

## Atomska fizika

### Atom vodika

- Schrödingerova jednadžba za elektron u polju jezgre naboja Ze ( $Z>1$ )

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi = 0$$

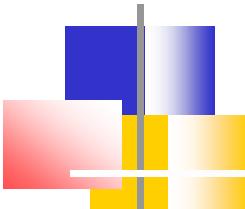
- Valna funkcija u sfernom koordinatnom sustavu s ishodištem u jezgri

$$\Psi = \Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$$

- Kvantni broj  $n$  naziva se ***glavni kvantni broj*** i određuje energiju elektrona u polju jezgre

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}, \quad n=1,2,3,\dots$$

- U slučaju vodikova atoma ( $Z=1$ ) ovaj izraz se podudara s izrazom za energiju elektrona u Bohrovom modelu atoma vodika.
- Orbitalni kvantni broj***  $l$  određuje iznos momenta količine gibanja elektrona



- Za određeni  $n$  moguća su rješenja Schrödingerove jednadžba za sljedeće vrijednosti  $l$ -a

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

- Za određenu vrijednost  $l$ -a **magnetski kvantni broj** poprima  $2l+1$  vrijednosti

$$m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

- Ukupna degeneracija  $n$ -tog energijskog nivoa iznosi

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

- U spektroskopiji stanja s  $l=0$  nazivaju se  $s$  stanja, a s  $l=1, 2, 3, p, d, f$  stanja.
- Prema ovoj notaciji moguća su stanja

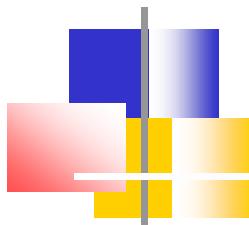
$1s$

$2s, 2p$

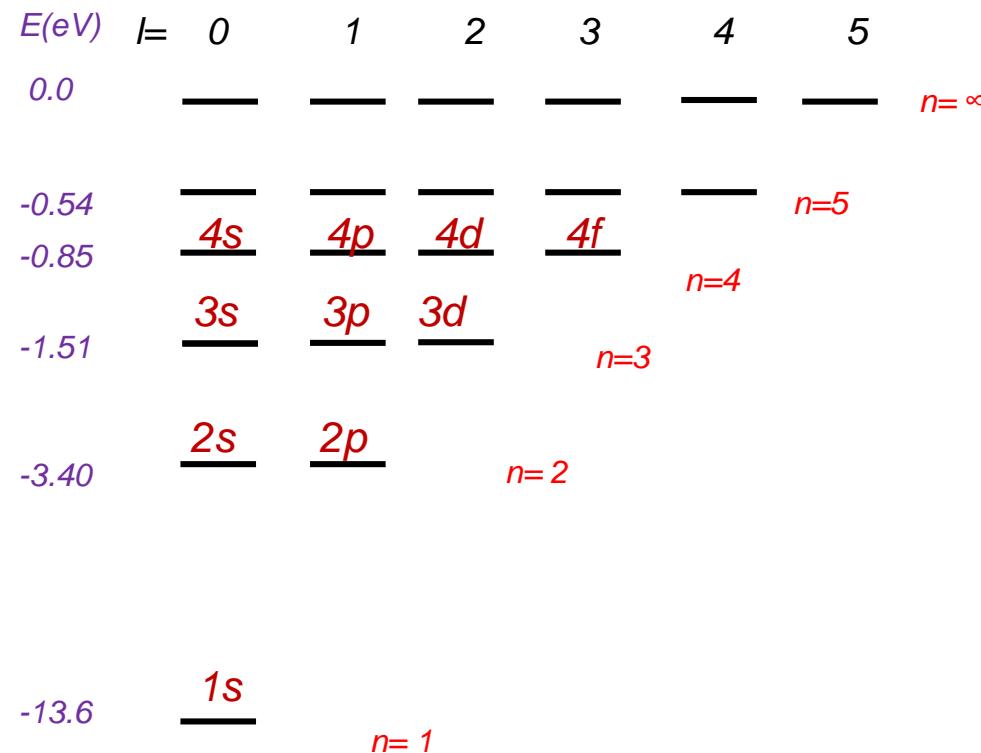
$3s, 3p, 3d$

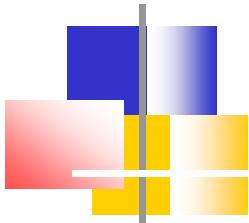
$4s, 4p, 4d, 4f$

...



- U slučaju vodika spektar je prikazan na slici





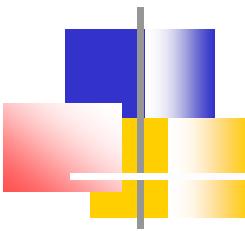
- Valne funkcije osnovnog i prvih pobuđenih stanja su

$$\Psi_{1,0,0} = a^{-3/2} 2e^{-r/a} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

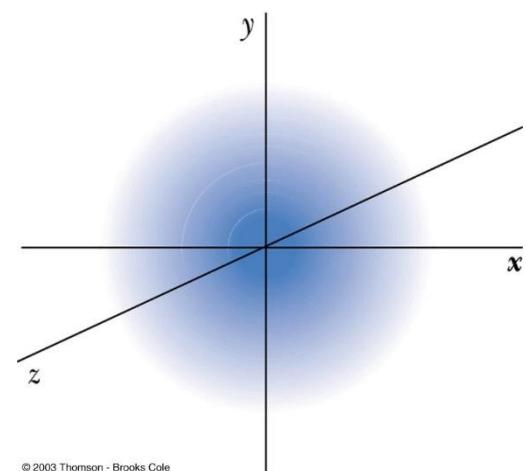
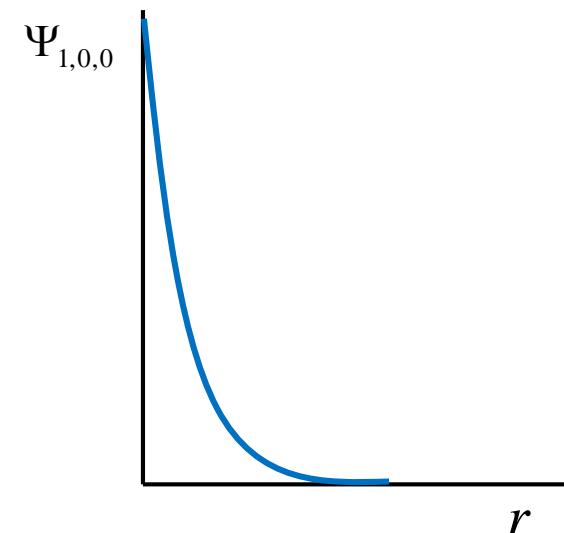
$$\Psi_{2,0,0} = a^{-3/2} \frac{\sqrt{2}}{2} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

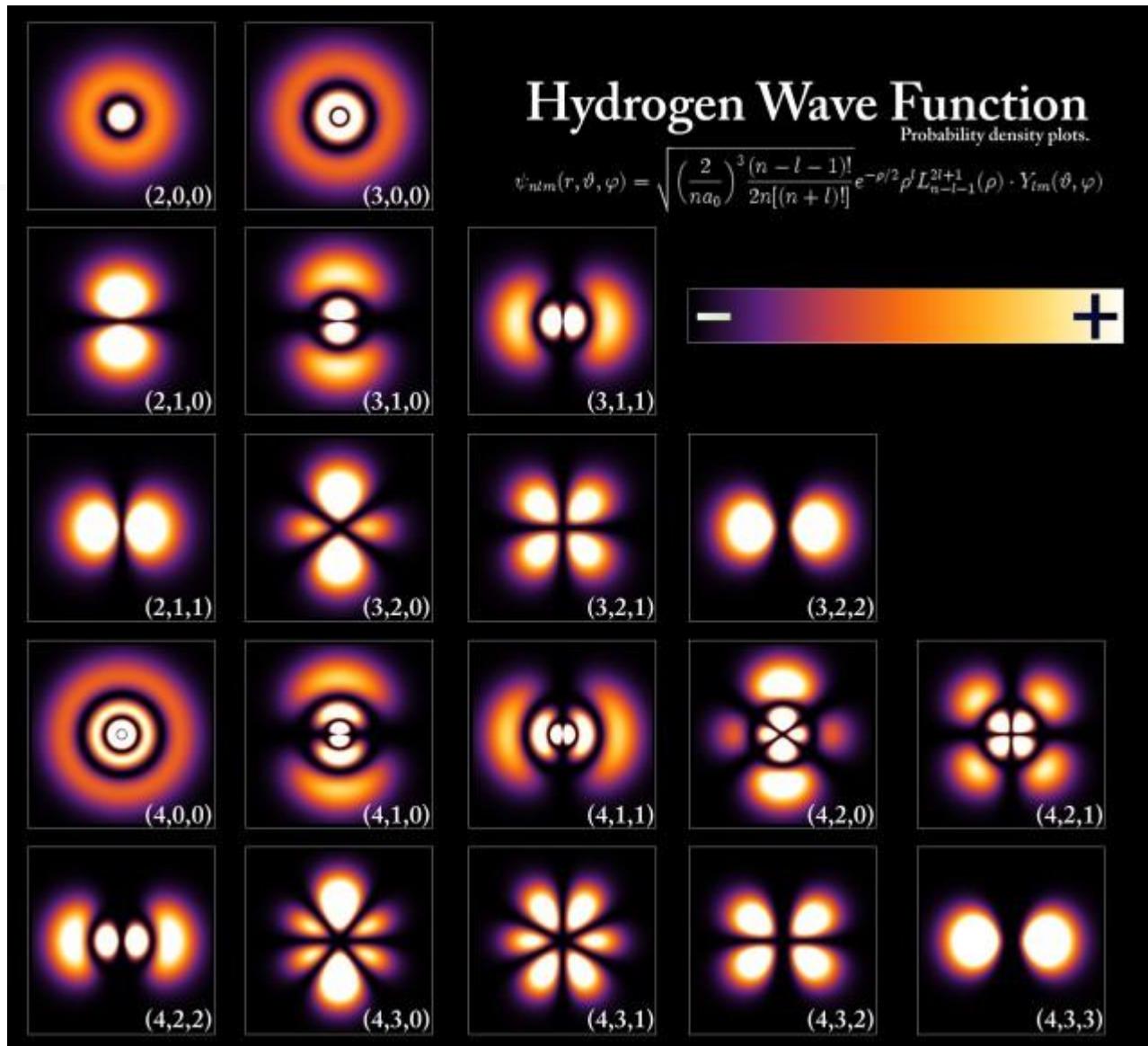
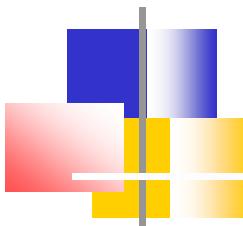
$$\Psi_{3,1,0} = a^{-3/2} \frac{8\sqrt{6}}{27} \left[ \frac{r}{a} - \frac{1}{6} \left( \frac{r}{a} \right)^2 \right] e^{-\frac{r}{3a}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$a = \frac{a_0}{Z} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Zm_e e^2}$$

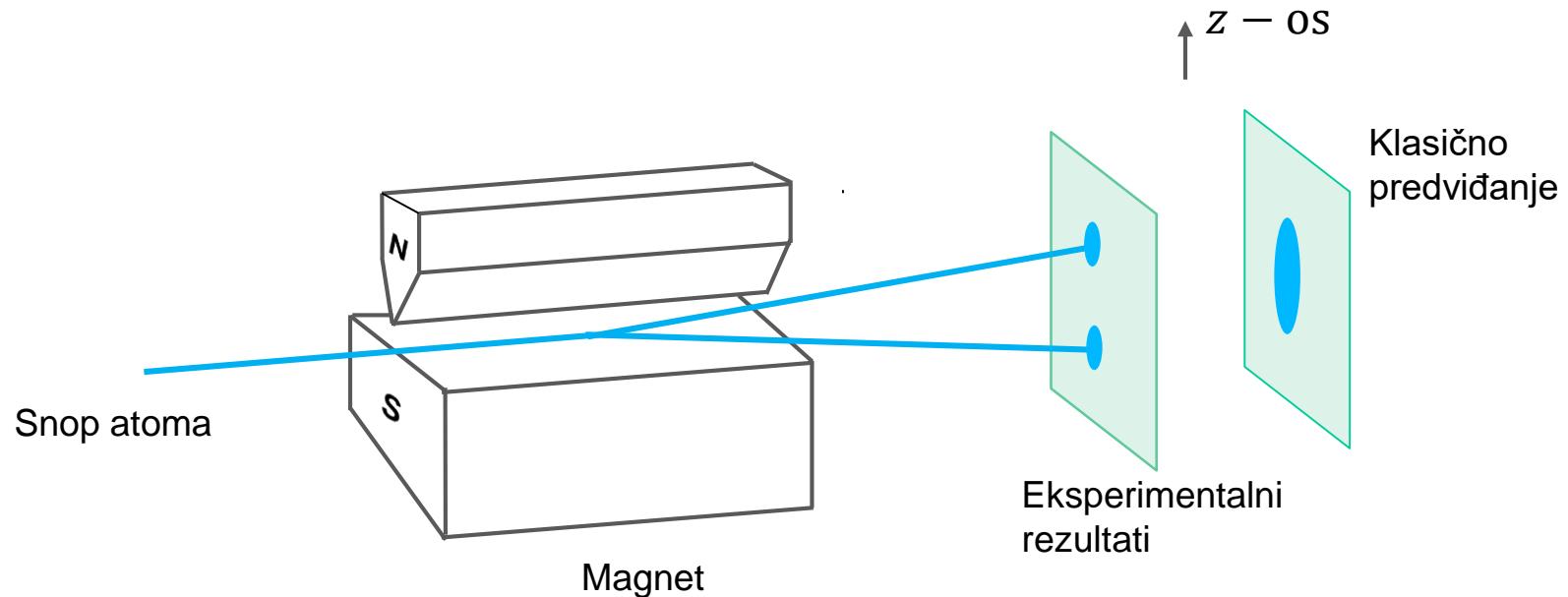


- Graf prikazuje rješenje valne jednadžbe za vodik u osnovnom stanju
  - Krivulja eksponencijalno pada
- *Vjerojatnost* nalaženja elektrona na nekoj udaljenosti od jezgre pada kako  $r$  raste
- Valna funkcija vodikovog atoma u osnovnom stanju je simetrična
  - Elektron se može naći u sferno simetričnom području oko jezgre
- Rezultat je interpretiran promatrajući elektron kao oblak koji okružuje jezgru

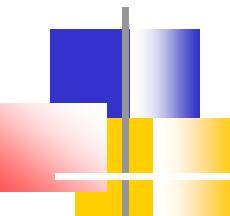




## Stern-Gerlachov eksperiment. Spin



- 1921. godine **Stern i Gerlach** su propustili snop atoma kroz nehomogeno magnetsko polje
- Po zakonima **klasične fizike** očekivali bi **kontinuiranu sliku** na zastoru, međutim opaženo je cijepanje snopa zbog prolaska kroz nehomogeno magnetsko polje



- Potencijalna energija magnetskog dipolnog momenta  $\vec{p}_m$  u magnetskom polju je

$$V = -\vec{p}_m \cdot \vec{B}$$

- U magnetskom polju na magnetski dipolni moment djeluje sila

$$\vec{F} = -\nabla V = (\vec{p}_m \cdot \nabla) \vec{B}$$

- Ako je magnetsko polje u z smjeru i ovisi samo o z koordinati, gornji izraz postaje

$$F_z = p_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

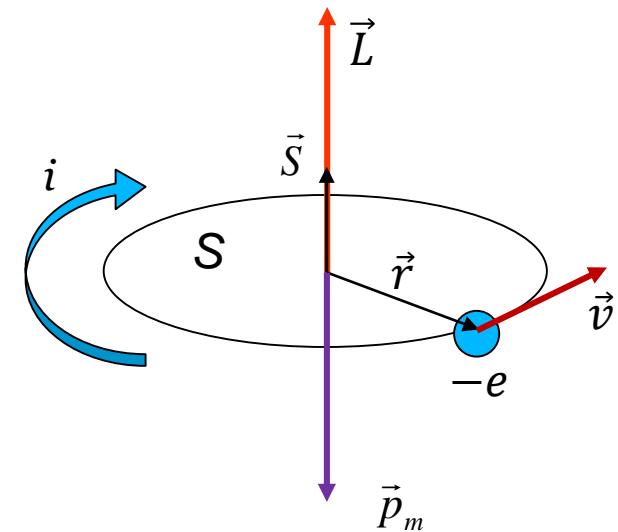
- Dipolni moment je

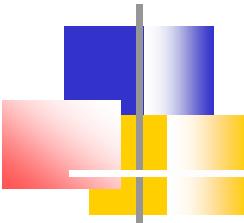
$$\vec{p}_m = i \vec{S}$$

gdje je  $i$  struja koja opisuje površinu  $S$

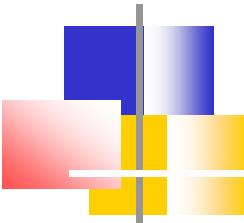
- Ako struju čini elektron čije vrijeme ophoda ruba površine  $S$  iznosi  $T$ , dipolni moment postaje

$$\vec{p}_m = -e \vec{S} / T$$

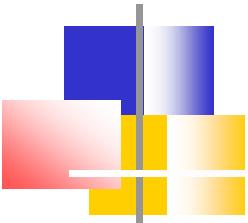




- Ako je centralna sila uzrok gibanja naboja po zatvorenoj putanji, plošna brzina  $S/t$  je konstanta gibanja, a s momentom količine gibanja vezana je relacijom
- Stoga se dobije  $\vec{p}_m = -\frac{e}{2m} \vec{L}$
- Prema **kvantnoj mehanici** projekcija momenta količine gibanja može poprimiti  $2l+1$  vrijednosti, gdje je  $l$  vrijednost orbitalnog kvantnog broja
- Ovisno o vrijednosti projekcije momenta količine gibanja atom može trpjeti jednu od  $2l+1$  vrijednosti sile. **Na zastoru bi se trebao pojaviti neparan broj linija.**
- Stern i Gerlach su uočili da neki atomi, kao atomi srebra i vodika, čine **paran broj linija** (srebro i vodik čine dvije linije) na zastoru
- Ovaj rezultat je u suprotnosti s pretpostavkom da čitav moment količine gibanja potječe od orbitalnog gibanja elektrona (po klasičnoj fizici i kvantnoj mehanici dosad)



- 1925. godine **S. Goudsmit i G. Uhlenbeck** prepostavili su da stanje elektrona nije potpuno opisano valnom funkcijom, već elektron ima još jednu veličinu koja određuje njegovo kvantno stanje, a to je **spin** (W. Pauli)
- Ukupni moment količine gibanja je zbroj orbitalnog momenta količine gibanja  $\vec{L}$  i spinskog momenta količine gibanja
- Za razliku od orbitalnog momenta količine gibanja, iznos spina je **karakteristika čestice** kao što su masa i naboј
- Spin čestice može biti cijelobrojan  $s = 1, 2, 3, \dots$   
ili polucijelobrojan  $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$
- Čestice s cijelobrojnim spinom nazivamo **bozoni**, a s polucijelobrojnim **fermioni**
- Projekcija spina na istaknute osi može poprimiti vrijednosti
$$s_z = -s, -s+1, \dots, s-1, s$$
- U slučaju polucijelobrojnog spina postoji paran broj projekcija spina

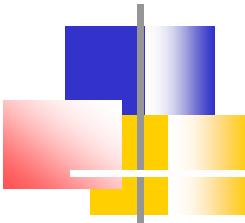


- Spin elektrona iznosi  $1/2$
- Ako ukupni moment količine gibanja potječe od spina jednog elektrona, tada u Stern-Gerlachovom eksperimentu postoje dvije linije (srebro i vodik imaju jedan vanjski elektron kojem je  $l=0$ , pa nema orbitalni moment količine gibanja)
- S obzirom da spin nije sadržan u Schrödingerovoj jednadžbi, kvantno stanje elektrona određeno je s četiri kvantna broja. Tri potječu iz Schrödingerove jednadžbe, dok četvrti određuje projekciju spina na istaknutu os:  $n, l, m, s_z$
- Vodikov atom s uključenim spinom u magnetskom polju  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{L}}_z + g \hat{\mathbf{S}}_z)$   
$$g = 2, \quad g - faktor$$
- Magnetski dipolni moment elektrona je približno jednak Bohrovom magnetonu
- Spinski magnetski moment 
$$\vec{M} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$
 
$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \cdot 10^{-24} J/T$$

## Paulijev princip isključenja. Razdioba elektrona po stanjima

- W. Pauli-princip isključenja: **dva fermiona ne mogu biti u istom kvantnom stanju**
- Paulijev princip: **dva elektrona u atomu ne mogu nikada biti u istom kvantnom stanju**
  - Drugim riječima, dva elektrona u istom atomu ne mogu imati iste vrijednosti  $n, l, m, s_z$
- 1. Vodik (jedan elektron),  $1s^1$
- 2. Helij (dva elektrona),  $1s^2$
- 3. Litij (tri elektrona),  $1s^2 2s^1$
- S obzirom da je degeneracija n-tog novoga  $n^2$ ,  $2n^2$  je najveći broj elektrona koji mogu dijeliti glavni kvantni broj n





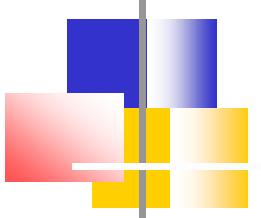
- U spektroskopiji se stanja s istim glavnim kvantnim brojem nazivaju **ljuske** i označavaju

K	L	M	N	O	P	R	
n	1	2	3	4	5	6	7

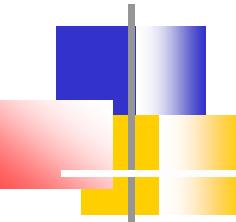
- Stanja s istim orbitalnim kvantnim brojevima nazivaju se u spektroskopiji **podljuske**. Broj stanja unutar podljuske je  $2(2l+1)$

podljuska	s	p	d	f	g
broj stanja	2	6	10	14	18

- Popunjena podljuska nema ni orbitalnog ni spinskog momenta količine gibanja. Stoga popunjene ljuske ne utječu na ukupni angулarni ni ukupni spinski moment količine gibanja



Ijuska	$n$	$l$	$m$	$s_z$	podljuska
K	1	0	0	$\uparrow\downarrow$	1s
L	2	0	0	$\uparrow\downarrow$	2s
		1	-1	$\uparrow\downarrow$	2p
		1	0	$\uparrow\downarrow$	
		1	1	$\uparrow\downarrow$	
M	3	0	0	$\uparrow\downarrow$	3s
		1	-1	$\uparrow\downarrow$	3p
		1	0	$\uparrow\downarrow$	
		1	1	$\uparrow\downarrow$	
	2	-2		$\uparrow\downarrow$	3d
		-1		$\uparrow\downarrow$	
		0		$\uparrow\downarrow$	
		1		$\uparrow\downarrow$	
		2		$\uparrow\downarrow$	



## Mendeljev sistem periodičnih svojstava elemenata

- **Perioda periodnog sistema elemenata** je horizontalni niz u periodnom sistemu elemenata. Sa povećanjem atomskog broja, elektronski nivoi se popunjavaju na sljedeći način:

1s  
2s        2p  
3s        3p  
4s 3d 4p  
5s 4d 5p  
...

- Zbog međuelektronskog djelovanja energija 4s stanja je niža od 3d elektronskih stanja
- Četvrta perioda počinje s kalijem (K) koji ima 4s elektron. Nakon što se popuni 4s podljuska, počinje se popunjavati 3d podljuska. 10 elemenata koji imaju 3d elektrone, ali ne i 4p elektrone nazivaju se **prijelazni elementi** (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu , Zn)
- Slično se događa i s elementima sljedećih perioda

## Mendeljev sistem periodičnih svojstava elemenata

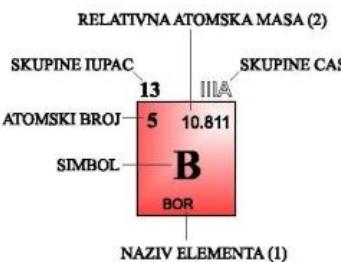
Paulijev princip isključenja omogućava tumačenje periodičnih svojstava elemenata

Atom	1s	2s	2p	Elektronska konfiguracija 2. periode
Li				$1s^2 2s^1$
Be				$1s^2 2s^2$
B				$1s^2 2s^2 2p^1$
C				$1s^2 2s^2 2p^2$
N				$1s^2 2s^2 2p^3$
O				$1s^2 2s^2 2p^4$
F				$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne				$1s^2 2s^2 2p^6$

**Hundovo pravilo:** Energijski je povoljnija konfiguracija da elektroni popunjavaju različite orbitale s nesparenim spinovima nego istu orbitalu sa sparenim spinovima.  
(Vidljivo kod C i N p orbitala.)

PERIODA	SKUPINA	
1	1 IA	1 1.0079 H VODIK
2	2 IIA	3 6.941 Be BERILIJ
3	11 IIIB 12 IVA	11 22.990 Na MAGNEZIJ
4	19 IVB 20 VIB	19 39.098 K KALIJ
5	37 VIB 38 VIIB	37 85.468 Rb RUBIDIJ
6	55 VIIB 56 VIIIB	55 132.91 Cs CEZIJ
7	87 VIIIB 88 VIIIIB	87 (223) Fr FRANCIJ

# PERIODNI SUSTAV ELEMENATA



Metali	Polumetali	Nemetali
Alklijiski metali		Halkogeni elementi
Zemnoelkaljiski metali		Halogeni elementi
Prijelazni elementi		Plemeniti plinovi
Lantanoidi		
Aktinodi		

AGREGATNO STANJE (100 °C; 101 kPa)

Ne - plin      Fe - krutina  
 Ga - tekućina      Tc - sintetski

13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
5 10.811 B BOR	6 12.011 C UGLJK	7 14.007 N DUŠIK	8 15.999 O KISIK	9 18.998 F FLUOR	10 20.180 Ne HELIJ
13 26.982 Al ALUMINIJ	14 28.086 Si SILICIJ	15 30.974 P FOSFOR	16 32.085 S SUMPOR	17 35.453 Cl KLOR	18 39.948 Ar ARGON
13 69.723 Ga GALIJ	14 72.64 Ge GERMANIJ	15 74.922 As ARSEN	16 78.96 Se SELENIJ	17 85.904 Br BROM	18 83.80 Kr KRIPTON
13 121.76 Sb KOSITAR	14 127.60 Te ANTIMON	15 126.90 I TELURIJ	16 126.90 Xe KSENON	17 126.90 At ASTAT	18 131.29 Rn RADON
13 180.95 Hf HAFNIJ	14 183.84 Ta TANTAL	15 186.21 Re VOLFRAM	16 190.23 Os RENIJ	17 192.22 Ir OSMIJ	18 196.97 Pt PLATINA
13 190.23 Ru RUTENIJ	14 192.22 Rh RODIJ	15 195.08 Pd PALADIJ	16 196.97 Ag SREBRO	17 200.59 Cd KADMIJ	18 204.38 In INDIJ
13 192.22 Os OSMIJ	14 195.08 Ir IRIĐU	15 196.97 Pt PLATINA	16 196.97 Au ZLATO	17 207.2 Hg ŽIVA	18 207.2 Tl TALIJ
13 196.97 Ir IRIĐU	14 196.97 Pt PLATINA	15 196.97 Au ZLATO	16 207.2 Hg ŽIVA	17 208.98 Pb OLOVO	18 208.98 Bi BIZMUT
13 196.97 Pt PLATINA	14 196.97 Au ZLATO	15 196.97 Hg ŽIVA	16 208.98 Bi BIZMUT	17 208.98 Po POLONIJ	18 210.0 At ASTAT
13 196.97 Au ZLATO	14 196.97 Hg ŽIVA	15 196.97 Po POLONIJ	16 208.98 At ASTAT	17 210.0 Rn RADON	18 222.0 Lu LUTECIJ
13 196.97 Hg ŽIVA	14 196.97 Po POLONIJ	15 196.97 At ASTAT	16 208.98 Rn RADON	17 210.0 Lu LUTECIJ	18 222.0 Ununkvadij UNUNKVADIJ

(1) Hrvatska nomenklatura anorganske kemije, ed. V. Simeon, Školska knjiga, Zagreb, 1996. Pure Appl. Chem., 69, 2471-2473 (1997) za imena elemenata od rednog broja 104 do 109.

(2) Pure Appl. Chem., 73, No. 4, 667-683 (2001)

Relativne atomske mase su zakoručene na pet značajnih znamenki. Za elemente koji nemaju stabilnih nuklidika u zagradama je dan maseeni broj najduže živućeg izotopa. Izuzetak su Th, Pa i U koji imaju karakterističan izotopski sastav u zemljinoj kori.

57 138.91 La LANTAN	58 140.12 Ce CERIJ	59 140.91 Pr PRASEODIMIJ	60 144.24 Nd NEODIMIJ	61 (145) Pm PROMETIJ	62 150.36 Sm SAMARIJ	63 151.96 Eu EUROPIJ	64 157.25 Gd GADOLINIJ	65 158.93 Tb TERBIJ	66 162.50 Dy DISPROZIJ	67 164.93 Ho HOLMIJ	68 167.26 Er ERBIJ	69 168.93 Tm TULIJ	70 173.04 Yb ITERBIJ	71 174.97 Lu LUTECIJ
89 (227) Ac AKTINIJ	90 232.04 Th TORIJ	91 231.04 Pa PROTAKTINIJ	92 238.03 U URANIJ	93 (237) Np NEPTUNIJ	94 (244) Pu PLUTONIJ	95 (243) Am AMERICIJ	96 (247) Cm KURIJ	97 (247) Bk BERKELIJ	98 (251) Cf KALIFORNIJ	99 (252) Es EINSTEINIJ	100 (257) Fm FERMIIJ	101 (258) Md MENDELEVIIJ	102 (259) No NOBELIIJ	103 (262) Lr LAWRENCIJ