Kvanttal

Huvudkvanttal

Som vi har sett exempel på, så kan man beskriva elektroner som vågfunktioner, och energinivåerna som atomen antar kan ses som översvängningar hos den stående våg som gör atomen stabil (som klassiskt beskrivs av att elektronen har en "bana utan energiföruster"). Dessa översvängningar svarar mot huvudkvanttalet n, där varje n motsvarar en energinivå för atomen. T ex har vi sett för väteatomen att energin uttrycks enligt $E_n = \frac{-13,6}{n^2}$ eV, där som sagt n kallas för *huvudkvanttal*, vars tillåtna värden är positiva heltal. I kemin brukar man tala om atomskal (K-skal, L-skal osv). Enligt modellen med kvanttal svarar $n = 1$ mot K-skalet och $n = 2$ mot L-skalet osv.

Bankvanttal

Det man egentligen gör när man studerar spektrum från atomer är att energiövergångarna visualiseras som en absorption eller emission av vissa våglängder (som precis svarar mot energiövergångarna). Det har då visat sig att man inte kan förklara alla energiövergångar enbart med hjälp av huvudkvanttalet. En egenskap som spelar roll för energin i en atom är det s.k impulsmomentet som en elektron besitter i och med att den rör sig i en bana. Detta impulsmoment L har en fysisk storlek som är kvantiserad enligt

$$L^2 = l(l+1)h^2/4\pi^2 \text{ där } l = 0, 1, 2, ..., n-1$$

Ju högre impulsmoment, desto högre energi har atomen. Kvantiseringen av L är helt enkelt l, och som synes ovan så kan det endast anta heltalsvärden mellan 0 och n - 1. Detta l kallas för bankvanttal, och svarar mot något som kallas sub-skal i atomen. Dessa sub-skal benäms s för $l = 0$, p för $l = 1$, d för $l = 2$ och f för $l = 3$ (s, p, d och f är förkortningar för vissa egenskaper hos atomspektrum hos alkalimetaller). Därefter benäms subskalen g, h... enligt alfabetisk ordning. Beroende av värdet på l förändras utseendet för det "rum" som anger sannolikheten att återfinna elektronen runt käärnan. Se fig. 16, sid. 316 i läroboken.

Det är värt att nämna att en foton (som emitteras eller absorberas i en energiövergång) svarar mot ett bankvanttal på $l = 1$. I samband med en energiövergång så måste det det totala impulsmomentet bevaras, vilket gör att bankvantalet förändras med en enhet pga fotonen som tillför eller bortför ett impulsmoment.

Magnetiskt kvanttal

För varje värde på l finns det ett s.k magnetiskt kvanttal som betecknas m_l. Det kallas magnetiskt kvanttal därför att det är först under inverkan av magnetfält som det går att skilja på de energinivåer som det ger upphov till. Vilka värden m_l kan anta beror på värdet på l. Om t ex $l = 2$ gäller att $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$ (dessa värden är de möjliga). Ju högre (mer positiva) värden, desto högre energi.

Elektronens spinn

Det fjärde kvanttalet som kommer sig utav vågmodellen är elektronens spinn (som kan ses som ett slags rotationsenergi hos elektronen). Detta spinn har en fysikalisk storlek som är kvantiserad enligt

$$s^2 = m_s(m_s + 1)h^2/4\pi^2, \text{ där } m_s = \pm\frac{1}{2}$$

Då spinnet enbart kan anta de två storlekarna enligt ovanstående kvantisering, säger man att spinnet är halvtaligt hos elektronen.

Pauli-principen

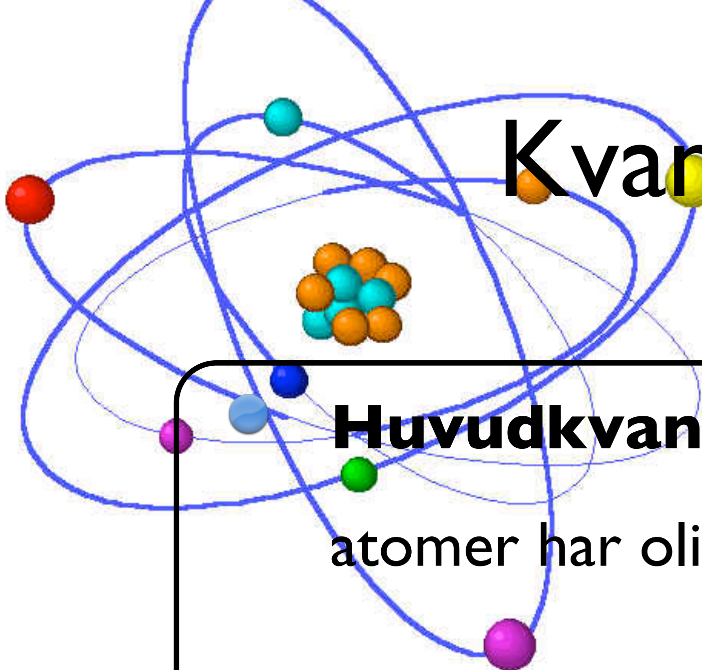
Pauli-principen säger att varje elektron har en unik kvanttalsuppsättning. Konsekvesen av detta blir att varje "skal" i atomen kan innehålla ett maximalt antal elektroner (eller mer korrekt uttryckt: för varje energinivå som huvudkvantalet anger kan ett begränsat elektroner befinna sig). I slutändan är detta orsaken till att periodiska systemet ser ut som det gör och att grundämnena har de egenskaper de har.

Exempel

Ange en möjlig uppsättning av kvanttal för den yttersta elektronen i kol.

För $n = 1$ kan, enligt Pauli-principen, endast två elektroner befinna sig. Detta för att de måste ha en unik kvanttalssuppsättning och det enda som kan variera för $n = 1$ är m_s ($l = 0$, se stycket om bankvanttal).

För $n = 2$ kan bankvanttalet variera enligt $l = 0$ och $l = 1$. Detta i sin tur gör att m_l kan anta värdena ± 1 och 0. För vart och ett av dessa värden kan också spinnet vara $\pm\frac{1}{2}$.



Kvanttal – stegen mellan atomens energinivåer

- **Huvudkvanttal** – n: Motsvarar skalen i en atom. K-skal $\rightarrow$ n = 1 osv. Olika atomer har olika stora energigap mellan varje värde på n. n = 1, 2, 3,...

- **Bankvanttal** – l: Svarar mot elektronens impulsmoment.

  $$L^2 = l(l+1)h^2/4\pi^2 \qquad l = 0, 1, 2, ..., n-1$$

  l svarar mot atomens orbitaler. l = 0 $\rightarrow$ s-orbital, l = 1 $\rightarrow$ p-orbital osv.

- **Magnetiskt kvanttal** – m_l. Energinivåer som svarar mot detta kvanttal gör sig känt först under inverkan av ett magnetiskt fält. Kan anta heltalsvärden mellan -l och + l.

- **Spinn** – m_s. En egenskap hos elektronen. Spinnet sägs vara halvtaligt.

  $$s^2 = m_s(m_s+1)h^2/4\pi^2 \qquad m_s = \pm\frac{1}{2}$$

Varje elektron är associerad med en uppsättning kvanttal

Pauli-principen – energinivåerna har begränsat antal platser

Varje elektron är associerad med en uppsättning kvanttal – ***en unik uppsättning kvanttal***

Exempel: I K-skalet kan endast två elektroner befinna sig. Detta för att $n = 1$ inte ger några möjligheter till variation av l och m_l – enbart spinnet har två möjliga värden.

När däremot $n > 1$ finns det flera värden på l, och därmed även på m_l. Se nedanstående tabell. För varje värde finns även två värden på elektronens spinn.

	$l = 0$	1	2	3	4	...
$n = 1$	$m_l = 0$					
2	0	-1, 0, 1				
3	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2			
4	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3		
5	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	-4, -3, -2 -1, 0, 1, 2, 3, 4	
...	...	...	...	...	...	...

Det gör att det i energinivån $n = 2$ får plats åtta elektroner, $n = 3$ ger plats för 18 elektroner. Osv. På så sätt byggs det periodiska systemet upp.