



Atomer – Kvantmekanik

Ljus –Materia

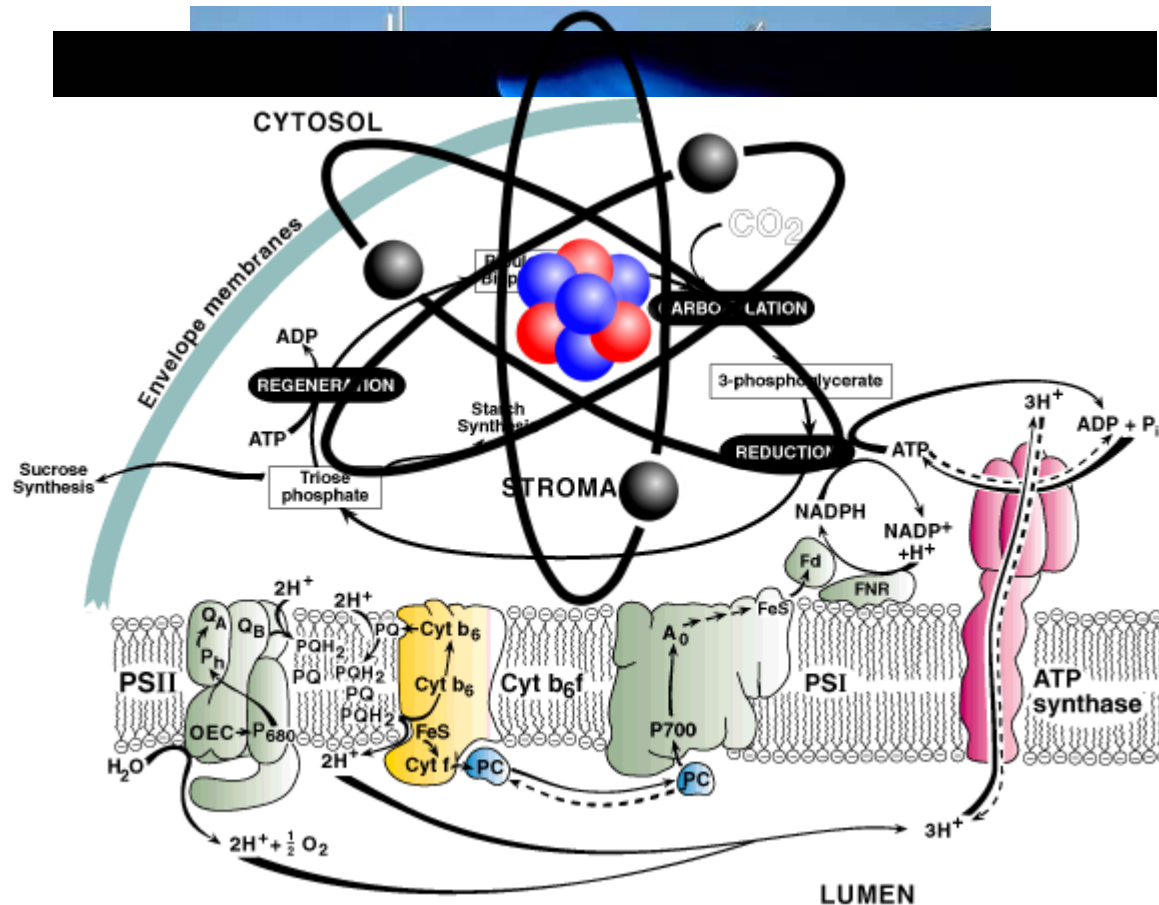
Kvantmekanik

Periodiska systemet

Mål

- Förstå uppbyggnad av atomer och därigenom lägga grund för diskussion om kovalenta bindningar
- Få en inblick i den mikroskopiska världen och hur den beskrivs av kvantmekaniken
- Grunden till växelverkan mellan ljus och materia – spektroskopi

Varför lära sig kvantmekanik?

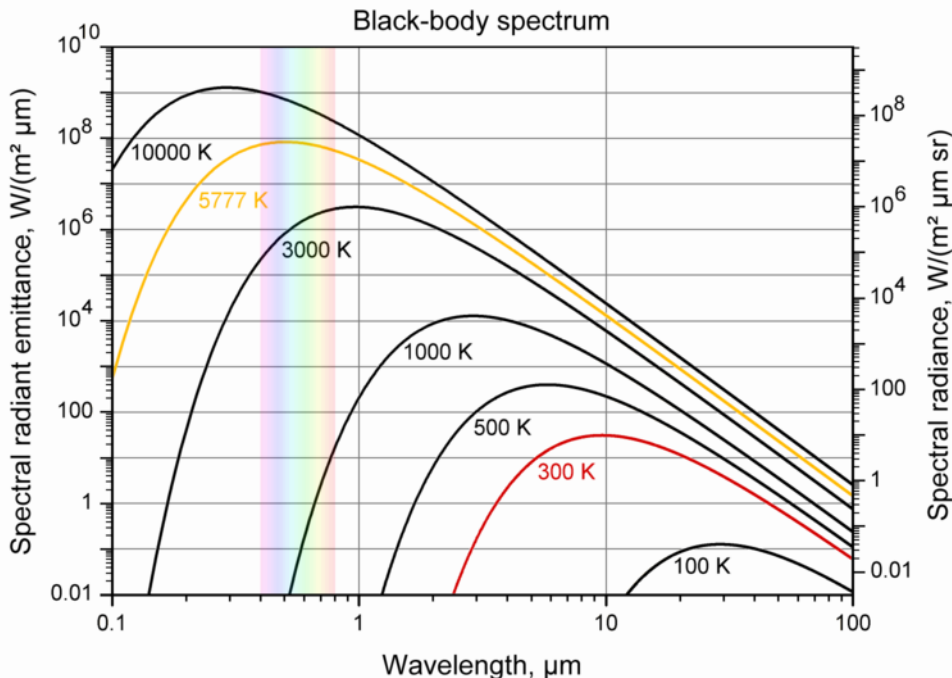
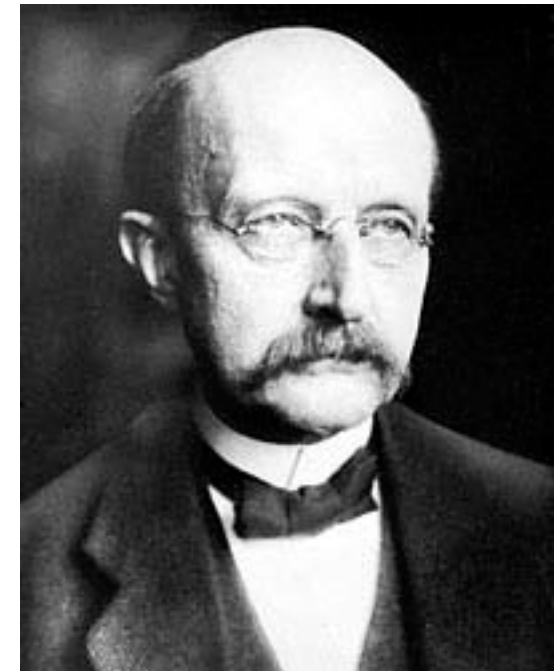


Kvantisering

1900: Energi överförs mellan materia och elektromagnetisk strålning i diskreta paket, s.k. kvanta. Dessa kvanta har energin

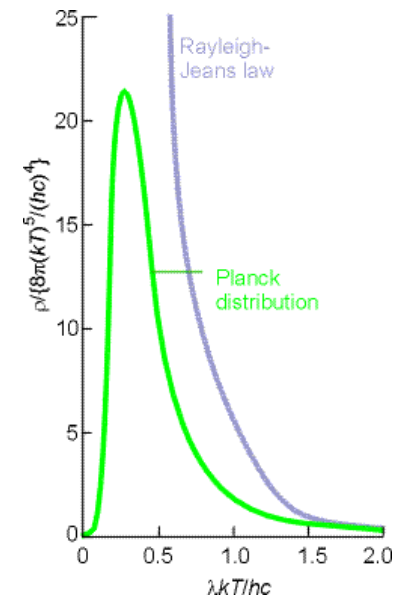
$$E = h\nu$$

där ν är ljusets frekvens och h är Plancks konstant. $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js



Max Planck

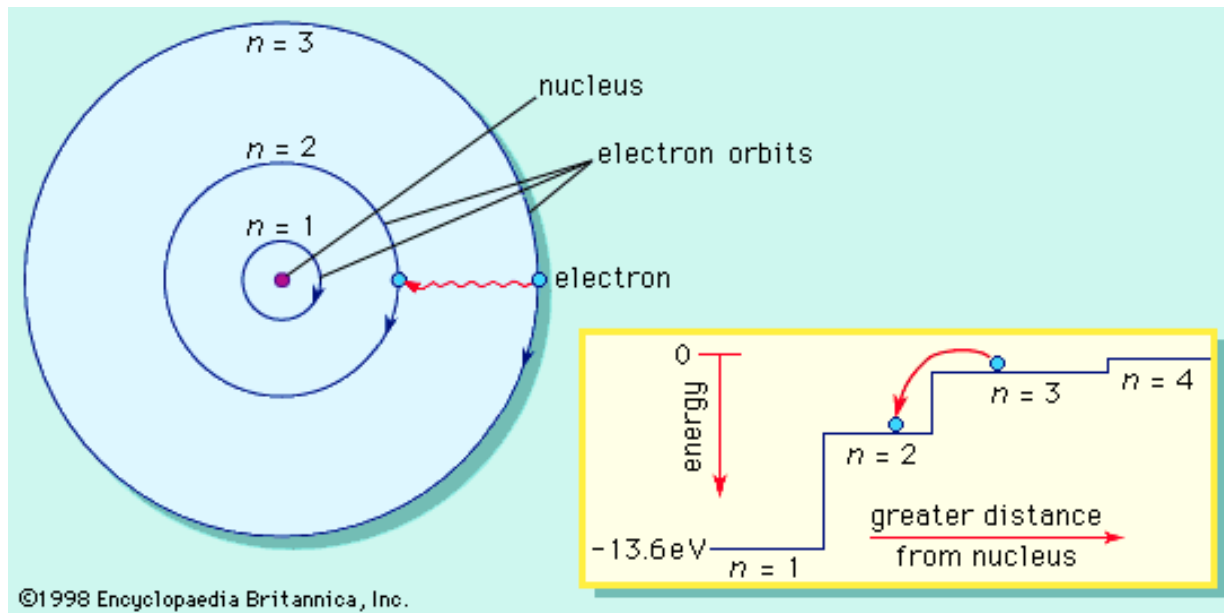
Svartkropps-
strålning
UV-katastrofen



Atommodell vid början av 1900-talet



1913: Bohrmodellen



Niels Bohr

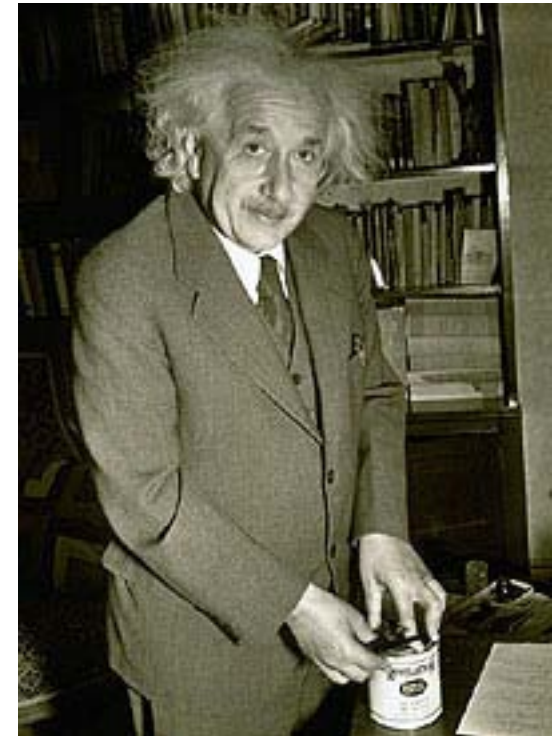
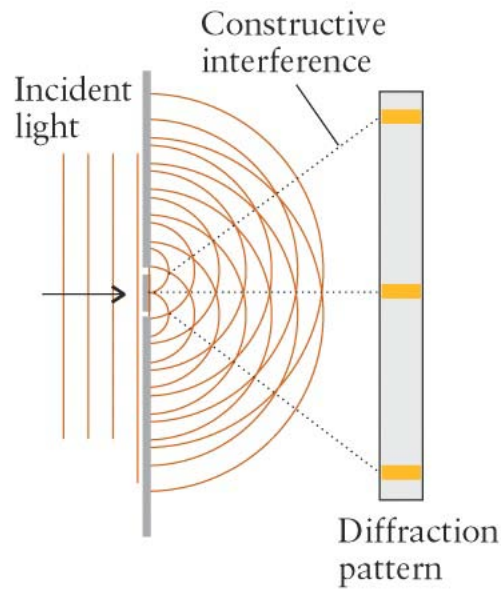
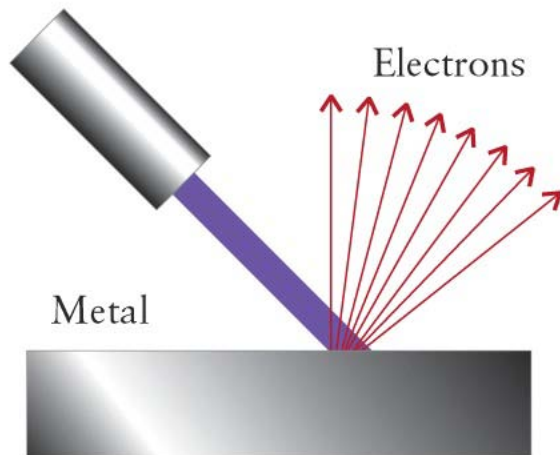
Ljus: Är det partiklar – jag trodde det var en vågrörelse?

Våg-partikel dualism
fotoner

1905: Fotoelektrisk effekt

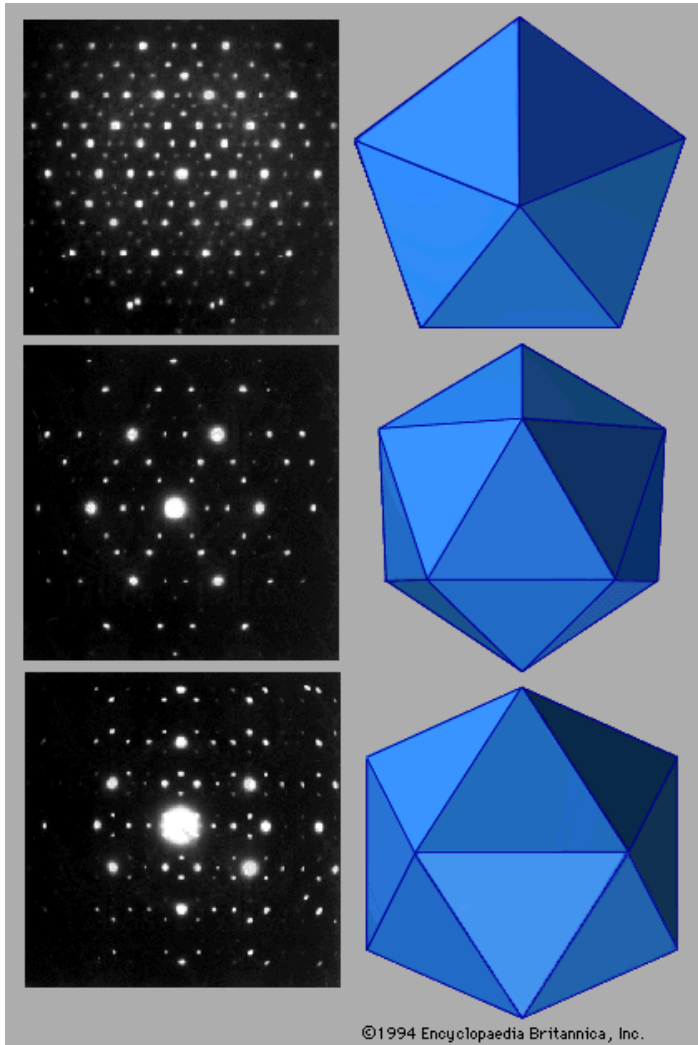
Interferens

Ultraviolet
radiation source

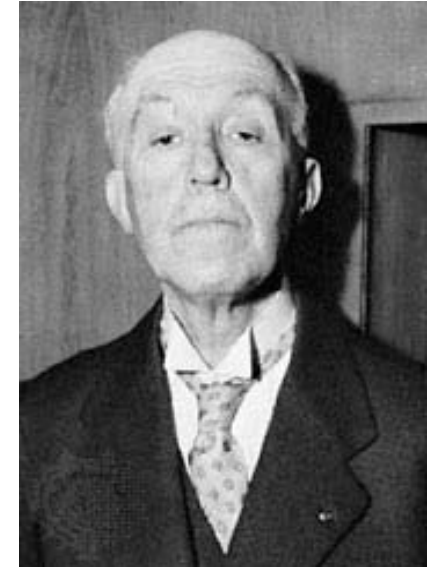


Albert Einstein

Även ”riktiga” partiklar har vågegenskaper!



Elektron-
diffraktion



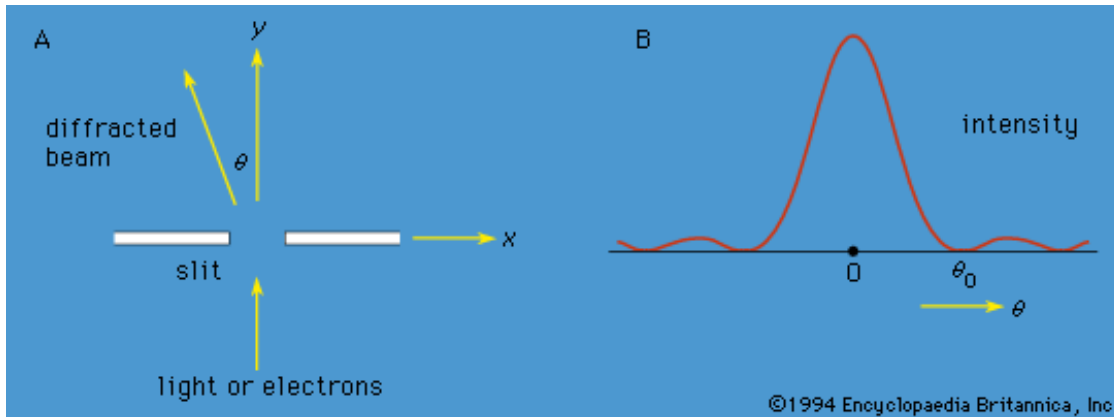
Louis-Victor de Broglie

1924: Elektroner är både partiklar och vågor $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$

Osäkerhetsprincipen (obestämbarhetsprincipen)

$$1927 \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Vi kan inte observera utan att påverka!



Werner Heisenberg

Kvantmekanik

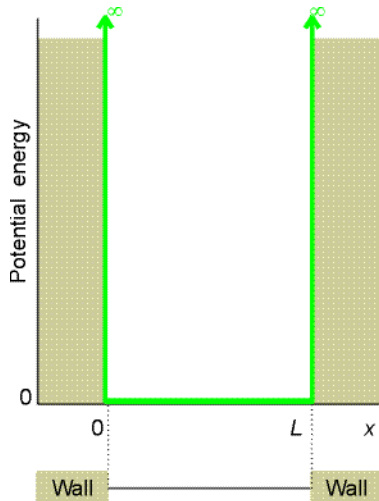
Schrödingerekvationen: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi$
1926

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Eller enklare i

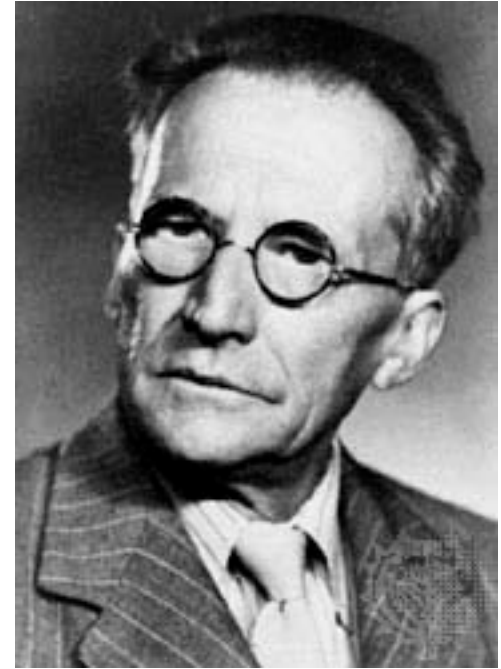
operatorform: $\hat{H}\Psi = E\Psi$ $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x, y, z)$
(egenvärdesekvation)

Partikel i en 1-dimensionell låda



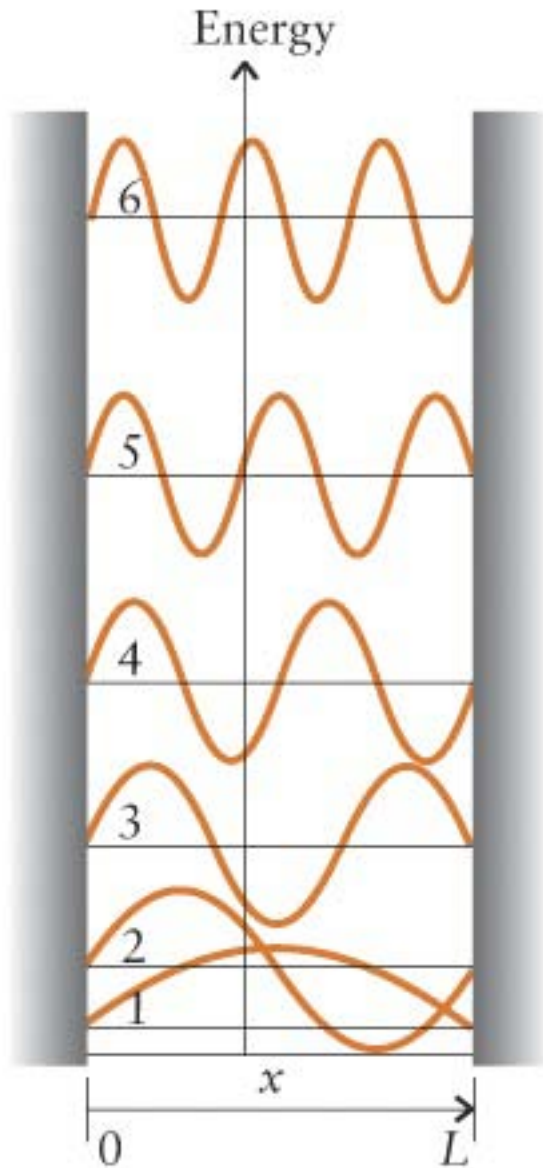
$$V = 0, \quad \nabla^2 \cong \frac{d^2}{dx^2} \quad \Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi, \quad 0 \leq x \leq L \quad \Psi = 0 \text{ annars}$$



Erwin Schrödinger

Partikeln i lådan



$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\Psi_n = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad 0 \leq x \leq L$$

- Kvantisering
- Nollpunktsenergi
- Energi – antal noder
- Lådlängden
- Born tolkning - $\Psi^2 =$ sannolikhetstäthet

Överlapp i tid och rum!

Planck 1858 - 1947

Einstein 1879 - 1955

Bohr 1885 - 1962

de Broglie 1892 - 1987

Heisenberg 1901 - 1976

Schrödinger 1887 - 1961

1900- 1945

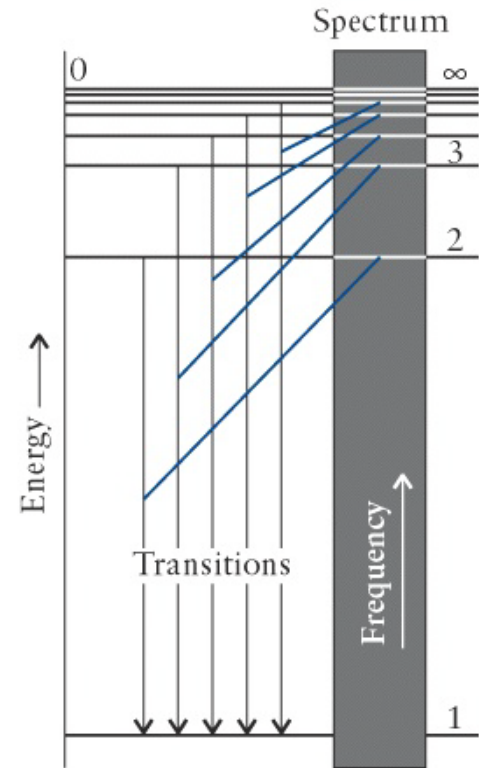
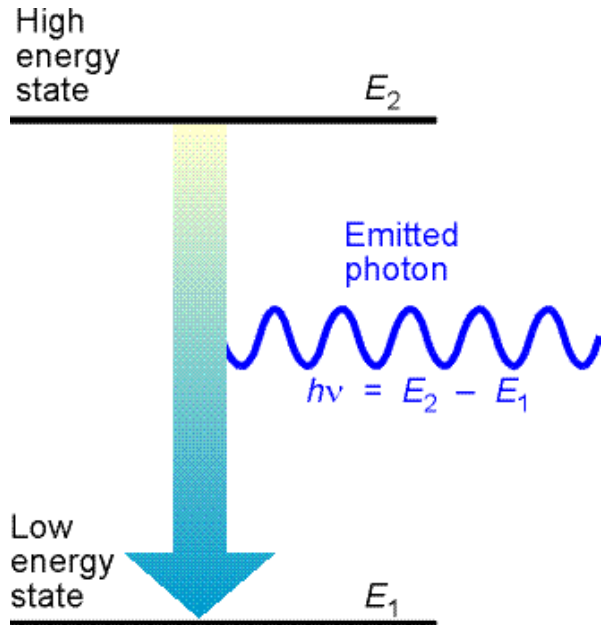


Atomer - väte

H



Spektroskopi



C



Atommodell - centralfältproblemet

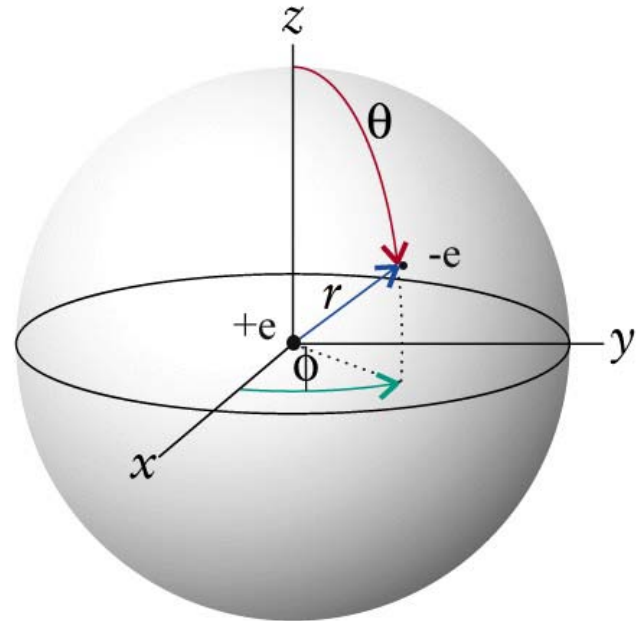
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \Psi + V\Psi = E\Psi \quad V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Energiegenvärdet beror endast av huvudkvanttalet, n

$$E_n = -\frac{h\mathfrak{R}}{n^2} \quad \mathfrak{R} = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

Vågfunktioner

$$\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$



Atomorbitaler

Fyra kvanttal specificerar vågfunktionen:

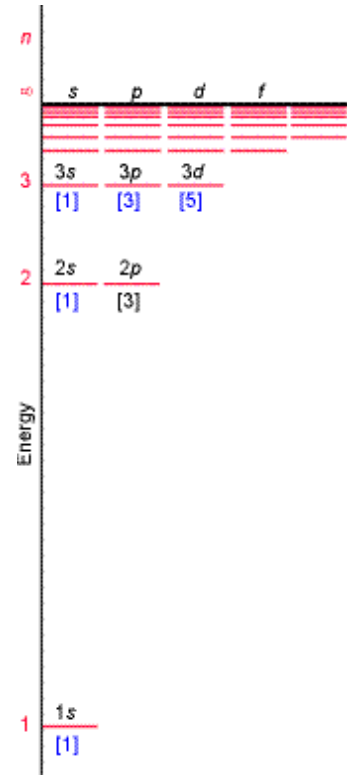
n – huvudkvanttal: 1, 2, 3, 4....
K,L,M,N

l – bikvanttal: 0, 1, 2, 3... $n-1$
s, p, d, f

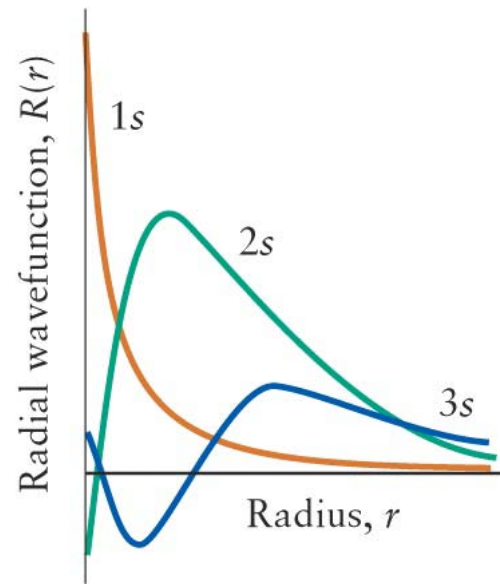
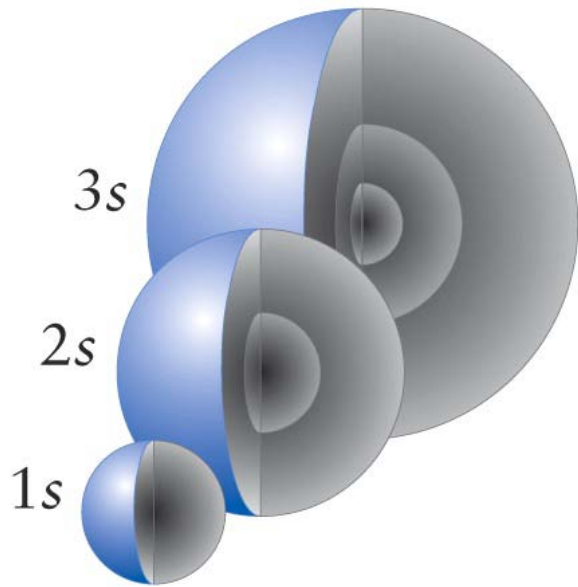
m_l – magnetiskt bikvanttal: $-l, -l+1, \dots, l$

m_s – spinnkvanttal: $-1/2, +1/2$

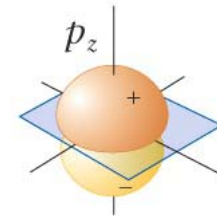
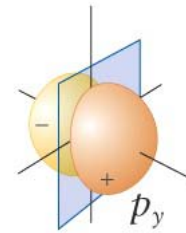
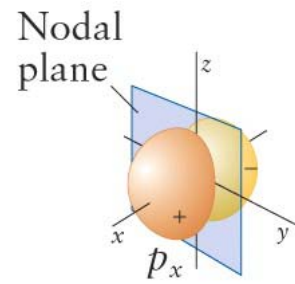
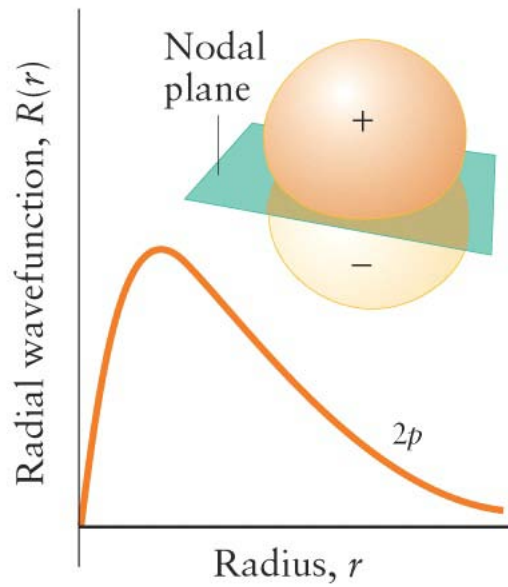
Atomorbitaler betecknas enligt nl_m : t. ex. $3p_x, 4s, 3d_{xy}$



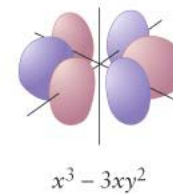
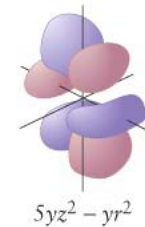
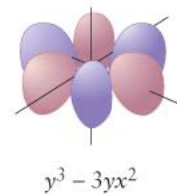
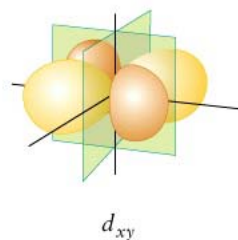
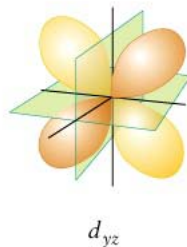
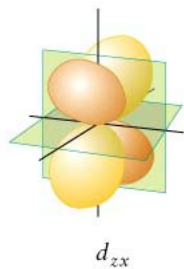
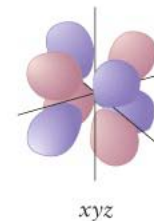
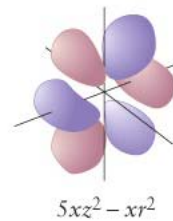
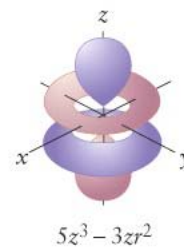
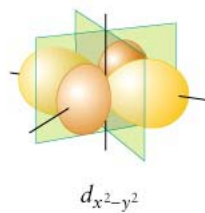
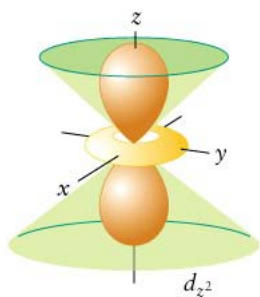
s-orbitaler



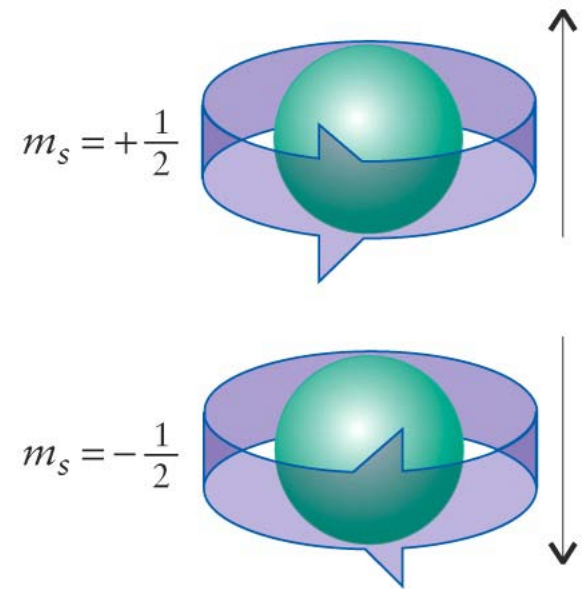
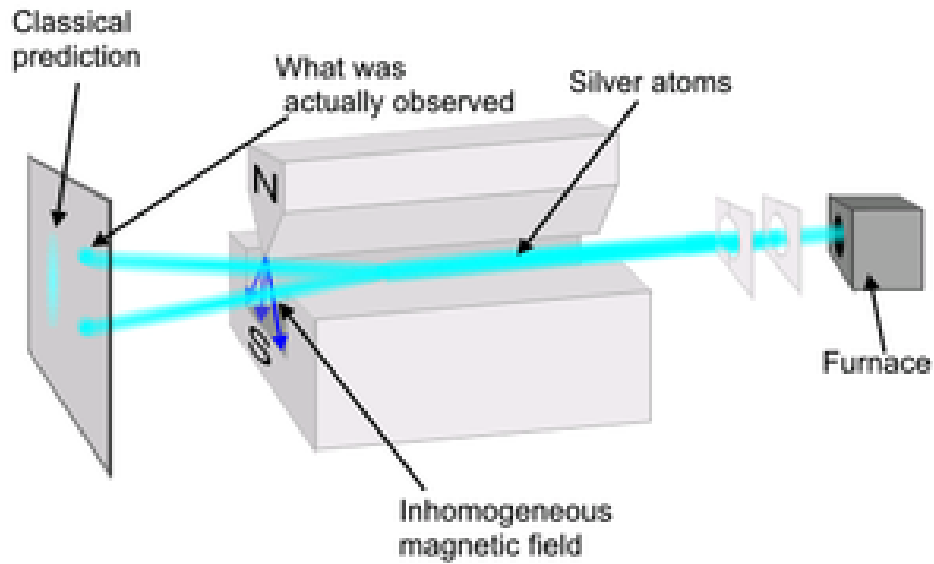
p-orbitaler



d- och f-orbitaler



Elektronspin



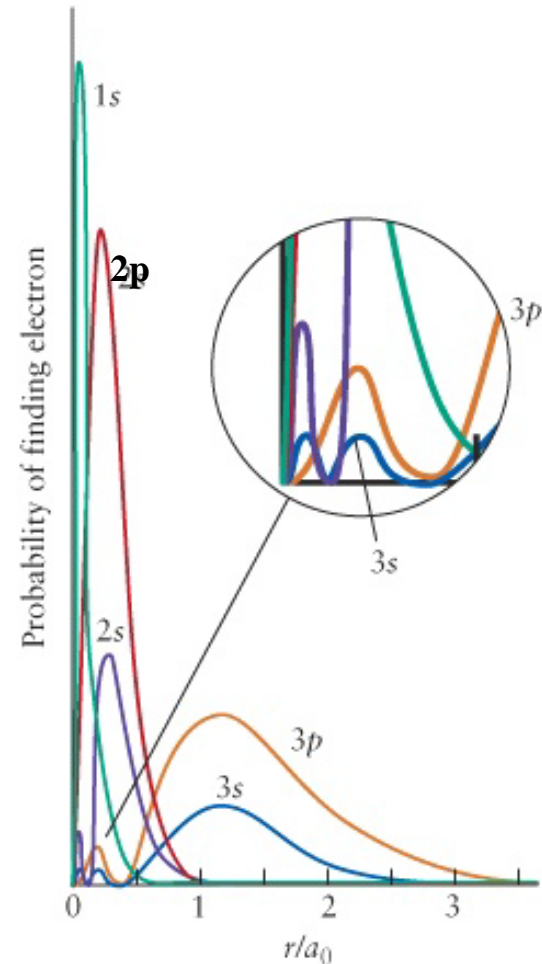
Stern –Gerlach experimentet

Två eller fler elektroner – vad händer efter väte?

- Högre kärnladdning
- Elektronrepulsion
- Penetration och skärmning
- Balanserande repulsiva och attraktiva krafter
- För orbitaler med samma huvudkvanttal (skal) gäller att orbitalenergierna ökar med bikvanttalet
 $s < p < d < f$

Skärmning och penetration

s-elektronerna har större sannolikhet att befinna sig nära kärnan och upplever därför en högre effektiv kärnladdning vilket leder till lägre energi



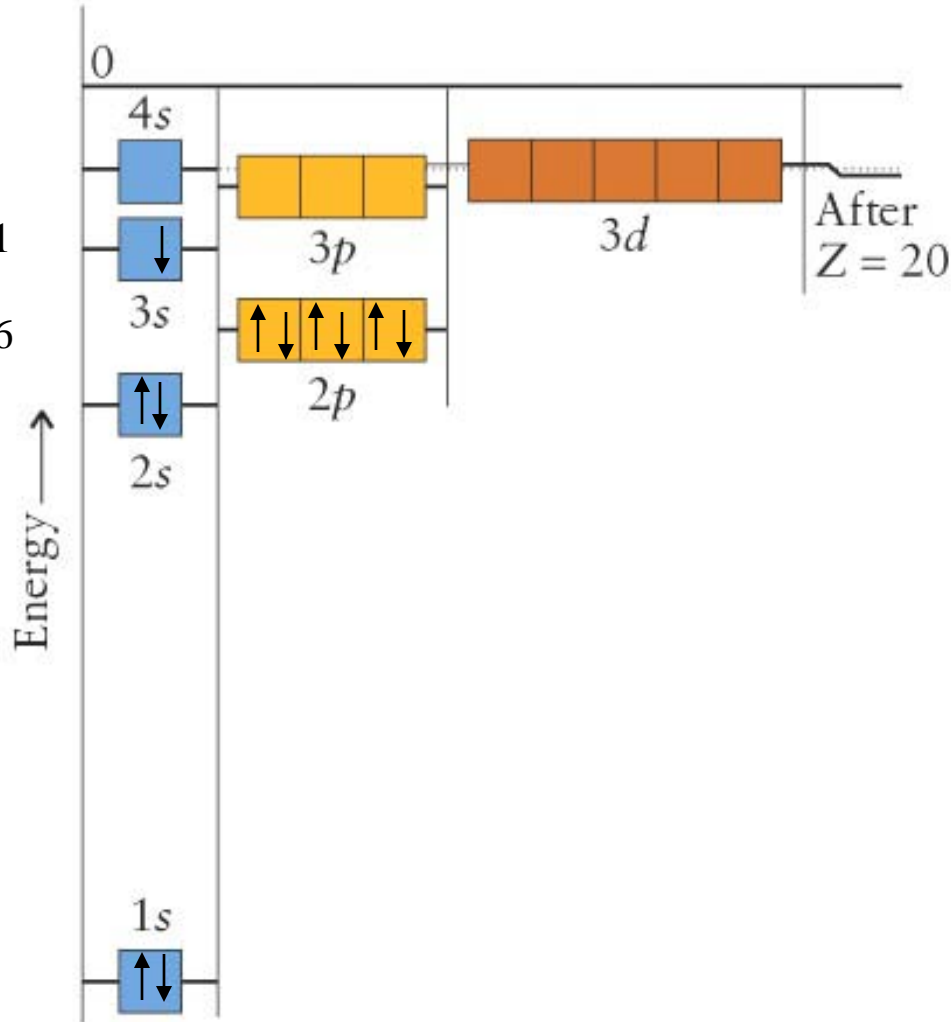
Pauliprincipen – Hunds regel

Pauli: Varje elektron i en atom har en unik uppsättning kvanttal \Leftrightarrow max två elektroner per orbital och då med antiparallellt (parat) spin

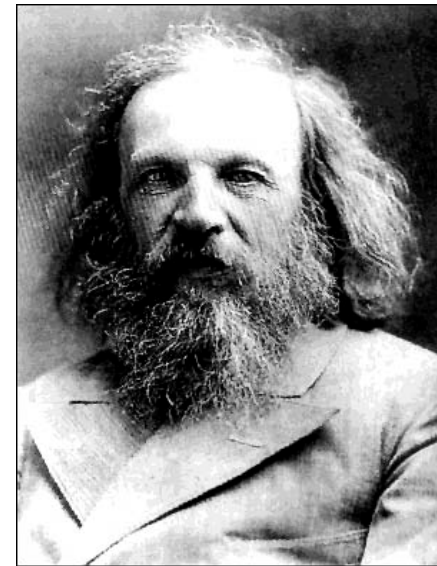
Hund: Då två elektroner har samma biquanttal strävar de efter att, om möjligt, ha parallellt spin

Aufbauprinzipien

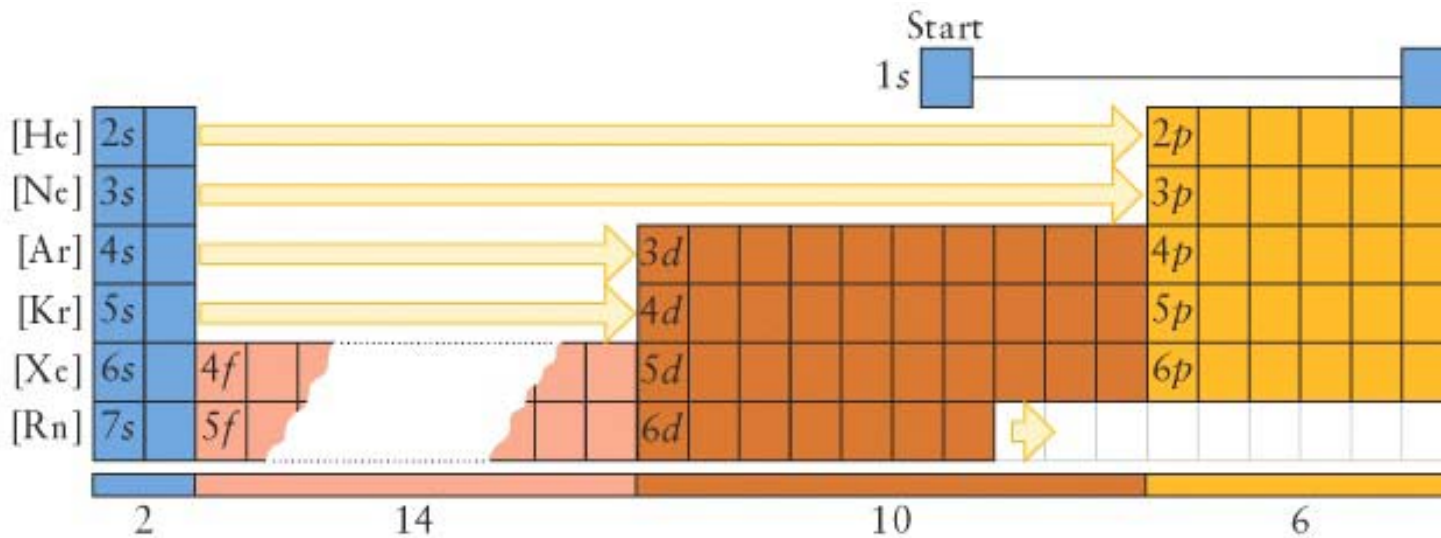
Pauliprinzipien
Hunds regel



Periodiska systemet



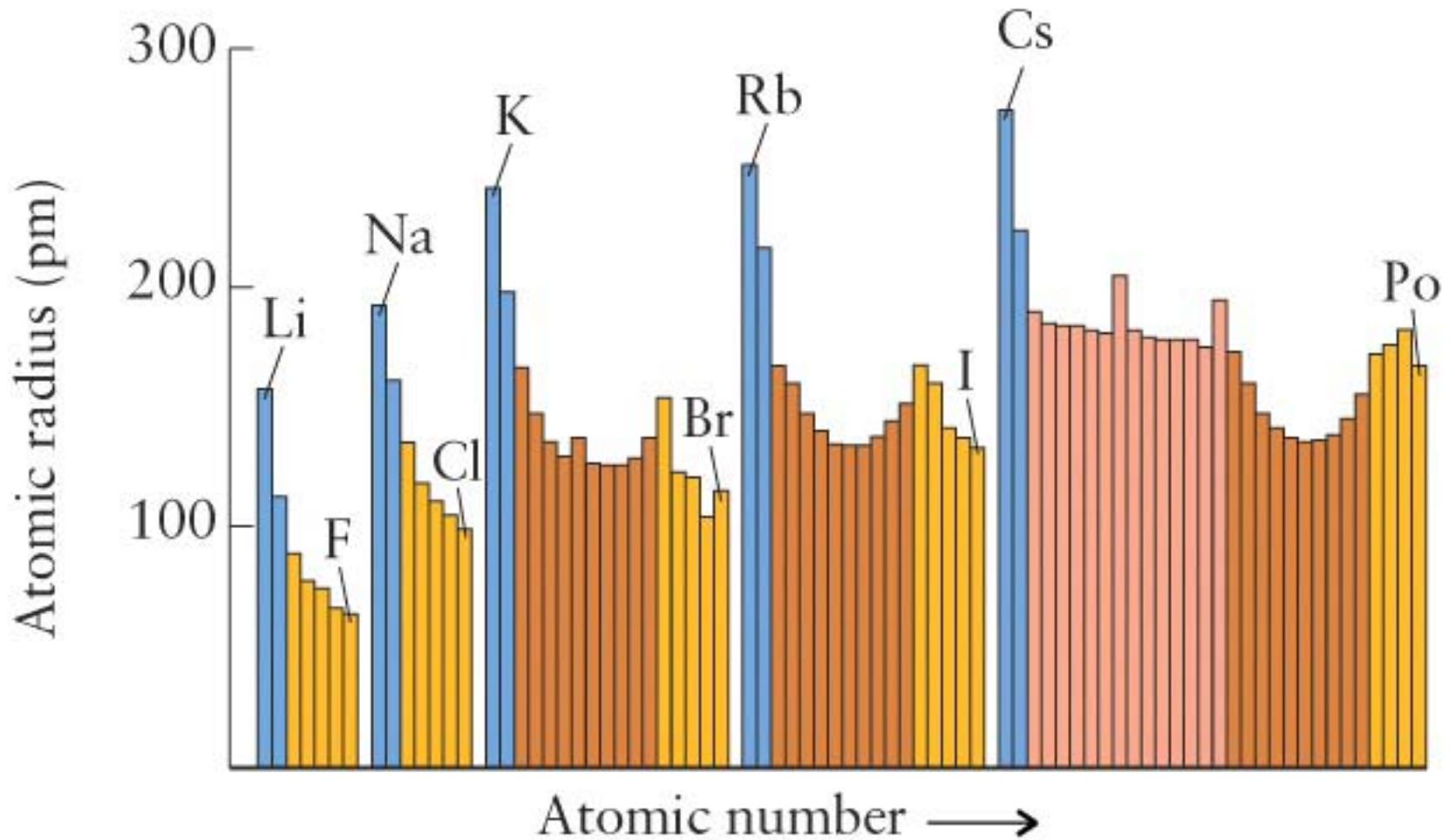
Dmitri Mendeleev



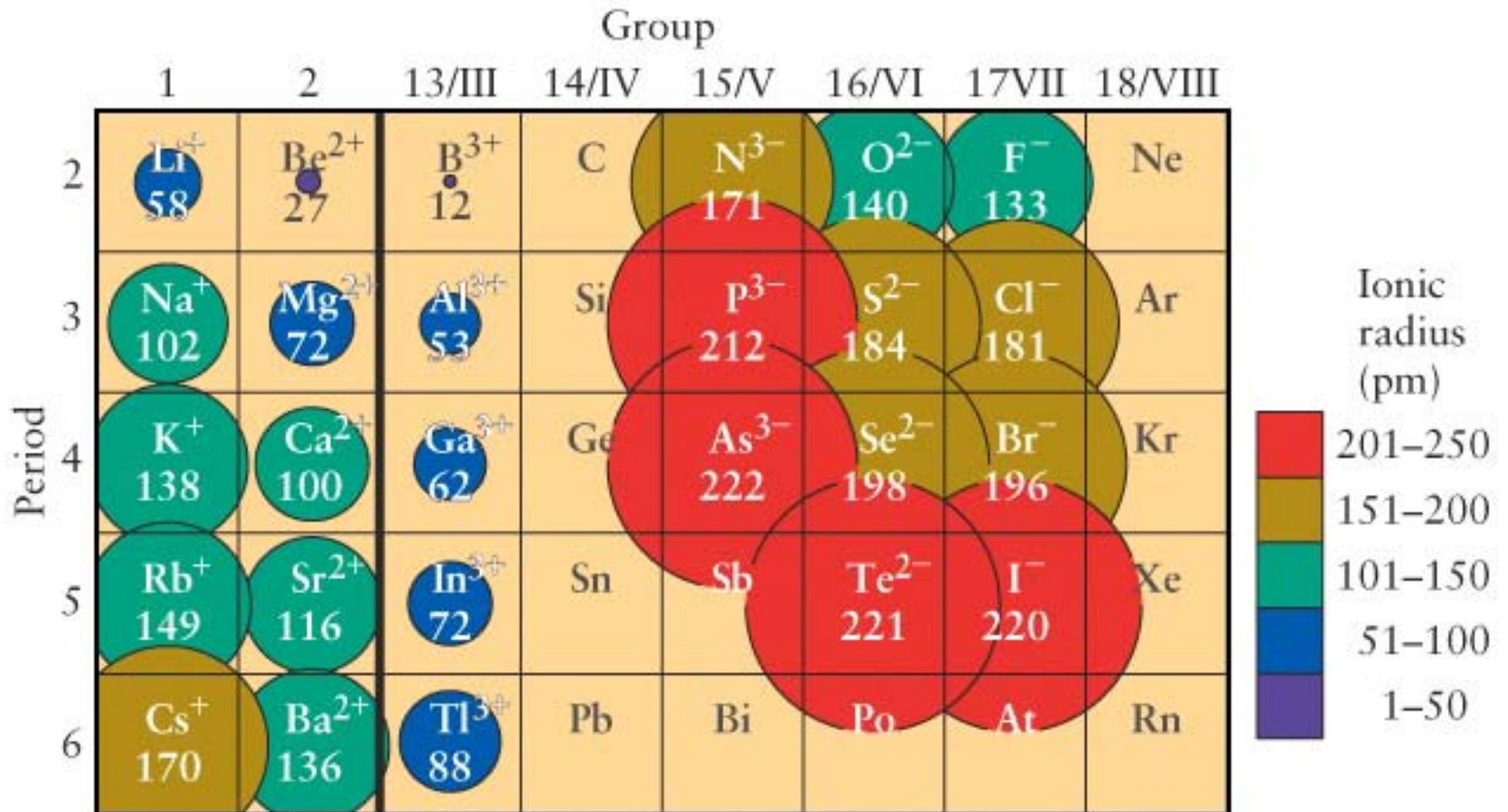
Periodiska egenskaper hos grundämnen

- Atomradier
 - Minskar från vänster till höger, ökar uppifrån och ned
- Jonradier
 - Anjoner större än katjoner, minskar från vänster till höger, ökar uppifrån och ner
- Jonisationsenergies, $M(g) \rightarrow M^+(g) + e^-$
 - Energin det kostar att ta bort en elektron. Ökar från vänster till höger
- Elektronaffiniteter, $A(g) + e^- \rightarrow A^-(g)$
 - Energin som frigörs. Mest energi frigörs vid bildandet av halogenanjoner och anjoner av syre och svavel

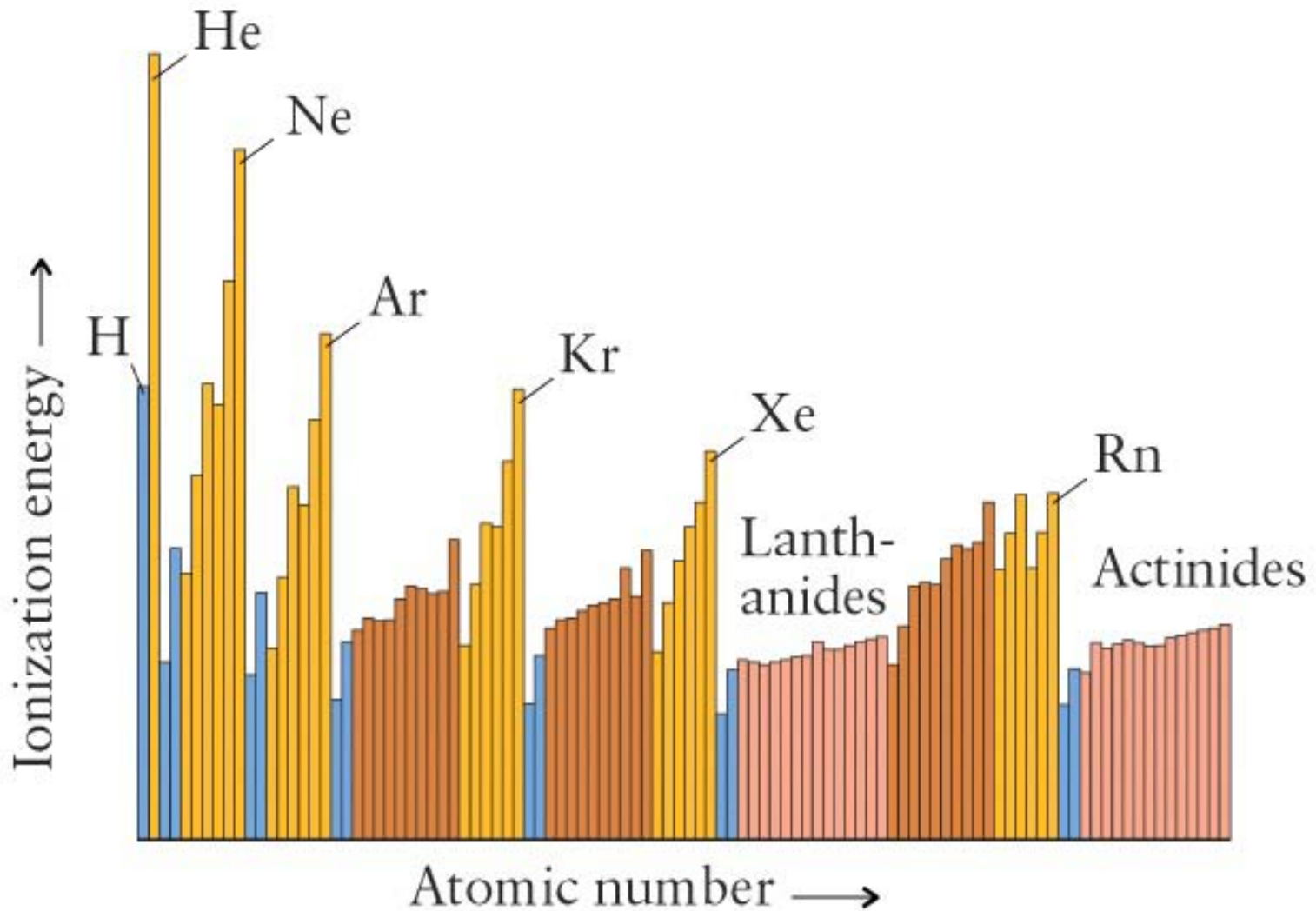
Atomradier



Jonradier



Jonisationsenergi



Elektronaffinitet

		Group						18/VIII	
		1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	He
									<0
2		Li +60	Be ≤0	B +27	C +122	N -7	O +141 -844	F +328	Ne <0
3		Na +53	Mg ≤0	Al +43	Si +134	P +72	S +200 -532	Cl +349	Ar <0
4		K +48	Ca +2	Ga +29	Ge +116	As +78	Se +195	Br +325	Kr <0
5		Rb +47	Sr +5	In +29	Sn +116	Sb +103	Te +190	I +295	Xe <0
6		Cs +46	Ba +14	Tl +19	Pb +35	Bi +91	Po +174	At +270	Rn <0

H
+73

Electron affinity (kJ·mol⁻¹)

- >300
- 200–300
- 100–200
- 0–100
- <0