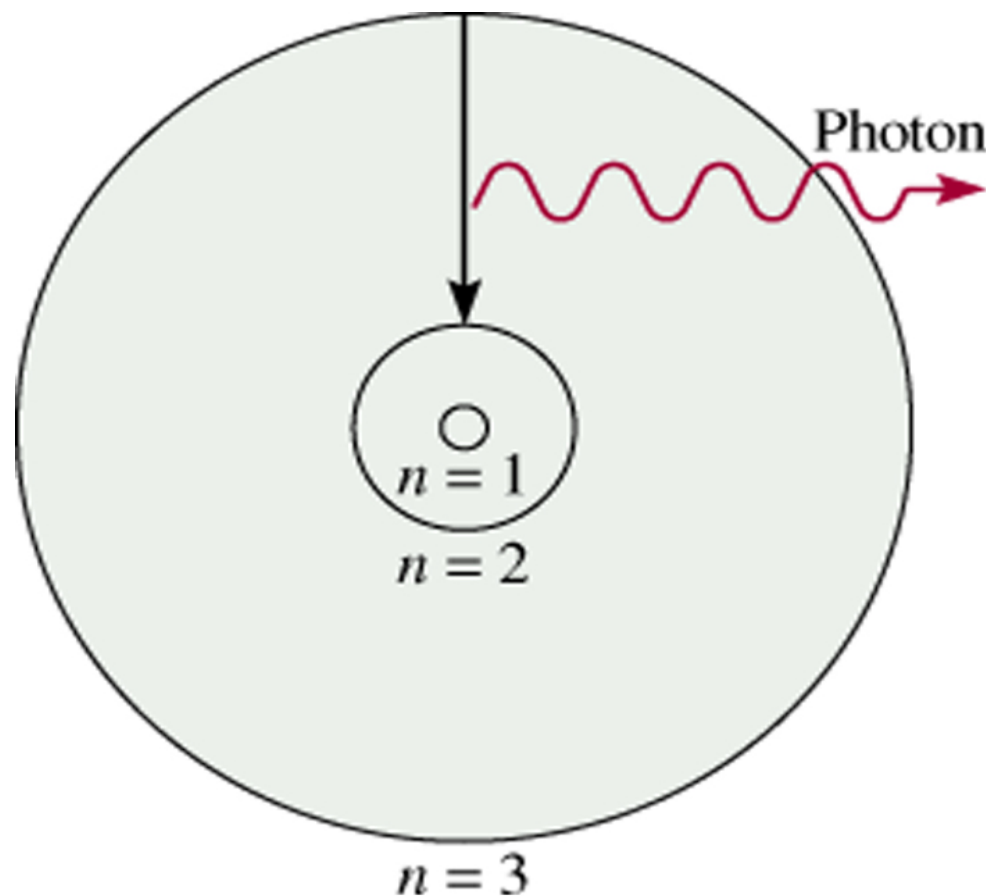
Bohrs atommodell (1913)

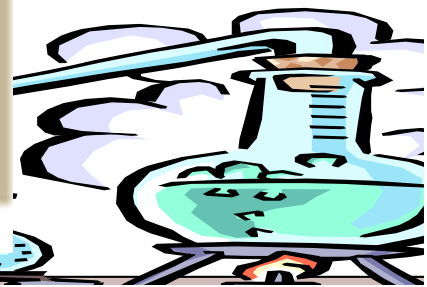
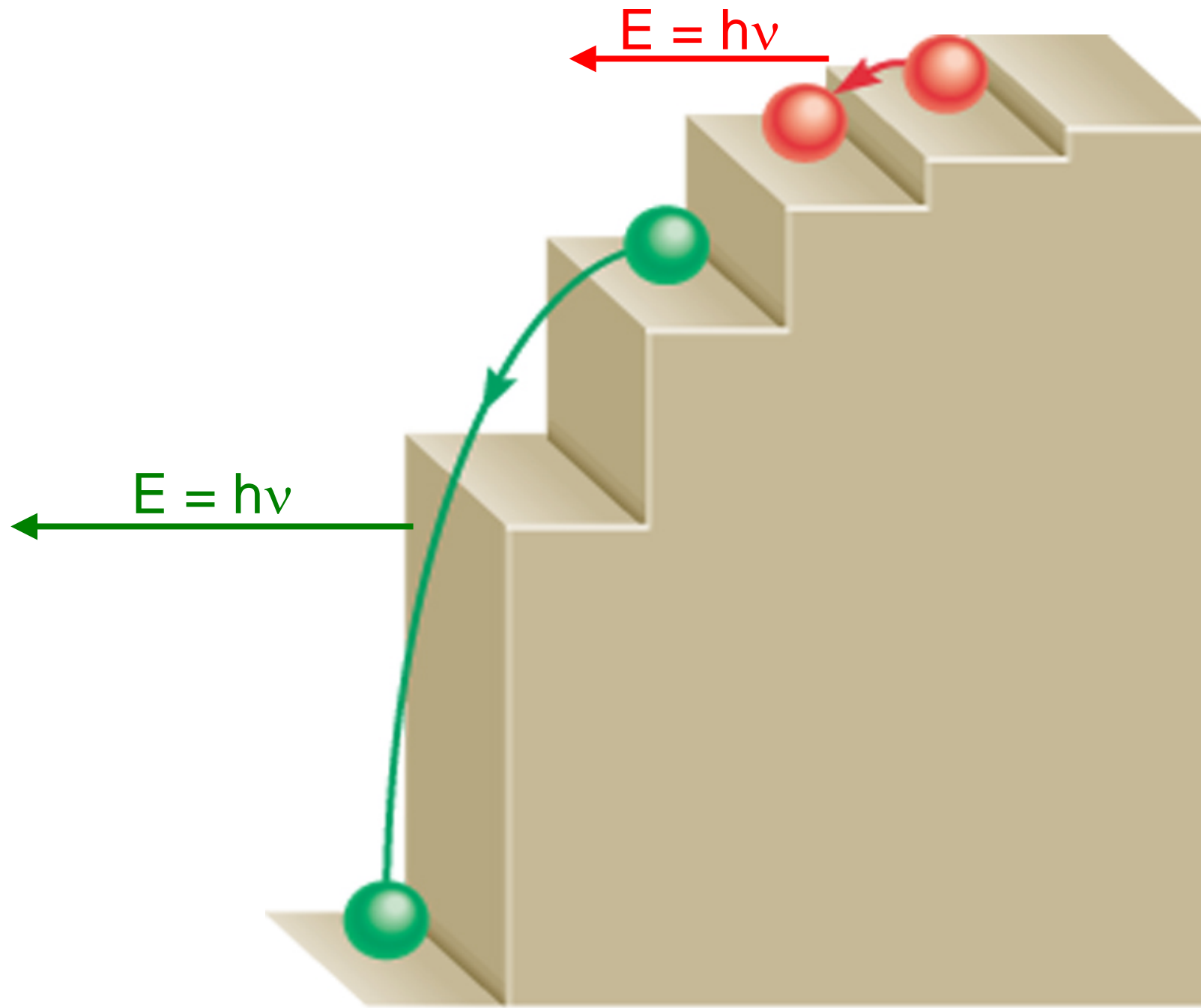
1. Elektroner kan endast ha kvantiserade energinivåer
2. Ljus utstrålas då elektroner flyttar från en högre energinivå till en lägre

$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

n (huvudkvantalet) = 1,2,3,...

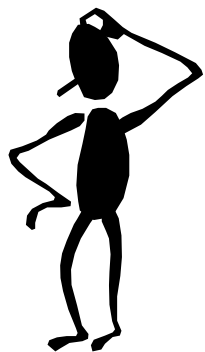
R_H (Rydbergs konstant) = $2.18 \times 10^{-18} \text{ J}$





Elektronens dubbelnatur

"de Broglie's postulat"



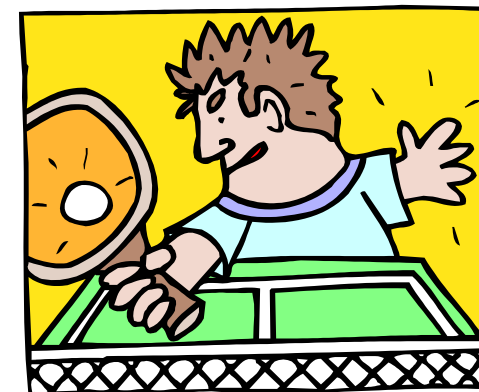
Vilken våglängd i nm har en bordtennisboll som väger 2,5 g och har en fart på 15,6 m/s?

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

h i J·s m i kg v i (m/s)

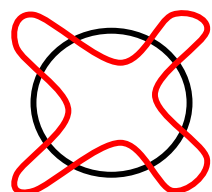
$$\lambda = 6.63 \times 10^{-34} / (2.5 \times 10^{-3} \times 15.6)$$

$$\lambda = 1.7 \times 10^{-32} \text{ m} = 1.7 \times 10^{-23} \text{ nm}$$

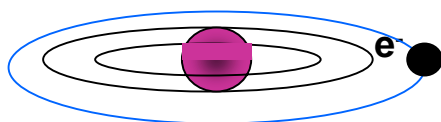


Elektronens dubbelnatur

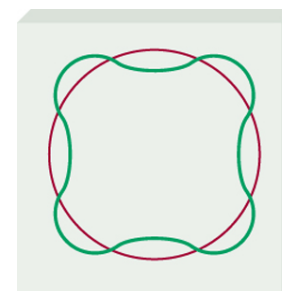
- Om ljus kan uppträda som en ström av partiklar (fotoner), kan partiklar i så fall ha vågegenskaper?



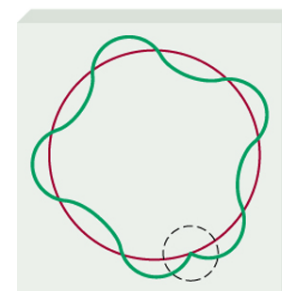
$n = 4$



$$2\pi r = n\lambda$$



(a)

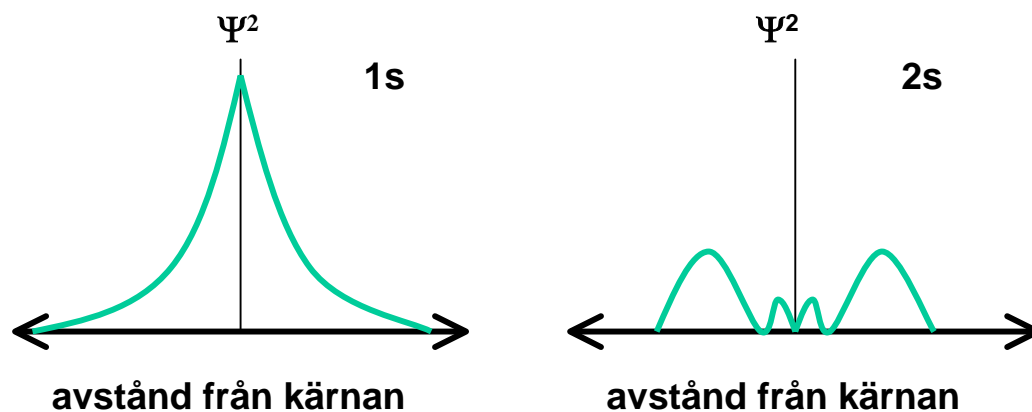


(b)



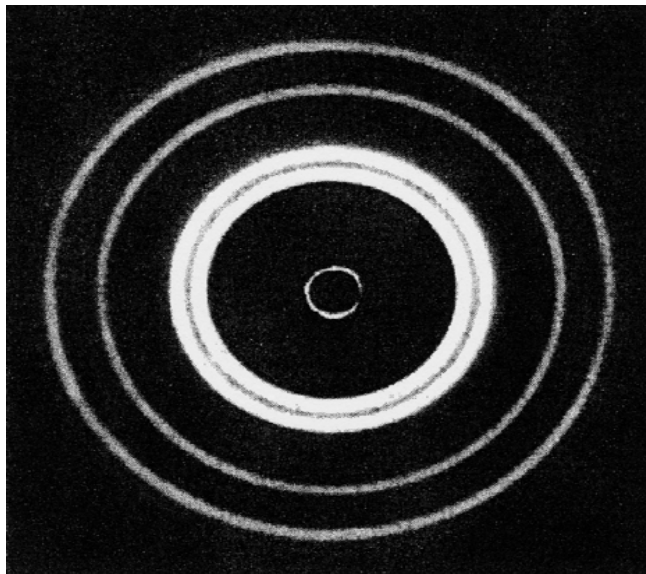
Schrödinger och Heisenberg

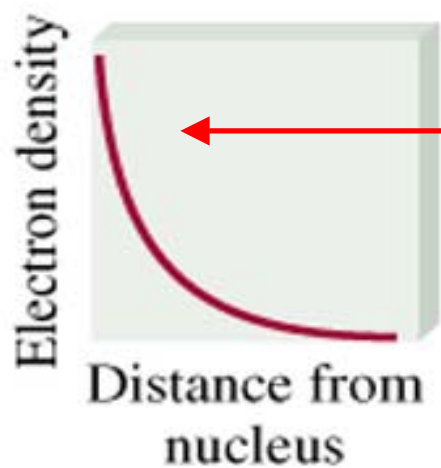
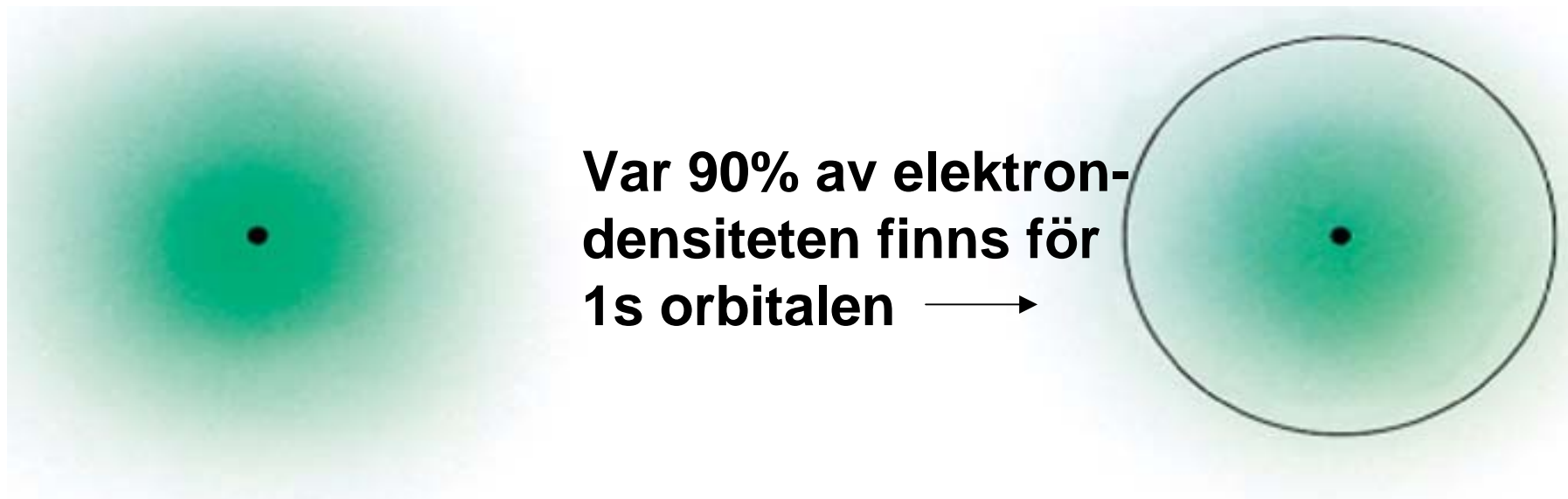
- Ψ beskriver elektronens 3-dimensionella vågfunktion.
- Ψ^2 beskriver var intensiteten är som störst, det vill säga var sannolikheten att finna elektronen är som störst.



Schrödingers vågekvation (1926)

Schrödingers vågekvation kan endast lösas exakt för väteatomen. För att kunna använda ekvationen för multielektronsystem så måste ekvation förenklas.





(a)

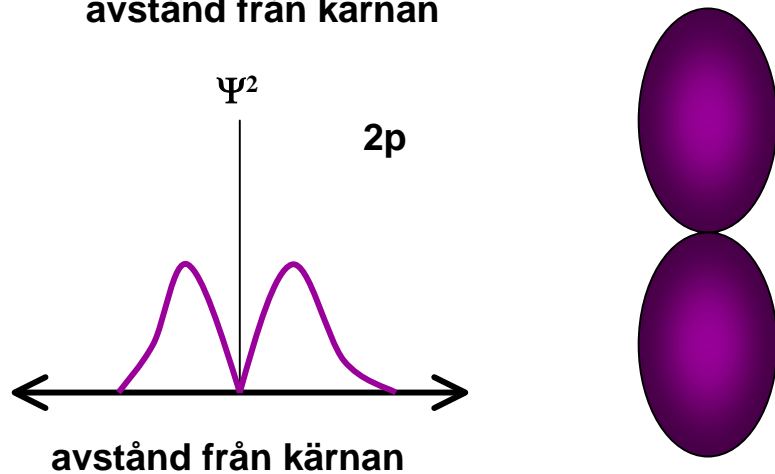
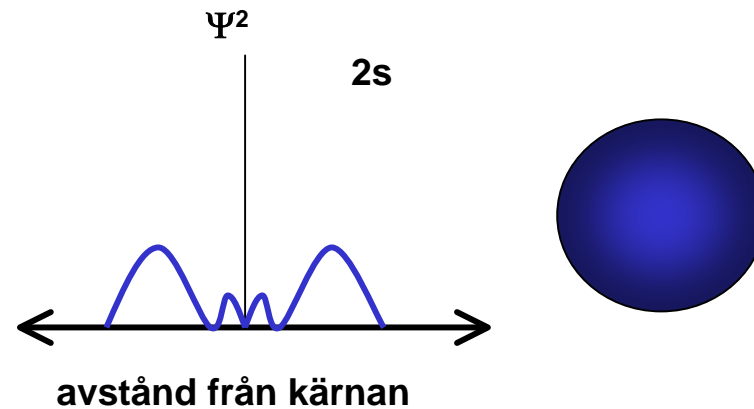
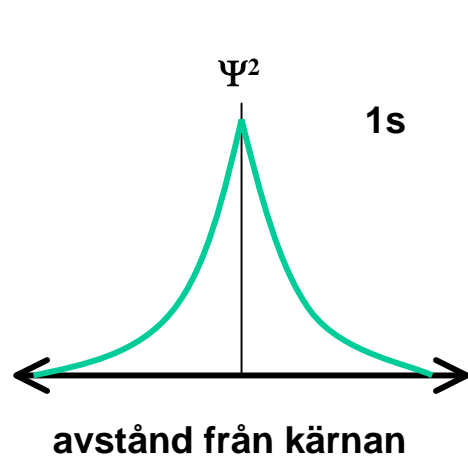
Elektrondensiteten för
1s orbitalen minskar
snabbt med avståndet till
kärnan

(b)



Schrödinger och Heisenberg

- Den volym som Ψ beskriver kallar vi *orbital*.

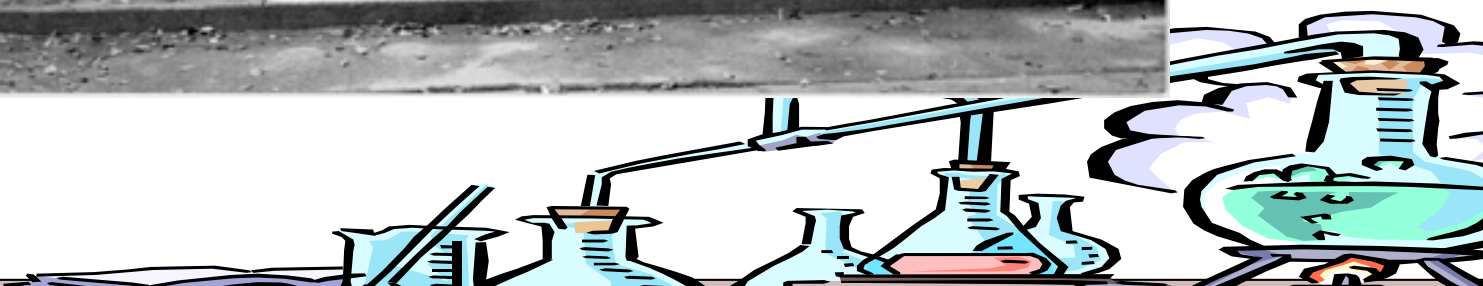
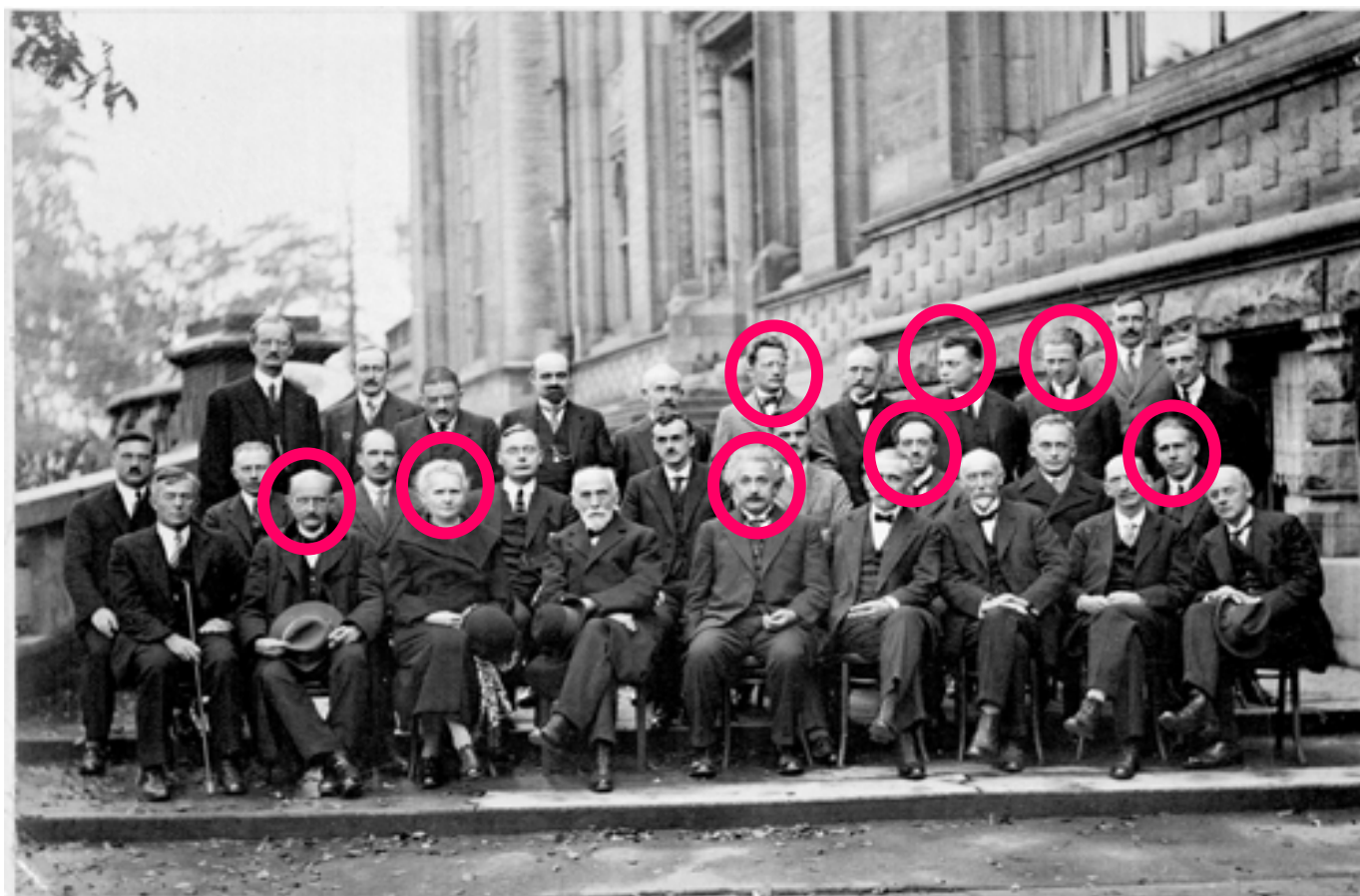


Heisenbergs osäkerhetsprincip

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$



Solvay, Bryssel 1927

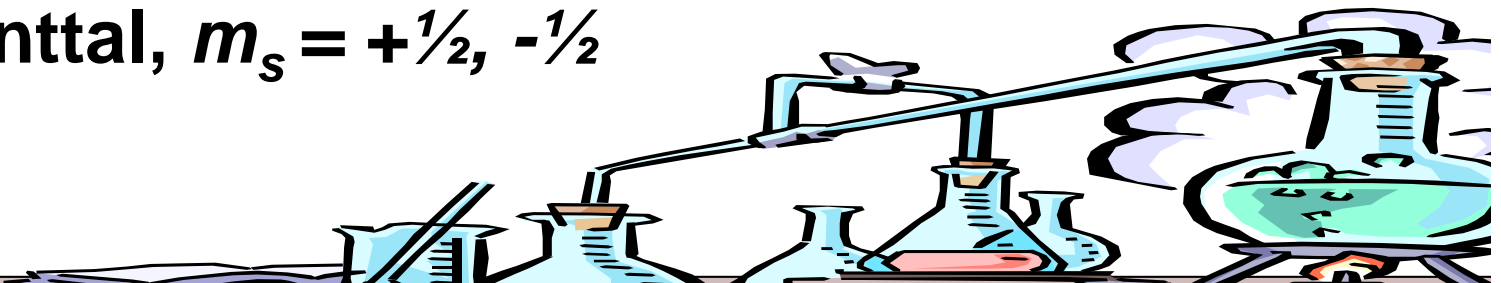


Solvay, Bryssel 1927



Kvanttal

- **Huvudkvanttalet, $n = 1, 2, 3, 4, \dots$**
 - anger vilket skal (k, l, m osv.) elektronen tillhör.
- **Bikvanttalet, $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$**
 - beskriver formen (s, p, d, f) för orbitalen, högsta bikvanttalet är $n-1$.
- **Magnetiska kvanttalet, $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$**
 - anger riktningen på orbitalen, i ett magnetfält.
- **Spinnkvanttal, $m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$**



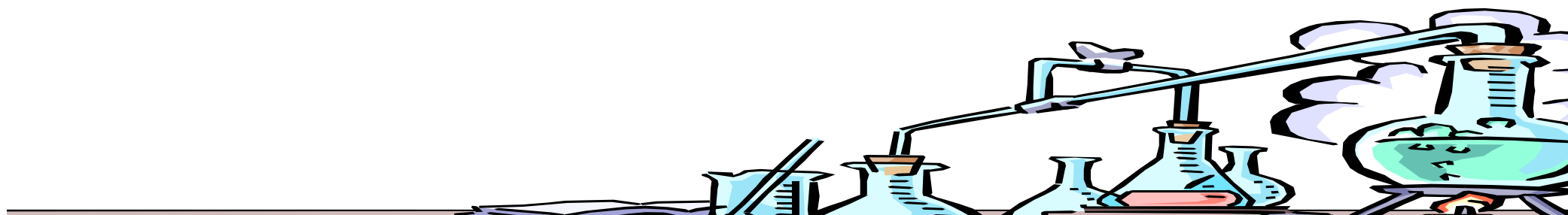
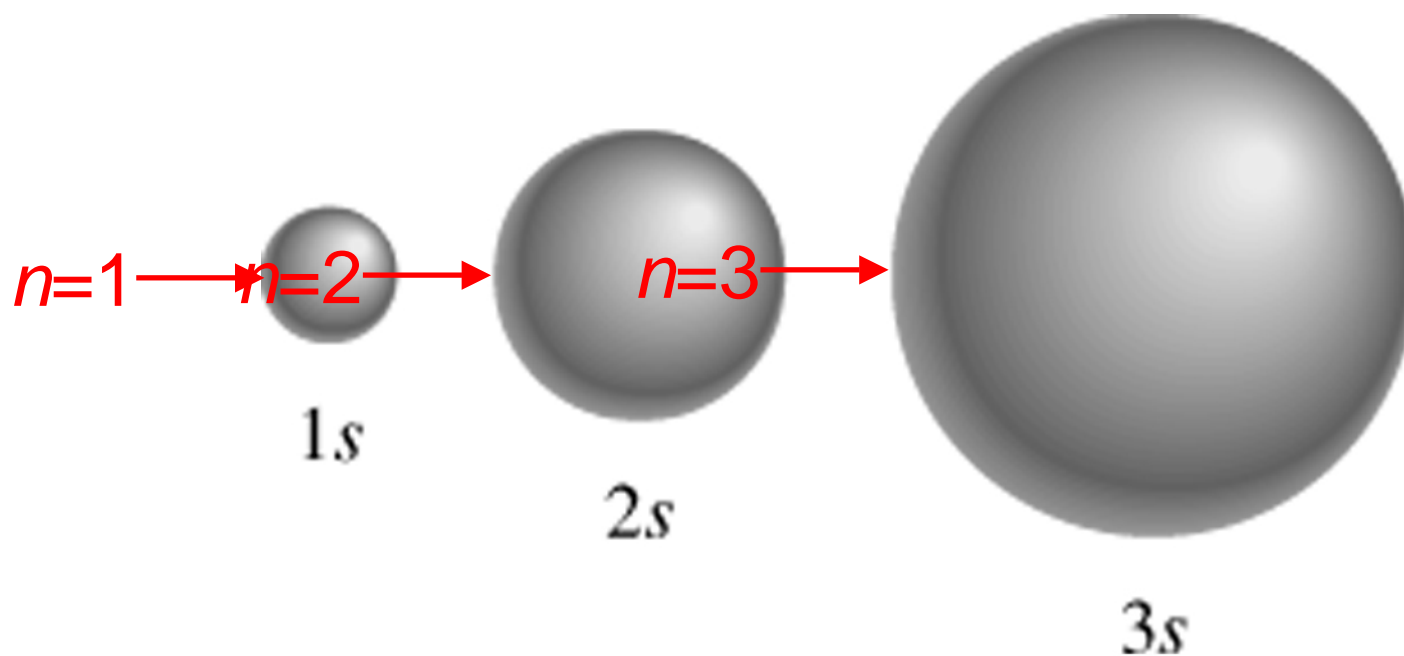
Huvudkvanttalet, n

- Beskriver vågfunktionens storlek och elektronens energi.
 - Ju högre n desto högre energinivå.
 - Det mest sannolika avståndet mellan elektronen och kärnan.
 - Desto längre från kärnan, ju större orbital.

n	1	2	3	4
	K	L	M	N



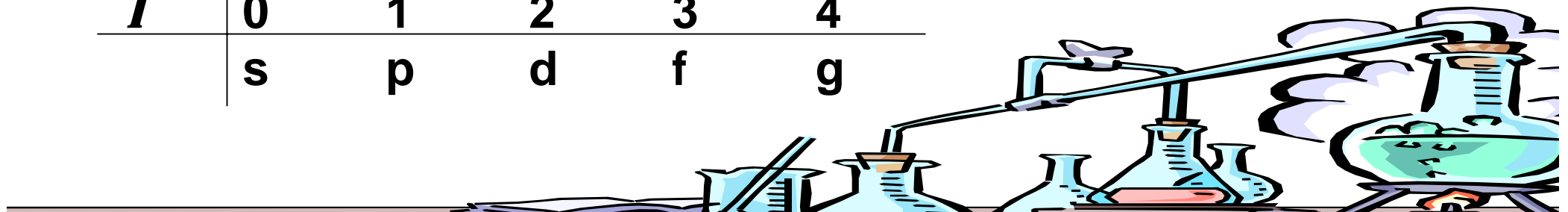
Huvudkvanttalet, n



Bikvanttal, l

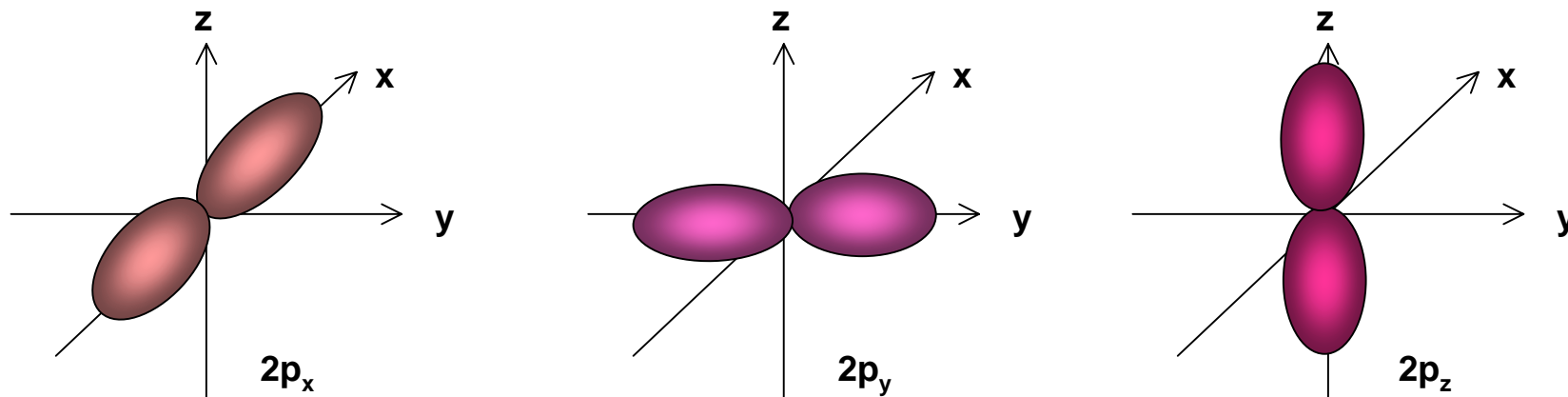
- Beskriver subskalets (underskalets) geometriska form, dvs inom vilken geometrisk volym det är troligast att finna elektronen.
 - l är beroende av huvudkvanttalet, och antar värdena $0, \dots, n-1$.
 - $n=1 \Rightarrow l=0$
 - $n=2 \Rightarrow l=0, 1$
 - $n=3 \Rightarrow l=0, 1, 2$

l	0	1	2	3	4
	s	p	d	f	g



Magnetiskt kvanttal, m_l

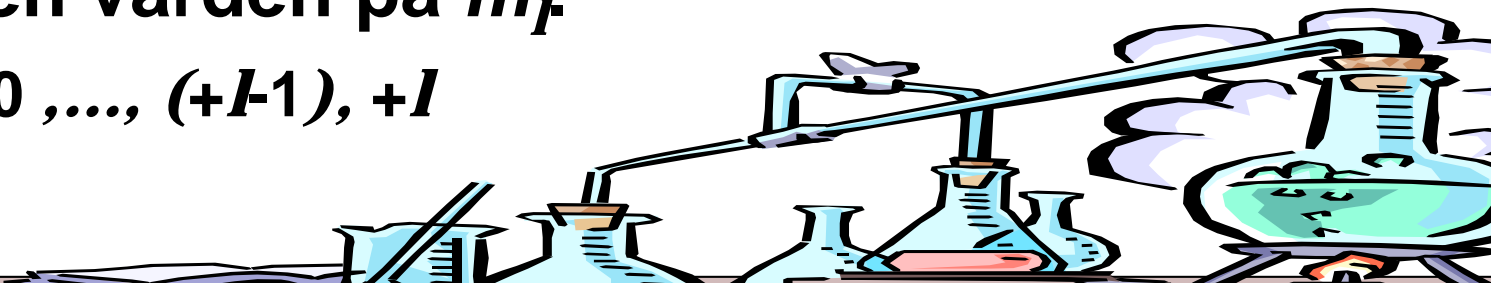
- Beskriver orbitalens riktning i rymden.



Beror av l , för varje värde på l finns

$2l+1$ stycken värden på m_l

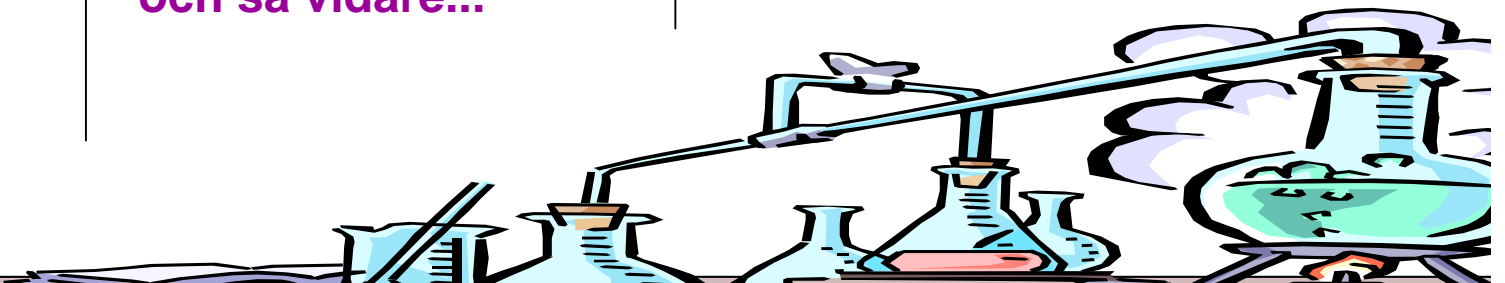
$-l, (-l+1), \dots, 0, \dots, (+l-1), +l$



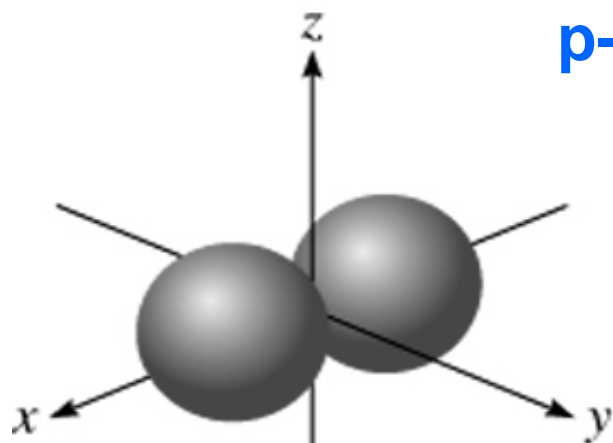
Samband mellan kvanttal

n	<i>l</i>	m_l	orbital
1	0	0	1s
2	0	0	2s
	1	-1, 0, +1	2p _x , 2p _y , 2p _z
3	0	0	3s
	1	-1, 0, +1	3p _x , 3p _y , 3p _z
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{xz} , 3d _{x²-y²} , 3d _{z²}
4	0	0	4s
	1		
	2		
	3	och så vidare...	

och så vidare...

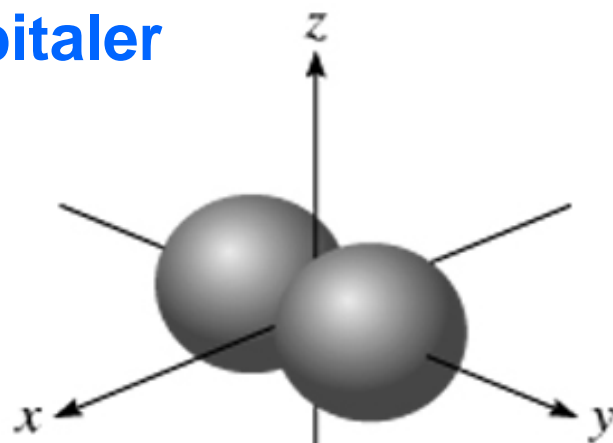


p-orbitaler



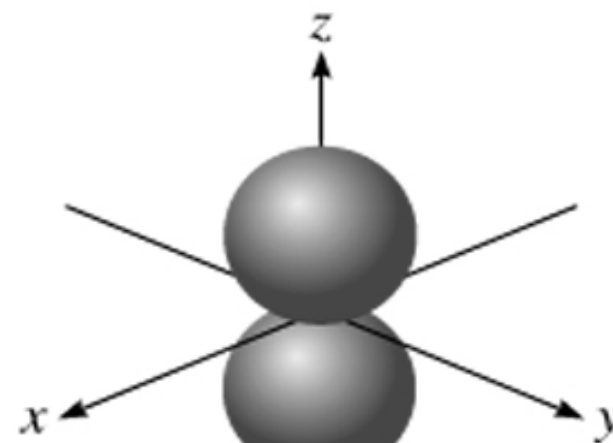
$$m_l = -1$$

$$2p_x$$



$$m_l = 0$$

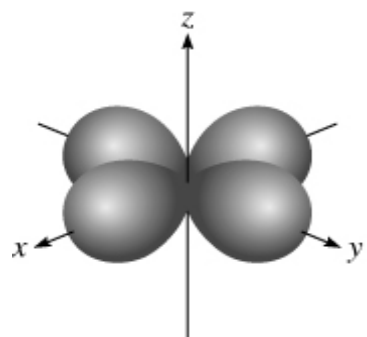
$$2p_y$$



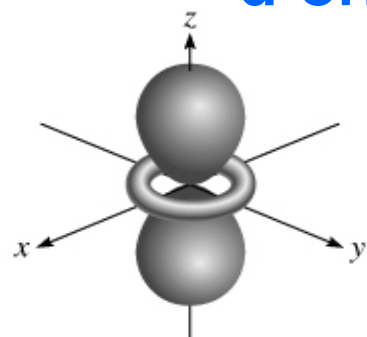
$$m_l = 1$$

$$2p_z$$

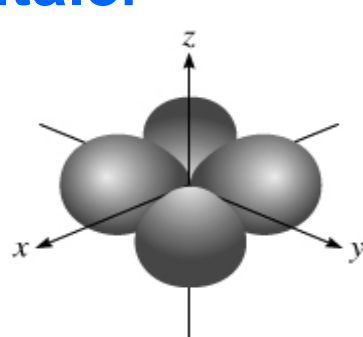
d-orbitaler



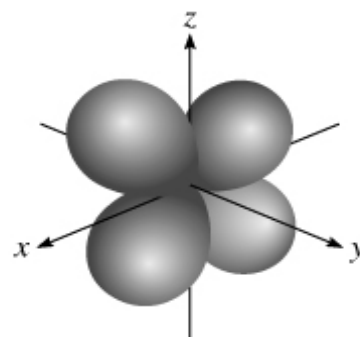
$$m_l = -2$$



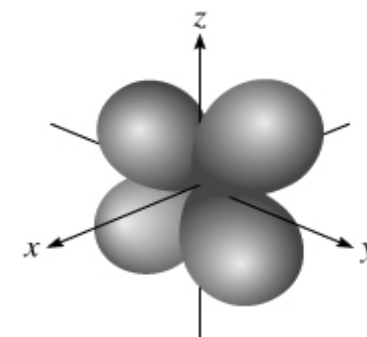
$$m_l = -1$$



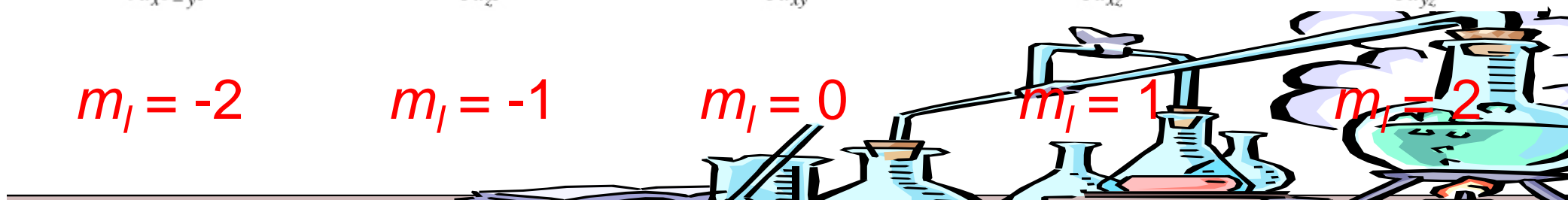
$$m_l = 0$$



$$m_l = 1$$



$$m_l = 2$$





Hur många 2p orbitaler har en atom?

$n=2$



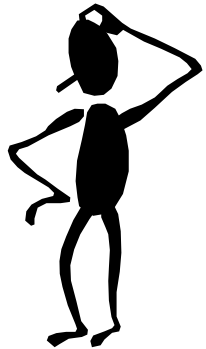
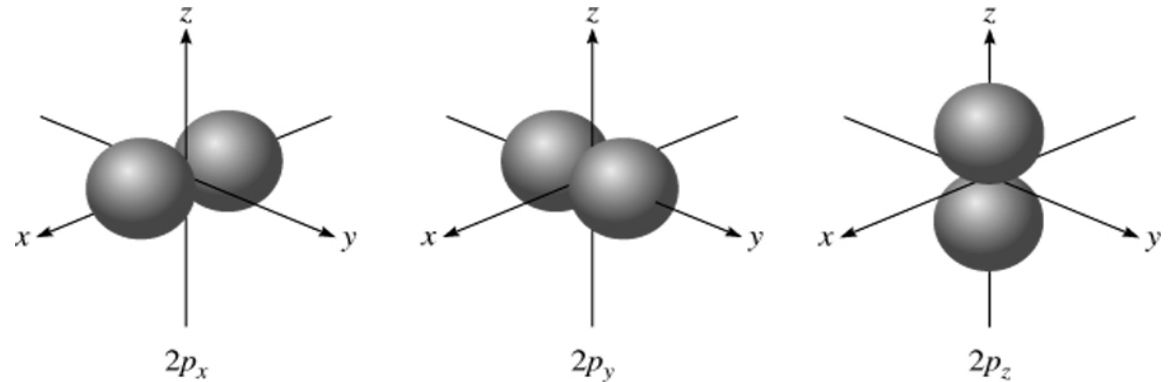
2p



$l=1$

om $l = 1$, så $m_l = -1, 0, \text{ or } +1$

3 orbitaler



Hur många elektroner kan placeras i 3d subskalet?

$n=3$



3d



$l=2$

om $l = 2$, så $m_l = -2, -1, 0, +1, \text{ or } +2$

5 orbitaler som kan innehålla 10 e⁻



Orbitalernas energi

- Om bara beroende av n :

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 3d < 4s < 4p < 4d$$

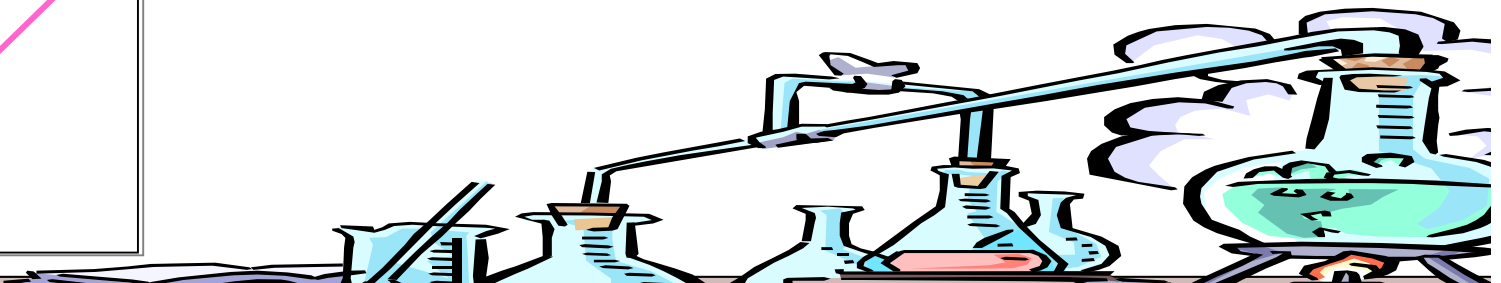
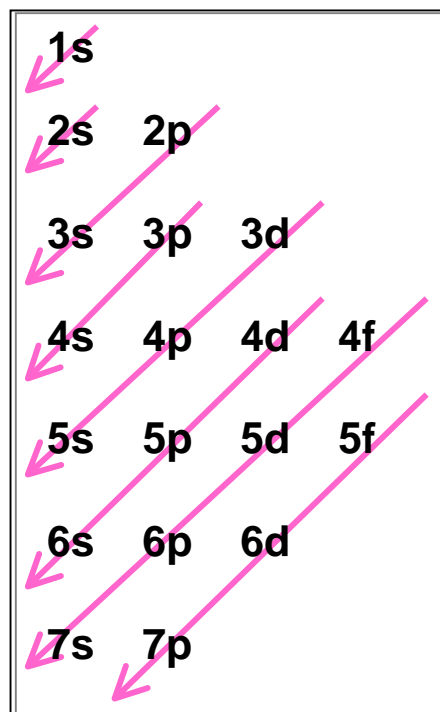
- $2s < 2p$ eftersom elektronerna i s-orbitalen skärmar av attraktionskraften från kärnan, attraktionen som elektronerna i p-orbitalen känner av blir svagare.



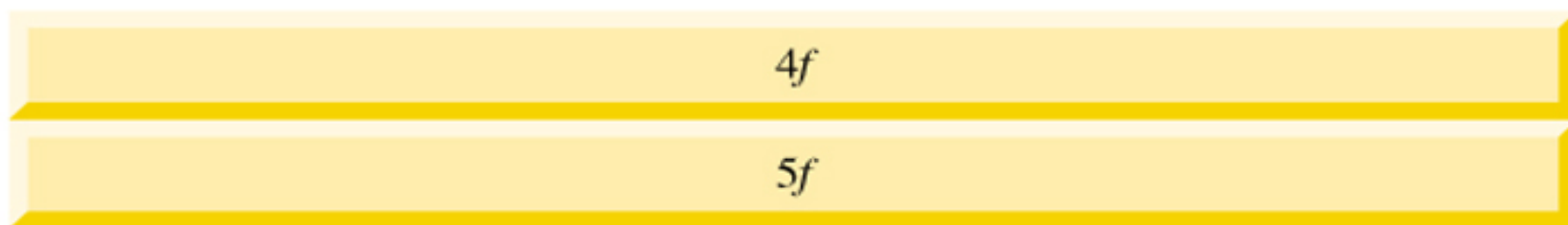
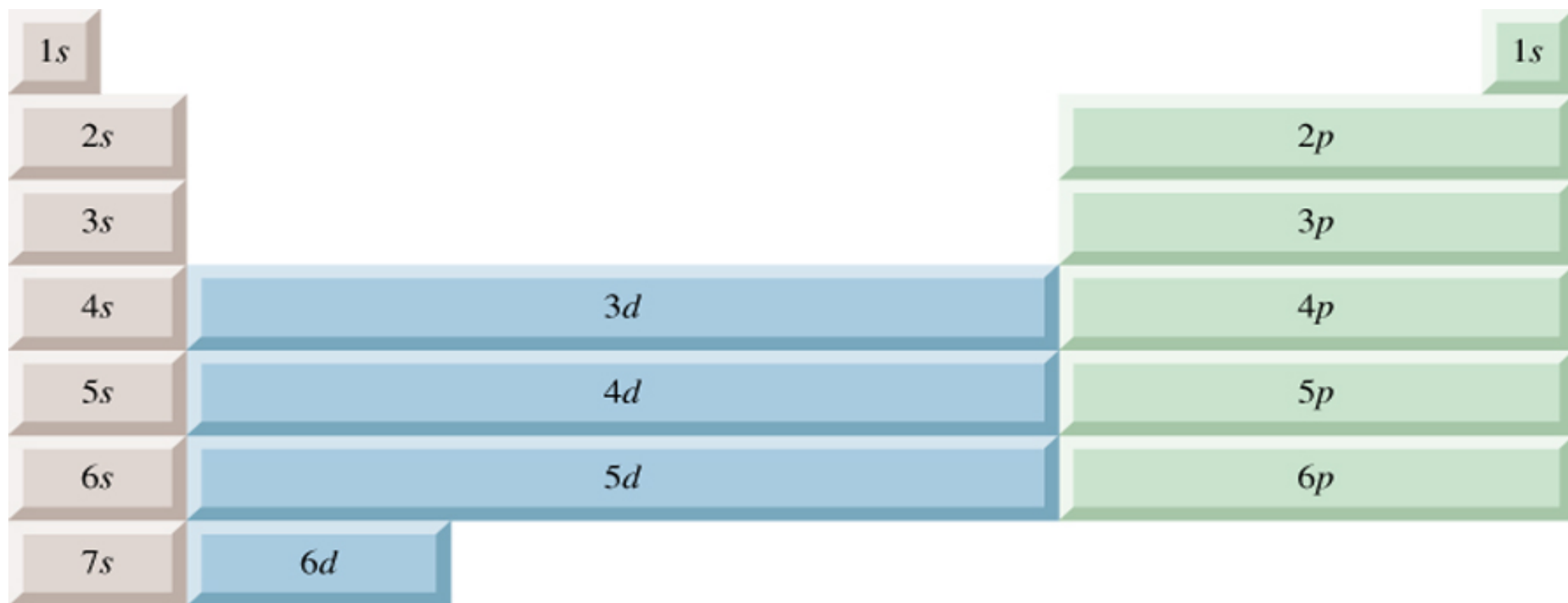
Orbitalernas energi

- MEN** för flerelektronatomer beror energin hos orbitalen både på n och l :

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < \dots$



Det yttersta subskalet som fylls med elektroner



Orbitalteori / Bohrs atommodell

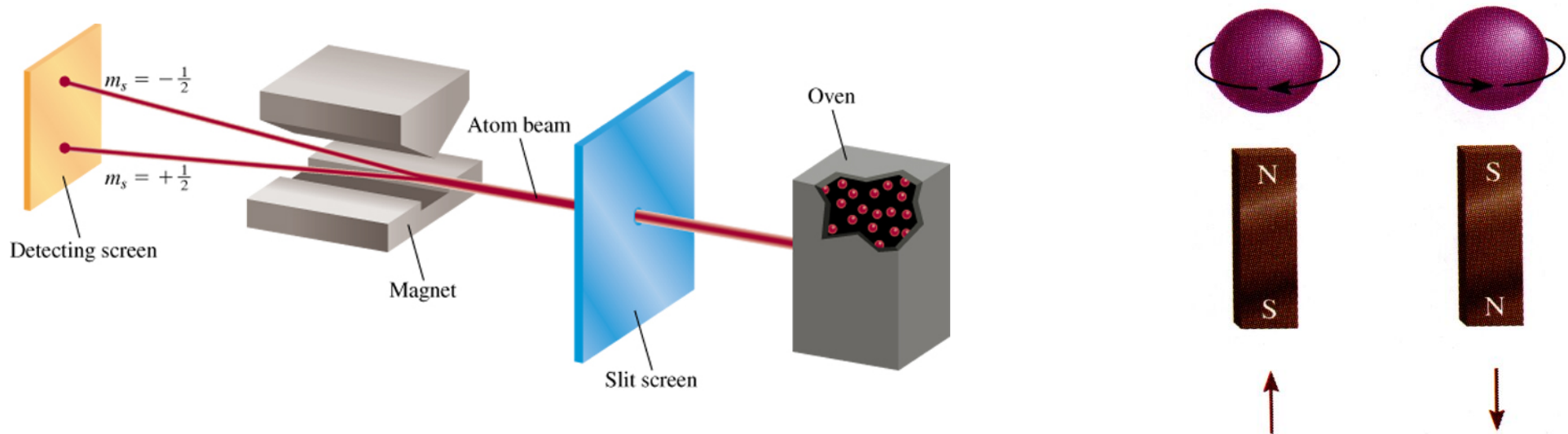
- Bohrs atommodell:

K	2 e ⁻	1s
L	8 e ⁻	2s, 2p _x , 2p _y , 2p _z
M	18 e ⁻	3s, 3p _x , 3p _y , 3p _z , 3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{xz} , 3d _{x²-y²} , 3d _{z²}

⇒ 2 elektroner i varje orbital!



Spinnkvanttal, m_s

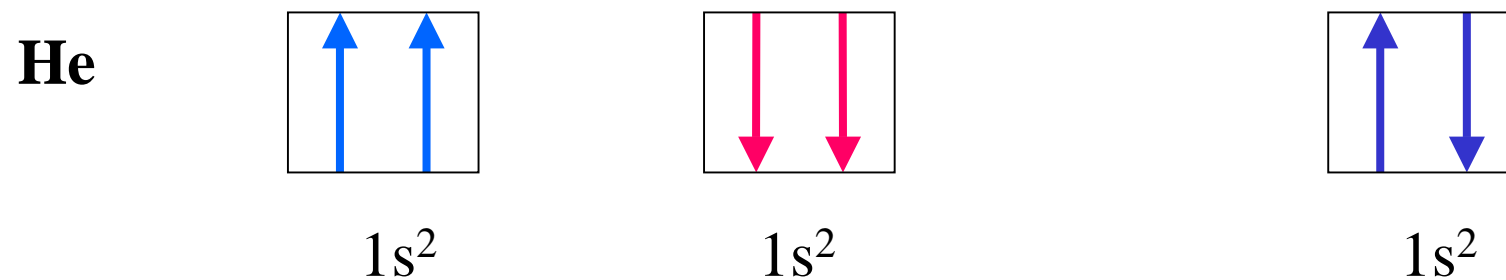


- Beskriver elektronernas spinn-riktning, anges som $+\frac{1}{2}$ eller $-\frac{1}{2}$.



Elektronkonfiguration

- Vet vi hur elektronerna i He fördelar sig?



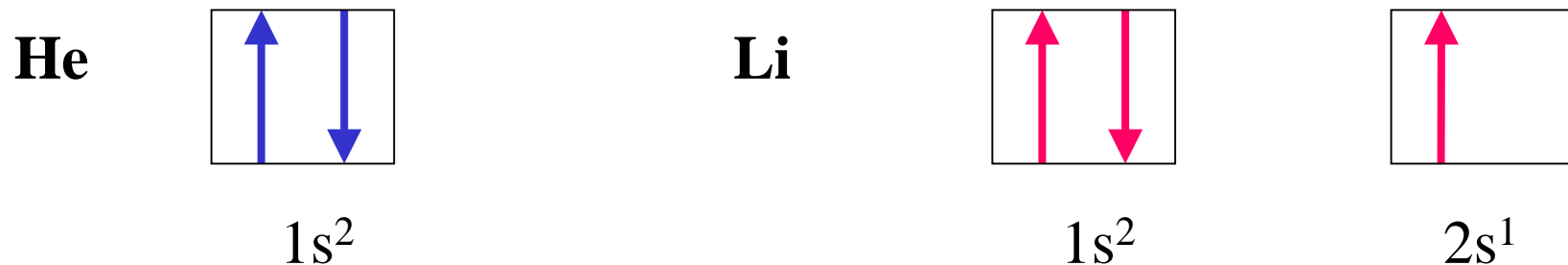
n, l, m_l, m_s $(1, 0, 0, +1/2)$ $(1, 0, 0, -1/2)$ $(1, 0, 0, +1/2); (1, 0, 0, -1/2)$

Paulis uteslutningsprincip



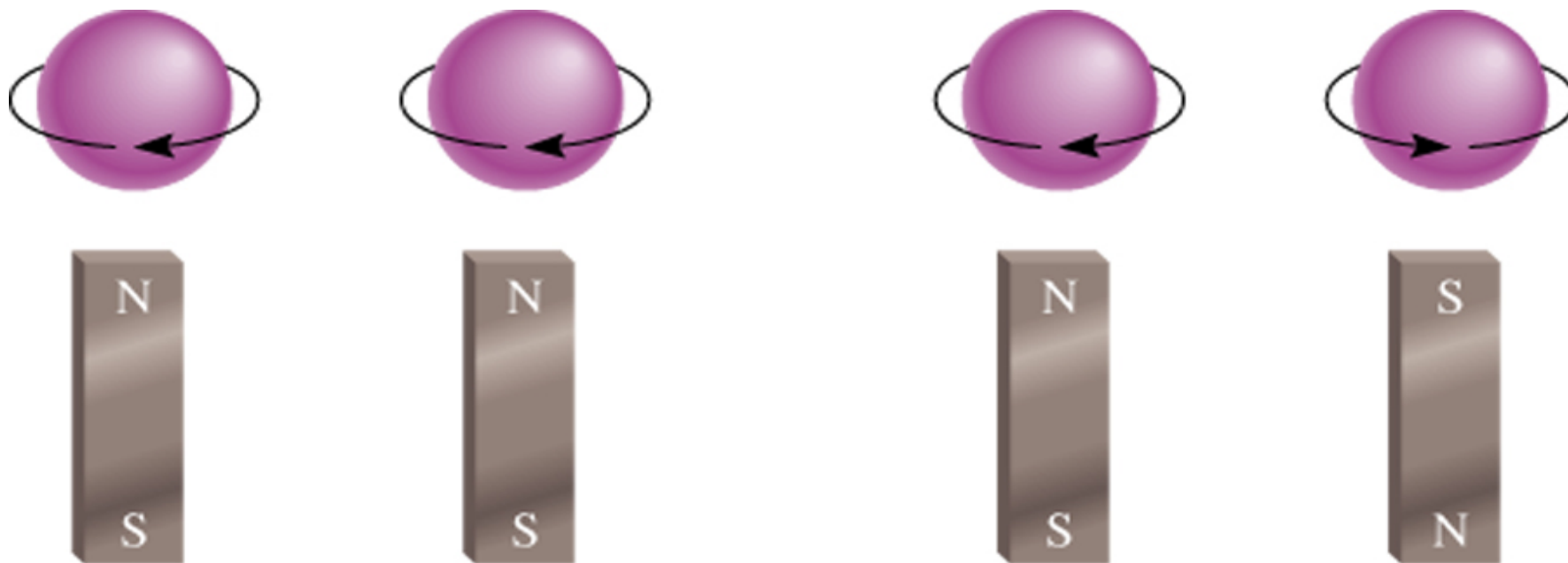
Paramagnetism och diamagnetism

- Vi jämför elektronkonfigurationen för He och Li:



- He, inget netto magnetfält, är **diamagnetisk**.
- Li, har netto magnetfält, är **paramagnetisk**,
Och kommer att attraheras
av en magnet!





Paramagnetisk

Oparade elektroner

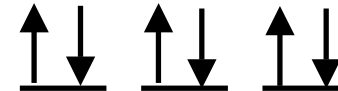


2p



Diamagnetisk

Parade elektroner 2p



Det periodiska systemet

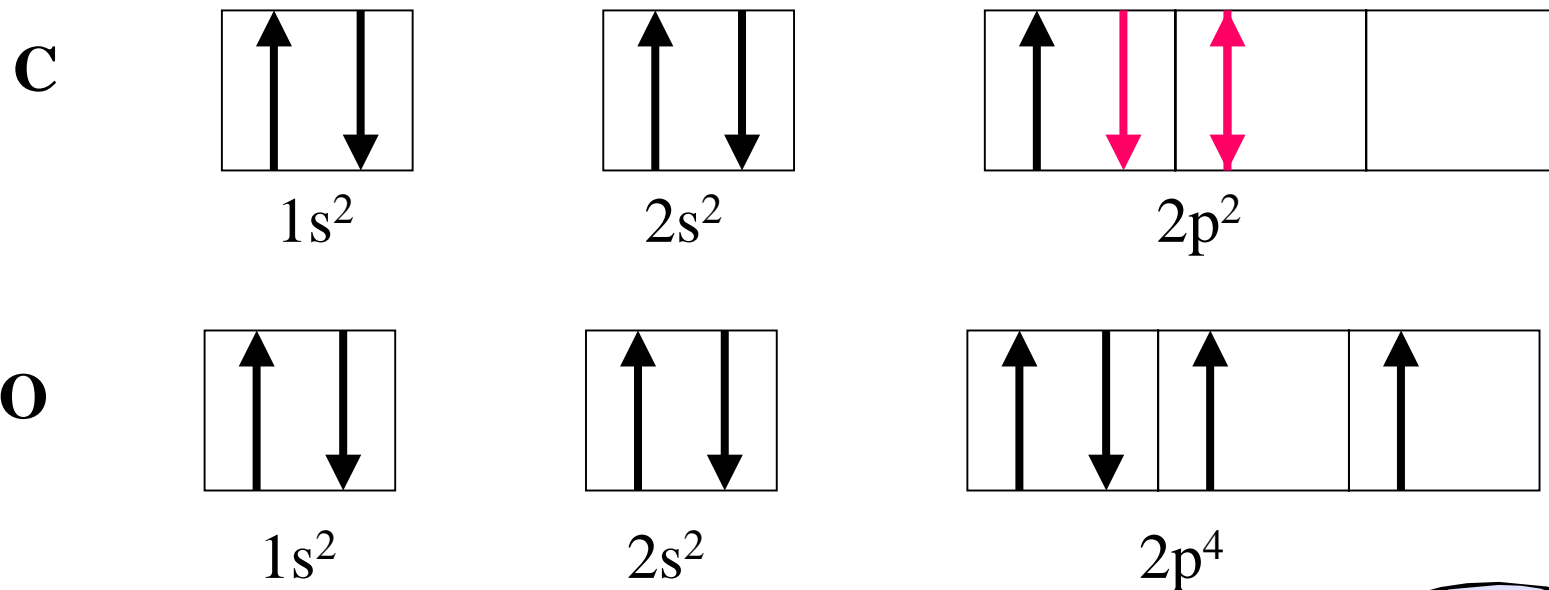
1 1A H	2 2A He											13 3A B	14 4A C	15 5A N	16 6A O	17 7A F	18 8A Ne
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	3 3B Sc	4 4B Ti	5 5B V	6 6B Cr	7 7B Mn	8 8B Fe	9 8B Co	10 8B Ni	11 1B Cu	12 2B Zn	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 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	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112	(113)	114	(115)	116	(117)	118

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

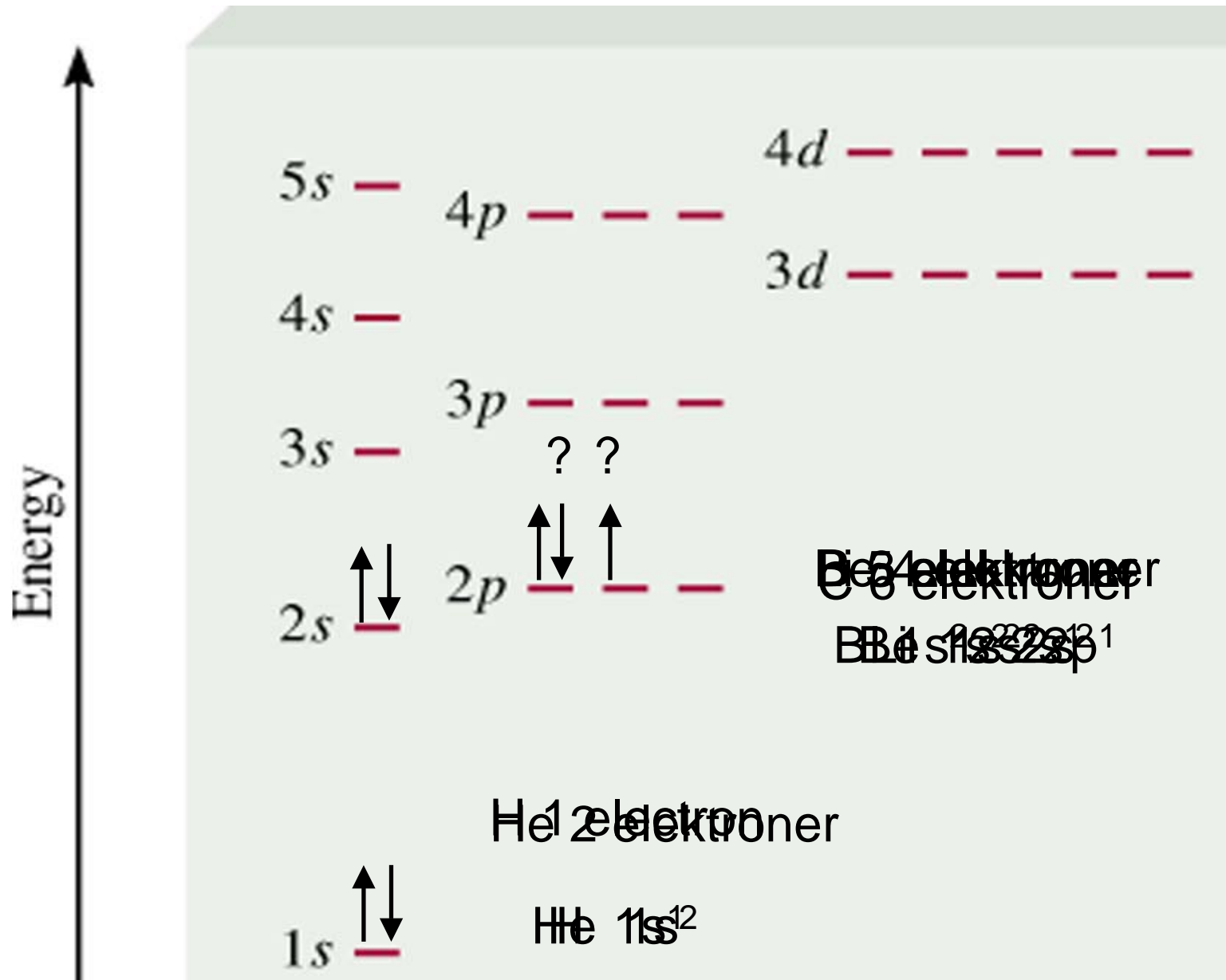


Elektronkonfiguration

- Aufbau-processen: elektronkonfigurationen byggs upp stegvis...

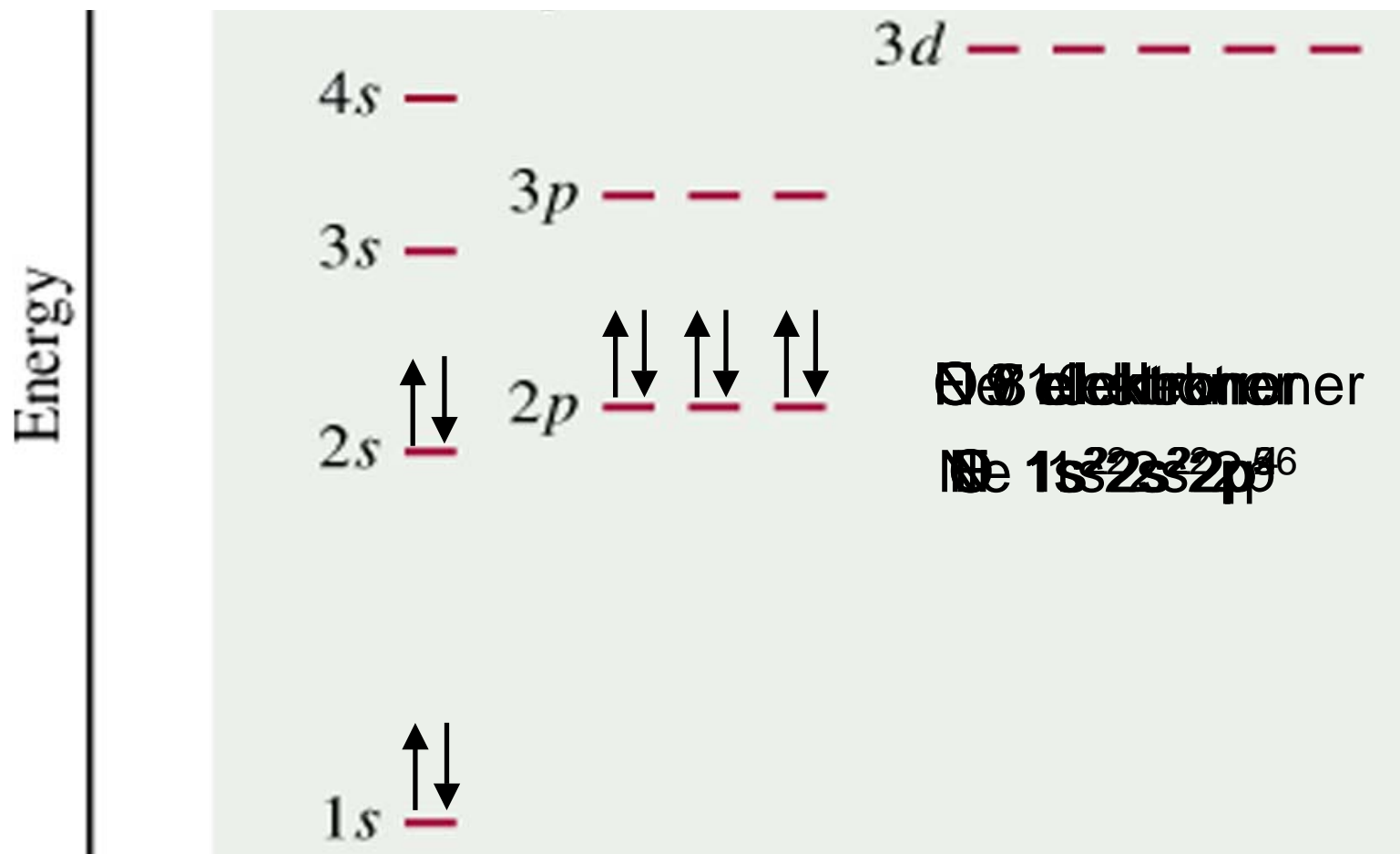


Aufbau-Processen



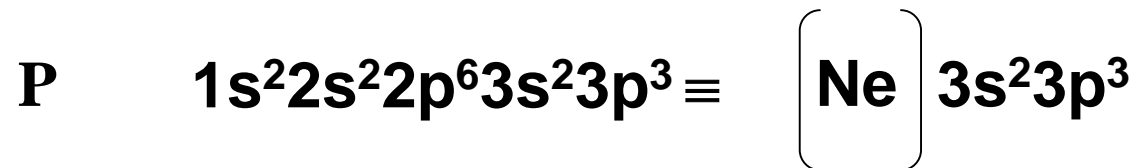
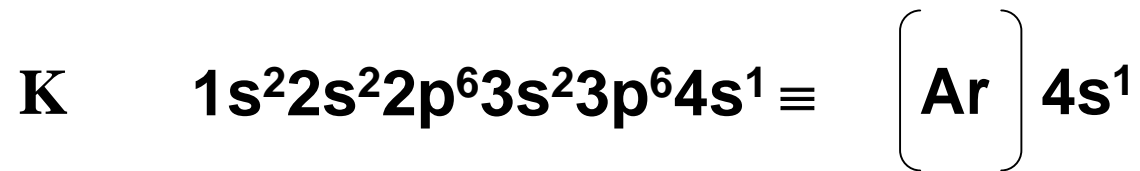


Det mest stabila arrangemanget av elektroner i ett subskal är det med det högsta antalet parallella spin (*Hund's regel*)



Elektronkonfiguration

- För atomer med höga atom nummer kan närmaste ädelgas användas för att ange konfigurationen för den atom som beskrivs.



Det periodiska systemet

1 1A H	2 2A He											13 3A B	14 4A C	15 5A N	16 6A O	17 7A F	18 8A Ne
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
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	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112	(113)	114	(115)	116	(117)	118

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

