

Utveckling mot vågbeskrivning av elektroner

En orientering

| | $s (l=0)$ | $p (l=1)$ | | | $d (l=2)$ | | | | $f (l=3)$ | | | | | | | |
|-----|-----------|-----------|-----------|-------|-----------|-----------|----------|-----------|---------------|-----------|------------|------------|-----------|------------------|-------------------|-------------------|
| | $m=0$ | $m=0$ | $m=\pm 1$ | | $m=0$ | $m=\pm 1$ | | $m=\pm 2$ | $m=0$ | $m=\pm 1$ | | $m=\pm 2$ | $m=\pm 3$ | | | |
| | s | p_z | p_x | p_y | d_{z^2} | d_{xz} | d_{yz} | d_{xy} | $d_{x^2-y^2}$ | f_{z^3} | f_{xz^2} | f_{yz^2} | f_{xyz} | $f_{z(x^2-y^2)}$ | $f_{x(x^2-3y^2)}$ | $f_{y(3x^2-y^2)}$ |
| n=1 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| n=2 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| n=3 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| n=4 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| n=5 | | | | | | | | | | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| n=6 | | | | | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| n=7 | | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |

Nikodemus Karlsson

Februari 2010

1.1 Bohrs Postulat

Niels Bohr (1885 - 1962) ställde utifrån iakttagelser upp fyra postulat gällande väteatomen ¹:

1. Elektronen rör sig i cirkelrunda banor runt atomkärnan, där den elektriska kraften (Coulomb-kraften mellan den negativt laddade elektronen och den positivt laddade kärnan) utgör centripetalkraften. Detta samband kan tecknas

$$F = \frac{mv^2}{r} = \frac{k \cdot e^2}{r^2}$$

2. Endast vissa omloppsbanor för elektronen är stabila (de andra är otillåtna), där inte elektronerna förlorar energi och faller in mot kärnan. (Enligt den klassiska mekaniken, som i någon mening utgör en motsats till kvantmekaniken, gäller att laddade partiklar som accelererar avger elektromagnetisk strålning varpå elektronen skulle förlora energi och som sagt falla in mot kärnan.)
3. När en elektron övergår från en högre energinivå till en lägre avges en foton med den våglängd som svarar mot energiskillnaden mellan energinivåerna.
4. Omkretsen på elektronens bana måste utgöra ett helt antal av elektronens de Broglie-våglängder, dvs

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{mv} \quad \text{eller} \quad mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Vänsterledets beteckningar:

m är elektronens massa

v är elektronens fart

r är elektronens avstånd från kärnan

Produkten av dessa tre faktorer kallas för elektronens *impulsmoment*.

Högerledets beteckningar:

h är Plancks konstant

n är ett heltal

1.2 Väteatomens energinivåer

Genom att kombinera ekvationen för elektronens radie (i Postulat #4) med den kinetiska energin för en elektron, kan man få fram ett uttryck för elektronens avstånd till kärnan för olika n . I det fall då $n = 1$ (den lägsta energinivån) gäller för väteatomen att avståndet²

$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m \cdot k \cdot e^2},$$

där a_0 (det värde på r som i postulat #4 svarar mot $n = 1$) kallas för Bohr-radien.

$a_0 \approx 0,0529$ nm. När väteatomen exciteras (energin ökar) så ökar avståndet mellan elektron och kärna. Energierna blir³

$$E_n = -\frac{k \cdot e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

där $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ (ϵ_0 är den elektriska konstanten), m är elektronens massa och h är Plancks konstant)

Det är dessa energinivåer som beskriver atomens tillstånd, och är alltså en matematisk modell av densamma. I vårt fall just nu är det elektronerna som avgör energinivån hos atomen.

1.3 Energinivåer som stående vågor

Louis de Broglie visade år 1924 att *alla* partiklar kan beskrivas som vågor med våglängden $\lambda = \frac{h}{mv}$. Erwin Schrödinger utvecklade år 1925 Bohrs iakttagelser och de Broglies parikelvågor till att omfatta även elektroner bundna intill en kärna. Det innebar att elektroner kunde beskrivas som stående vågor, att grundenerginivån svarade mot grundsvängningen och de högre energinivåerna mot respektive översvängning hos vågen.

Dessa energinivåer hos atomen har varit ett mycket framgångsrikt recept för att beskriva atomens energinivåer, och fungerar även på andra atomer än väte (vilket inte Bohr-modellen gör).

I en dimension skulle stående materievågor kunna se ut enligt nedanstående figurer, vilka är grafer av sinusfunktioner med olika amplitud och period⁴ (dessa svarar inte mot utseendet hos någon atom):

$n = 1$ ("grundtillstånd"):

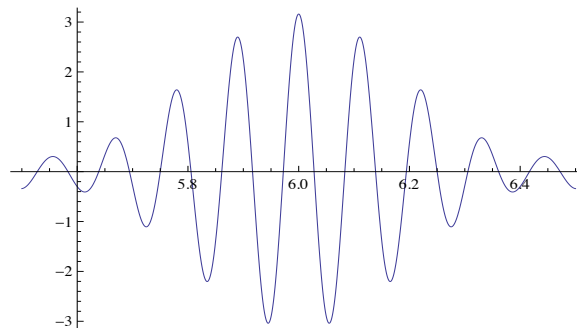


Fig. 1

$n = 2$ ("exciterat tillstånd"):

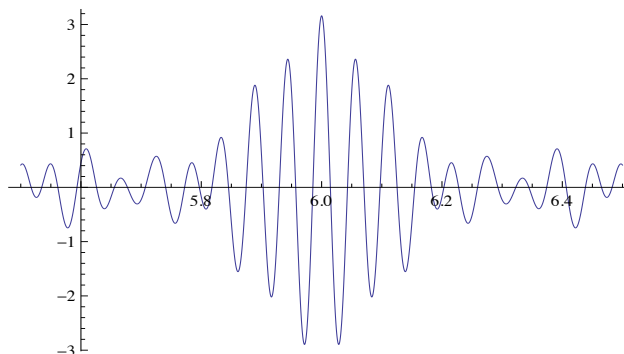


Fig. 2

Kvadrerar vi dessa vågfunktioner så erhåller vi följande grafer:

$n = 1$:

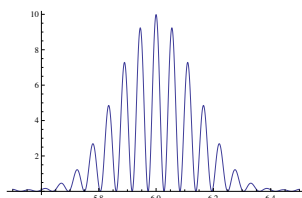


Fig. 3

$n = 2$:

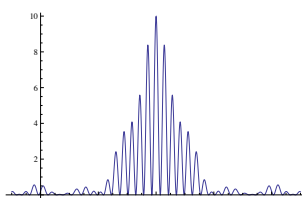


Fig. 4

Dessa kvadraters funktionsvärden är ett mått på sannolikheten⁵ för partikeln att befinna sig i ett område. För $n = 1$ ovan gäller att det är mest sannolikt att elektronen befinner sig runt $x = 6,0$ i detta exempel (som som sagt inte anknyter till något känt verkligt förhållande).

För atomer brukar man visa kvadraten på vågfunktionen som *orbitaler*. Dessa orbitaler visar inom vilket område man kan hitta elektronerna i en atom. För elektroner är orbitalerna sfäriska (helt enkelt en "boll") för olika värden på n ; de kallas *s*-orbitaler. Det innebär att elektronerna kommer att befinna sig i en sfär runt kärnan, men man kan aldrig veta var! Efter *s*-orbitalerna kommer *p*-orbitaler, *d*-orbitaler, *f*-orbitaler, *g*-orbitaler...

Vågfunktionerna är komplexvärda funktioner och består av en radiell del (avstånd från kärnan) och en vinkeldel (riktning från kärnan). Detta kan illustreras enligt, Fig. 5 och Fig. 6 nedan. Det ger en bild av hur elektronerna ligger spridda kring kärnan.

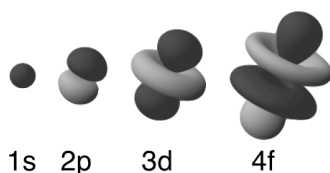


Fig. 5

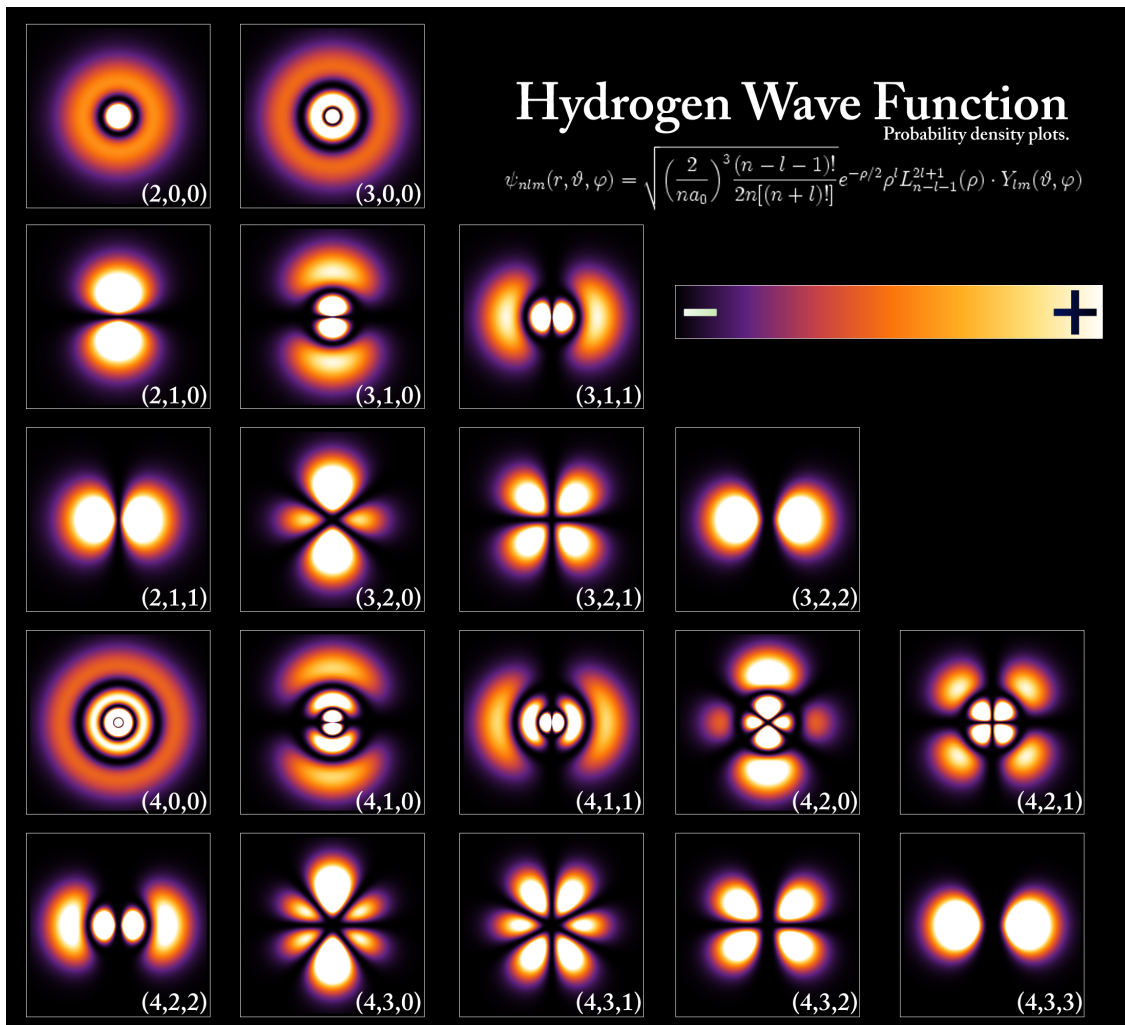


Fig. 6

Referenser

- (1): Strålning, atomer och molekyler, Hedman m.fl., Fysiska institutionen Uppsala Universitet, 2002: Sid. 20.
- (2): Physics for Scientists and Engineers, Fifth edition, Serway, Beichner, Saunders College Publishing, 2000: Sid 1306.
- (3): Physics for Scientists and Engineers, Fifth edition, Serway, Beichner, Saunders College Publishing, 2000: Sid 1306.
- (4): Strålning, atomer och molekyler, Hedman m.fl., Fysiska institutionen Uppsala Universitet, 2002: Sid. 104
- (5): Strålning, atomer och molekyler, Hedman m.fl., Fysiska institutionen Uppsala Universitet, 2002: Sid. 40

Bild på försättsblad:

http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Atomic_orbital&oldid=341780635

Fig. 1 – 4: Egengenerade grafer i Mathematica

Fig. 5: http://en.wikipedia.org/wiki/File:Electron_orbitals.svg

Fig. 6: http://sv.wikipedia.org/wiki/Fil:Hydrogen_Density_Plots.png

Samtliga bilder i verket är av licenstypen Public Domain.