

Atomstruktur

Ein diskusjon av hovudpunkta frå YF 41.3, 41.5, 41.6.

Hydrogenatomet

- Det enklaste atomet
- 1 elektron bunde til atomkjernen, som har 1 proton
- Bindinga er pga. den elektriske tiltrekningskrafta mellom protonet (elektrisk ladning $+e$) og elektronet (elektrisk ladning $-e$).
- Krafta kan avleiest fra ein potensiell energi:

$$\vec{F} = -\nabla U$$

$$U(r) \propto -\frac{e^2}{r}$$

“Coulomb-potensialet”

(r = avstanden mellom
protonet og elektronet)

Sjå på totalenergien til systemet (anta klassisk fysikk på denne sida, for enkelheits skuld). (p = proton, e = elektron)

$$E = \frac{1}{2}m_p\dot{\vec{r}}_p^2 + \frac{1}{2}m_e\dot{\vec{r}}_e^2 + U(r)$$

Uttrykk posisjonsvektorane til protonet og elektronet vha. relativposisjonen $\vec{r}$ og posisjonsvektoren $\vec{r}_{\text{cm}}$ for massesenteret (c.m.):

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$$

$$\vec{r}_{\text{cm}} = \frac{m_p\vec{r}_p + m_e\vec{r}_e}{m_p + m_e}$$

Dette gir

$$E = \frac{1}{2}(m_p + m_e)\dot{\vec{r}}_{\text{cm}}^2 + \underbrace{\frac{1}{2}\frac{m_em_p}{m_e + m_p}\dot{\vec{r}}^2}_{\text{"reduisert masse" } \mu} + U(r)$$

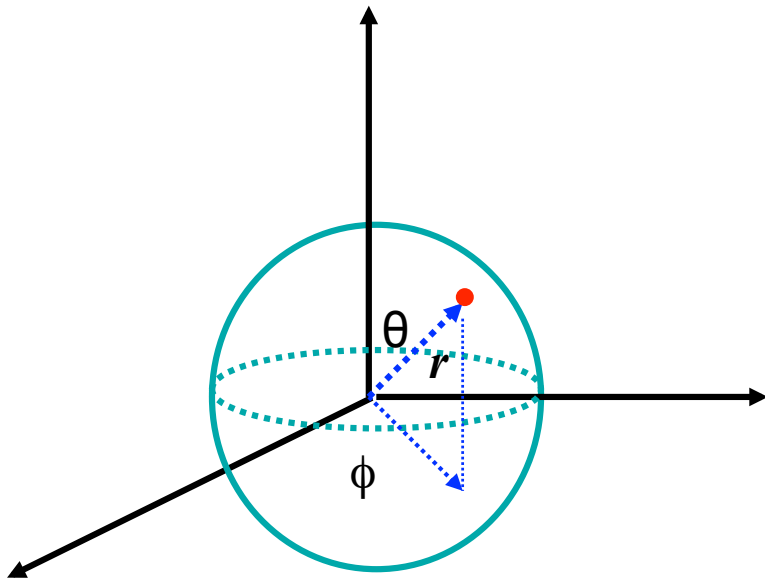
beskriv c.m. (uinteressant her)

beskriv partikkel med redusert masse μ i potensial $U(r)$

Energivåa til hydrogenatomet

Energivåa til hydrogenatomet kan finnast ved å løyse den tidsuavhengige Schr. likninga (TUSL) for ein partikkel med redusert masse μ i Coulomb-potensialet $U(r)$ (merk: $\mu \approx m_e$ fordi $m_e \ll m_p$)

$U(r)$ har sfærisk symmetri $\Rightarrow$ bruker sfæriske koordinatar (r, θ, ϕ) istaden for kartesiske koordinatar (x, y, z)



Bølgjefunksjon (romdel av stasjonær tilstand):

$$\psi = \psi(r, \theta, \phi)$$

Løysingane av TUSL tek forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

(dvs. løysing vha. separasjon av variablar virkar, som for partikkel i 3D boks)

Fokuserer her på bundne tilstander: $\psi \rightarrow 0$ for $r \rightarrow \infty$

Fysisk akseptable løysingar eksisterer kun for bestemte, diskrete energiar

Desse løysingane er karakterisert av bestemte verdier av kvantetal

Jf. bundne tilstander for andre problem vi har sett på (partikkel i 1D og 3D boks, harmonisk oscillator)



Analysen (som vi ikkje går inn på detaljane i) viser at

$$\psi_{nlm_l}(r) = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)$$

n : “radielt kvantetal” ($n = 1, 2, 3, \dots$)

l : “orbitalt kvantetal” ($l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$)

m_l : “magnetisk kvantetal” ($m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$)

Energiniivåa:

$$E = E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

(Pga. symmetriar avheng E kun av n , ikkje av l og m_l . Gir degenererte energiniivå.)

Kvantisering av banespinnet til elektronet

Kvantetala l og m_l er assosiert med kvantisering av hhv. storleiken og komponentane til banespinnet (“orbital angular momentum”) til elektronet. (Symbolet $\vec{L}$ blir brukt for elektronet sitt banespinn.)

I tilstanden med bølgefunksjon

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$$

har storleiken på banespinnet verdien

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

og komponenten av banespinnet langs z-aksen verdien

$$L_z = m_l \hbar$$

Men retninga på z-aksen er ikkje spesiell (orienteringa av koordinat-systemet kan veljast vilkårleg).

Meir generelt: Ein måling av komponenten av banespinnet langs ein vilkårleg retning kan kun gi ein av verdiane

$$m_l \hbar \quad (m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l)$$

der l er det orbitale kvantetalet til tilstanden.

Eksempel: anta at $l = 2$

Da er storleiken av banespinnet lik $L = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar = 2.45\hbar$

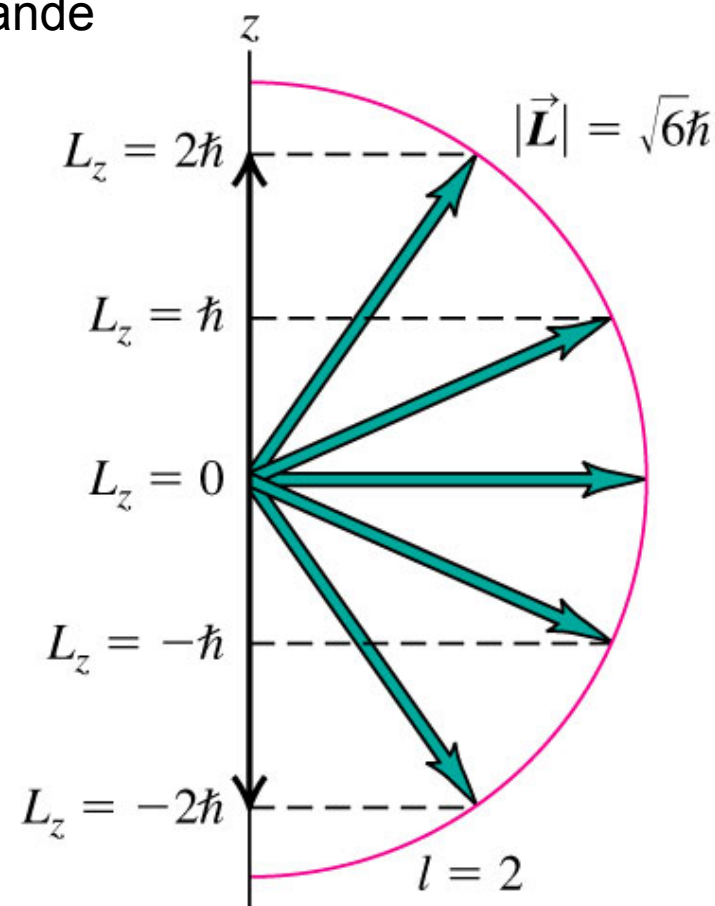
Utfallet av ei måling av komponenten av banespinnet langs ein vilkårleg retning er da begrensa til følgjande verdier:

$$-2\hbar, -\hbar, 0, +\hbar, +2\hbar$$

Merk at den målte verdien av komponenten L_j av banespinnet langs ein bestemt retning j er alltid mindre enn storleiken L av banespinnet.

Dette betyr at retninga på banespinnet er aldri presist kjent.

Dette kan sjåast på som ein konsekvens av ein Heisenbergsk usikkerheitsrelasjon.



Elektronet sitt eigenspinn

Diverse eksperiment med elektron utsett for ytre magnetfelt viser ein ytterlegare struktur i energinivåa som ikkje kan forklarast vha. omgrepa vi har diskutert til no. Derimot kan denne ekstra strukturen forståast som ein konsekvens av at elektron har eit *eigenspinn* (som kallast $\vec{S}$; engelsk: “spin”) i tillegg til banespinnet $\vec{L}$.

Det kan vere freistande å tolke eksistensen av eigenspinnet som ein indikasjon på at elektronet ikkje er ein punktpartikkel men ein lekam med utstrekning, som har eit eigenspinn pga. rotasjon rundt ein akse gjennom massesenteret (analogt til jordkloden som har eit banespinn pga. banebevegelsen rundt sola og eit eigenspinn pga. rotasjonen rundt sin eigen akse). Men dette biletet er for naivt sidan det er basert på klassisk fysikk, mens elektronet sitt eigenspinn er av kvantemekanisk opphav.

For eigenspinnet har ein spinnkvantetal s og m_s , analogt til kvantetala l og m_l for banespinnet. M.a.o. storleiken til eigenspinnet kan ta verdiane $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ og komponentane langs ein vilkårleg retning kan ta verdiane $m_s\hbar$, med tillatte verdier av m_s mellom $-s$ og s , i steg på 1.

For elektronet er $s = \frac{1}{2}$ (NB! kun éin verdi og ikkje eit heiltal, i motsetning til l). Elektronet sitt eigenspinn har dermed storleik $S = \sqrt{3/4}\hbar$ og komponentane langs ein vilkårleg retning kan ta verdiane $m_s\hbar$ med $m_s = \pm 1/2$.

Notasjon for tilstander

Ein stasjonær tilstand for hydrogenatomet er identifisert av eit sett av

4* kvantetal:

$$(n, l, m_l, m_s)$$

*unødvendig å inkludere kvantetalet s sidan det er alltid $1/2$

Kvantetala er (som diskutert i meir detalj tidlegare) begrensa til følgjande verdiar:

$$n \geq 1, \quad 0 \leq l \leq n - 1, \quad |m_l| \leq l, \quad m_s = \pm 1/2$$

Følgjande bokstavnotasjon blir ofte brukt for tilstander med gitt verdi av l :

Tilstander med $l = 0$ kallast s-tilstander

$l = 1$ p-tilstander

$l = 2$ d-tilstander

$l = 3$ f-tilstander

osv. (alfabetisk vidare, dvs. g, h,)

Eks. på bruk:

- ein tilstand med $n = 1$ og $l = 0$ kallast ein 1s tilstand.
- ein tilstand med $n = 2$ og $l = 1$ kallast ein 2p tilstand.

Tilstander med ein bestemt n blir referert til som eit *skal* (engelsk: shell).

For kvar n , blir tilstander med ein bestemt l referert til som eit *underskal* (subshell).

F.eks. 2s-underskalet, 3p-underskalet.

Atom med fleire elektron

Meir kompliserte atom har Z elektron rundt ein atomkjerne med Z proton

(atomkjernen inneheld også nøytron, men desse har ikkje elektrisk ladning)

Dei Z elektrona vekselverkar ikkje berre med dei Z protona i atomkjernen (tiltrekning), men også med kvarandre (fråstøyting). Analysen av elektrona er difor eit kvantemekanisk *mange-partikkel-problem*.

For dette systemet er bølgefunksjonen ein funksjon av posisjons-koordinatane til alle dei Z elektrona. TUSL blir dermed tilsvarande meir komplisert. Den kan ikkje eingong løysast eksakt for heliumatomet ($Z = 2$). Ein må difor introdusere approksimasjonsmetodar.

Middelfelt-approksimasjonen (sentralfelt-approksimasjonen): Eit elektron bevegar seg i eit potensial gitt av protona og den *midlere* ladningsdistribusjonen til dei andre elektrona. Potensialet har r -avhengigheit forskjellig fra $1/r$ men har framleis sfærisk symmetri. Approksimasjonen forenkler problemet til eit *ein-partikkel-problem*.

Mange eigenskaper til tilstandane blir dei same som for hydrogenatomet.

Spesielt kan tilstandane identifiserast med dei same kvantetala, som tek same verdiar som før. Det einaste som endrar seg er forma på den radielle delen $R_{nl}(r)$ av bølgefunksjonane og at energiane no avheng av l i tillegg til n .

Eksklusjonsprinsippet (Pauliprinsippet)

Sentralfelt-approksimasjonen gir at kvart elektron i eit atom er i ein tilstand karakterisert ved 4 kvantetal (n , l , m_l , m_s).

Eksklusjonsprinsippet: To elektron i det same atomet kan ikkje ha identiske verdier for alle dei 4 kvantetala.

Eksklusjonsprinsippet (også kalla Pauliprinsippet) vart formulert av Pauli i 1925. Det gjorde det mogeleg å forstå korleis kjemiske eigenskapar for atom kan endre seg markant sjølv for små endringar i atomnummeret Z .

Ei djupare forståing for opphavet til dette prinsippet vart seinare funne ved å kombinere kvantemekaniske prinsipp med spesiell relativitetsteori.

Eksklusjonsprinsippet gir at antalet elektron som kan vere i kvart skal er lik antalet tilstander i skalet.

Kvantetal	Antalet elektron med desse kvantetala
n, l, m_l, m_s	1
n, l, m_l	2
n, l	$2(2l + 1)$
n	$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2$

Så skalet med radielt kvantetal n kan ha $2n^2$ elektron.

Table 41.2 Quantum States of Electrons in the First Four Shells

n	l	m_l	Spectroscopic Notation	Number of States		Shell
1	0	0	1s	2	2	K
2	0	0	2s	2	8	L
2	1	-1, 0, 1	2p	6		
3	0	0	3s	2	18	M
3	1	-1, 0, 1	3p	6		
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	10		
4	0	0	4s	2	32	N
4	1	-1, 0, 1	4p	6		
4	2	-2, -1, 0, 1, 2	4d	10		
4	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f	14		

© 2012 Pearson Education, Inc.



$$2n^2$$

Elektronkonfigurasjonen for atom

- For atom med Z elektron: elektronkonfigurasjonen med lågaste totalenergi finn ein ved å fylle dei Z tilstandene (n, l, m_l, m_s) som har lågast energi med eitt elektron i kvar tilstand
- Elektronkonfigurasjonen kan skrivast som ei liste over dei fylte tilstandene.
- Eks: hydrogen: $1s$, helium: $1s^2$,
litium: $1s^2 2s$, bor: $1s^2 2s^2 2p$

Skalet gitt av n , underskalet av l , som blir representert med bokstav. Superskriptet gir antal elektron i underskalet (= 1 dersom det manglar)

Table 41.3

Table 41.3 Ground-State Electron Configurations

Element	Symbol	Atomic Number (Z)	Electron Configuration
Hydrogen	H	1	$1s$
Helium	He	2	$1s^2$
Lithium	Li	3	$1s^2 2s$
Beryllium	Be	4	$1s^2 2s^2$
Boron	B	5	$1s^2 2s^2 2p$
Carbon	C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
Nitrogen	N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$
Oxygen	O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
Fluorine	F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Neon	Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Sodium	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$
Magnesium	Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Aluminum	Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$
Silicon	Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
Phosphorus	P	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
Sulfur	S	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Chlorine	Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Argon	Ar	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Potassium	K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$
Calcium	Ca	20	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
Scandium	Sc	21	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d$
Titanium	Ti	22	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$
Vanadium	V	23	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$
Chromium	Cr	24	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^3 3d^5$
Manganese	Mn	25	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^5$
Iron	Fe	26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$
Cobalt	Co	27	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$
Nickel	Ni	28	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$
Copper	Cu	29	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^3 3d^{10}$
Zinc	Zn	30	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$

Periodic Table of the Elements

Group**																		
Period	1 IA 1A											13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	18 VIII 8A	
1	1 <u>H</u> 1.008	2 IIA 2A																2 <u>He</u> 4.003
2	3 <u>Li</u> 6.941	4 <u>Be</u> 9.012											5 <u>B</u> 10.81	6 <u>C</u> 12.01	7 <u>N</u> 14.01	8 <u>O</u> 16.00	9 <u>F</u> 19.00	10 <u>Ne</u> 20.18
3	11 <u>Na</u> 22.99	12 <u>Mg</u> 24.31	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 ----- ----- 8	9 ----- ----- VIII	10 ----- ----- VIII	11 IB 1B	12 IIB 2B	13 <u>Al</u> 26.98	14 <u>Si</u> 28.09	15 <u>P</u> 30.97	16 <u>S</u> 32.07	17 <u>Cl</u> 35.45	18 <u>Ar</u> 39.95
4	19 <u>K</u> 39.10	20 <u>Ca</u> 40.08	21 <u>Sc</u> 44.96	22 <u>Ti</u> 47.88	23 <u>V</u> 50.94	24 <u>Cr</u> 52.00	25 <u>Mn</u> 54.94	26 <u>Fe</u> 55.85	27 <u>Co</u> 58.47	28 <u>Ni</u> 58.69	29 <u>Cu</u> 63.55	30 <u>Zn</u> 65.39	31 <u>Ga</u> 69.72	32 <u>Ge</u> 72.59	33 <u>As</u> 74.92	34 <u>Se</u> 78.96	35 <u>Br</u> 79.90	36 <u>Kr</u> 83.80
5	37 <u>Rb</u> 85.47	38 <u>Sr</u> 87.62	39 <u>Y</u> 88.91	40 <u>Zr</u> 91.22	41 <u>Nb</u> 92.91	42 <u>Mo</u> 95.94	43 <u>Tc</u> (98)	44 <u>Ru</u> 101.1	45 <u>Rh</u> 102.9	46 <u>Pd</u> 106.4	47 <u>Ag</u> 107.9	48 <u>Cd</u> 112.4	49 <u>In</u> 114.8	50 <u>Sn</u> 118.7	51 <u>Sb</u> 121.8	52 <u>Te</u> 127.6	53 <u>I</u> 126.9	54 <u>Xe</u> 131.3
6	55 <u>Cs</u> 132.9	56 <u>Ba</u> 137.3	57 <u>La</u> * 138.9	72 <u>Hf</u> 178.5	73 <u>Ta</u> 180.9	74 <u>W</u> 183.9	75 <u>Re</u> 186.2	76 <u>Os</u> 190.2	77 <u>Ir</u> 190.2	78 <u>Pt</u> 195.1	79 <u>Au</u> 197.0	80 <u>Hg</u> 200.5	81 <u>Tl</u> 204.4	82 <u>Pb</u> 207.2	83 <u>Bi</u> 209.0	84 <u>Po</u> (210)	85 <u>At</u> (210)	86 <u>Rn</u> (222)
7	87 <u>Fr</u> (223)	88 <u>Ra</u> (226)	89 <u>Ac</u> ~ (227)	104 <u>Rf</u> (257)	105 <u>Db</u> (260)	106 <u>Sg</u> (263)	107 <u>Bh</u> (262)	108 <u>Hs</u> (265)	109 <u>Mt</u> (266)	110 --- 0	111 --- 0	112 --- 0		114 --- 0		116 --- 0		118 --- 0

Lanthanide Series*

58 <u>Ce</u> 140.1	59 <u>Pr</u> 140.9	60 <u>Nd</u> 144.2	61 <u>Pm</u> (147)	62 <u>Sm</u> 150.4	63 <u>Eu</u> 152.0	64 <u>Gd</u> 157.3	65 <u>Tb</u> 158.9	66 <u>Dy</u> 162.5	67 <u>Ho</u> 164.9	68 <u>Er</u> 167.3	69 <u>Tm</u> 168.9	70 <u>Yb</u> 173.0	71 <u>Lu</u> 175.0
--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------

Actinide Series~

90 <u>Th</u> 232.0	91 <u>Pa</u> (231)	92 <u>U</u> (238)	93 <u>Np</u> (237)	94 <u>Pu</u> (242)	95 <u>Am</u> (243)	96 <u>Cm</u> (247)	97 <u>Bk</u> (247)	98 <u>Cf</u> (249)	99 <u>Es</u> (254)	100 <u>Fm</u> (253)	101 <u>Md</u> (256)	102 <u>No</u> (254)	103 <u>Lr</u> (257)
--------------------------	--------------------------	-------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------

Periodic Table of the Elements

- seven horizontal rows called periods: contain elements with increasing atomic number
- elements in a given column (group) have similar valence electron configuration (configuration of outermost electrons) which gives similar chemical properties
- the properties change gradually and systematically when moving horizontally across each period