

# predavanje 11: Struktura atoma

## 1. Navedite Bohrove postulate (obavezno).

**Bohrovi postulati** za model atoma:

- 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, elektron ne zrači energiju.
- U dopuštenim putanjama elektron ima energiju određenu jednačbama gibanja i kulonskim potencijalom. Ako elektron prelazi iz putanje s energijom  $E_n$  u putanju s energijom  $E_m$ , emitira se zračenje frekvencije:

$$h\nu = E_n - E_m$$

## 2. Koji kvantni brojevi jednoznačno određuju stanje elektrona u atomu? (obavezno)

- Rješavanjem Schrödingerove jednačbe dobiju se kvantni brojevi koji jednoznačno specificiraju stanje elektrona u atomu:
- n*-glavni kvantni broj** određuje energiju elektrona u atomu:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{mZ^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \quad n = 1, \dots, \infty$$

<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<sub>l</sub>*-magnetski kvantni broj** određuje projekciju momenta količine gibanja:

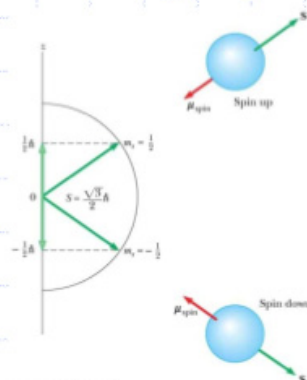
$$L_z = m_l \hbar$$

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

- 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

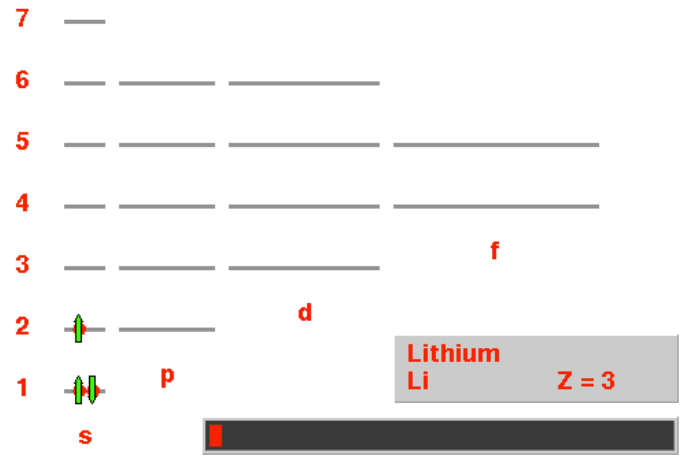
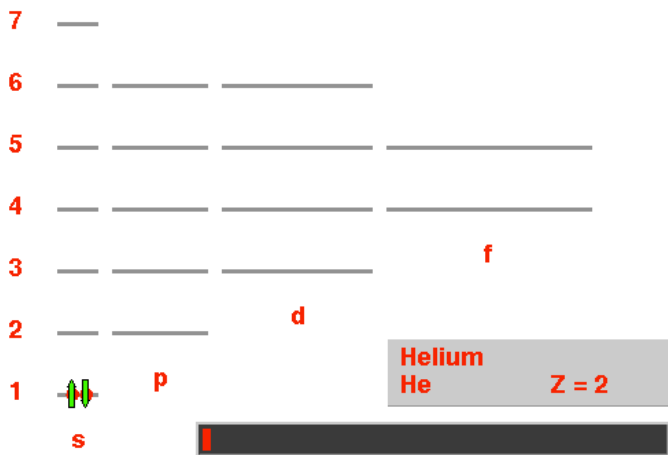
### 3. Kako glasi Paulijev princip isključenja ilustrirajte ga na primjeru atoma helija (Z=2) i litija (Z=3) (obavezno)?

Četiri kvantna broja  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ ,  $m_s$  određuju pojedino stacionarno stanje atoma.

U složenijim atomima gibanja elektrona (energije) su u stanovitom 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).**

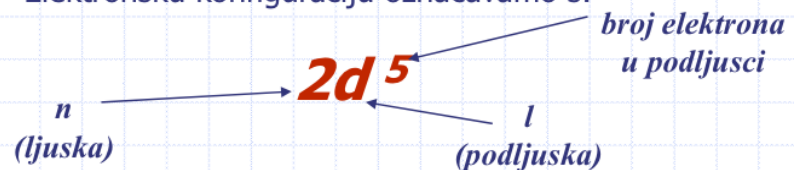
Paulijevo načelo, uz razumijevanje kvantnih brojeva koji Jednoznačno definiraju stanje svakog pojedinog elektrona u atomu, objašnjava periodni sustav elemenata.



#### Maksimalni broj elektrona u pojedinoj ljusci

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

➤ Elektronsku konfiguraciju označavamo s:



### 4. Navedite Bohrove postulate i iz njih izvedite izraze za energije i polumjere stacionarnih stanja vodikova atoma.

#### Bohrovi postulati:

- 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:

$$L = m v r = n \frac{h}{2\pi} = n \hbar \quad ; \quad n = 1, 2, \dots$$

- Gibajući se dopuštenom putanjom, elektron ne zrači energiju.
- U dopuštenim putanjama elektron ima energiju određenu jednadžbama gibanja i kulonskim potencijalom. Ako elektron prelazi iz putanje s energijom  $E_n$  u putanju s energijom  $E_m$ , emitira se zračenje frekvencije:

$$h\nu = E_n - E_m$$

- Uzmemo li u obzir da kulonska sila između protona i elektrona uzrokuje centripetalnu silu potrebnu za gibanje elektrona po kružnici, dobivamo

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

Iz tog uvjeta i uvjeta  $L = m v r = n \frac{h}{2\pi} = n \hbar$  ;  $n = 1, 2, \dots$ , dobijamo:

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

$n$  – glavni kvantni broj

Kada je atom vodika u svome osnovnom stanju ( $n=1$ ), njegov elektron kruži po prvoj stazi. Iz ove zadnje relacije se može odrediti polumjer prve Bohrove kružne staze koji iznosi: 0.053 nm.

- Ukupna **energija** elektrona sastoji se od kinetičke i potencijalne:  $E=E_k+E_p$ , a kinetička energija na  $n$ -toj stazi iznosi:  $E_k=1/2 m v^2$ . Iz izraza za silu i polumjer dobivamo izraz za kinetičku energiju:

$$E_k = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2}$$

Potencijalnu energiju elektrona na  $n$ -toj kvantnoj stazi možemo odrediti izračunavajući rad pri pomaku elektrona iz beskonačnosti na udaljenosti  $r$  od jezgre:

$$E_p = \int_r^\infty F dr = \int_r^\infty \left( -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) dr = \left. \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right|_r^\infty = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

pa je ukupna energija na  $n$ -toj kvantnoj stazi:

$$E=E_k+E_p = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r} + \left( -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) \rightarrow E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

Energija osnovnog stanja iznosi  $E_1=-13.6$  eV.

## 5. Objasnite linijske spektre vodikova atoma: navedite eksperimentalno dobijene izraze za spektralne linije i kako su ti izrazi objašnjeni pomoću Bohrova modela atoma.

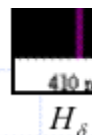
Užarena čvrsta tijela, tekućine i plinovi pri visokom tlaku i temperaturi emitiraju svjetlost s kontinuiranim valnim duljinama. Razrijeđeni plinovi i pare metala emitiraju diskretni -linijski spektar.

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

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)

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

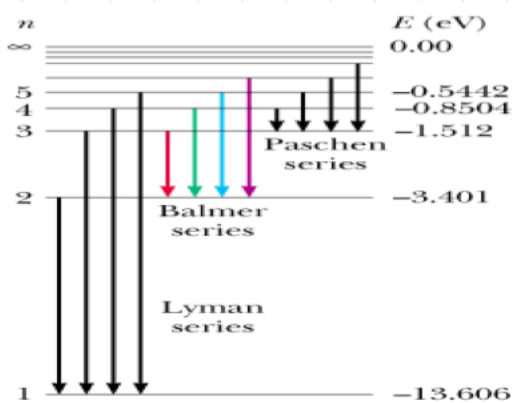
Brackettova serija (1922)

### 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
- ✓ Ovakvi eksperimentalni podaci koji se precizno daju matematičku opisati odražavaju određenu strukturu atoma!

## Objašnjenje linijskih spektara vodika



- Zanimljivo 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.

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

→

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

**Empirijska relacija**

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

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

### 6. Objasnite princip korespondencije klasične i kvantne fizike.

- 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 %.