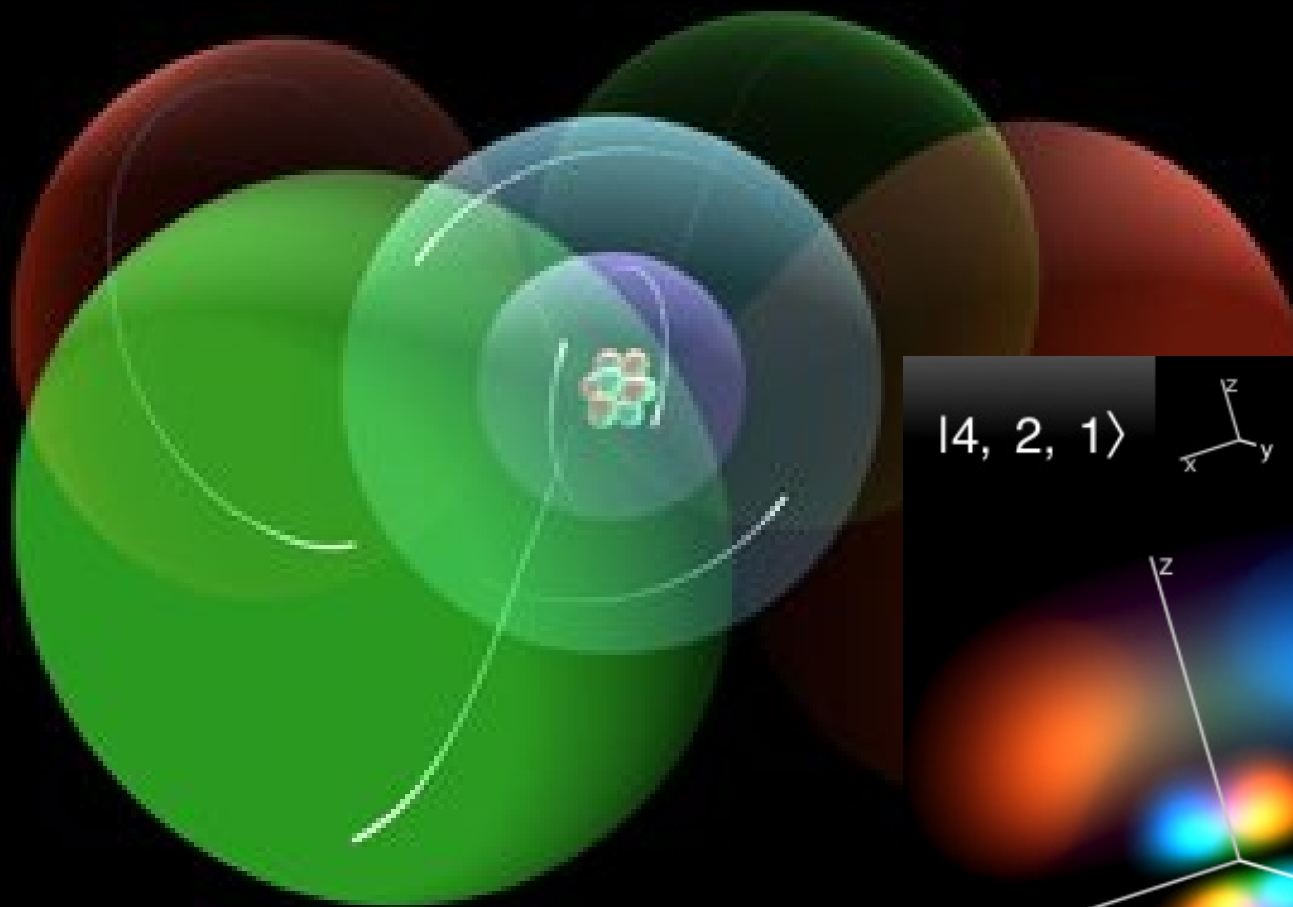
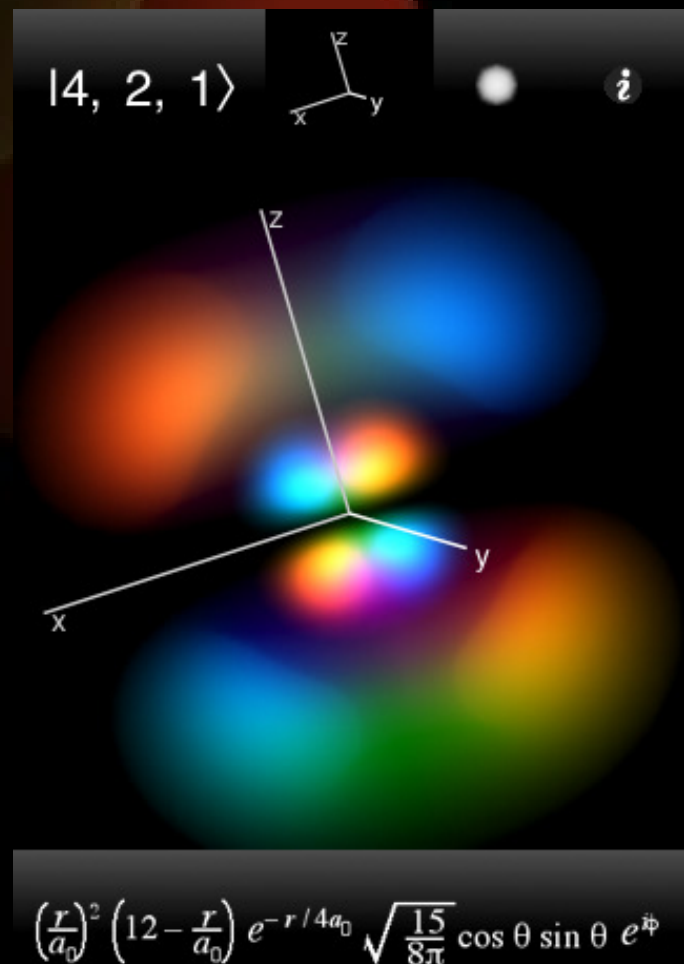




TALASNO-MEHANIČKI MODEL ATOMA



TALASNO-MEHANIČKI MODEL ATOMA

Kompton (1922):

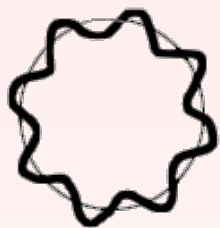
svetlost ima i talasnu i korpuskularnu prirodu.

Luj De Broj (1923):

elektron ima i korpuskularnu i talasnu prirodu.

Zašto su moguće samo neke orbite, tačno određenog prečnika i tačno određene energije???

ELEKTRON KAO STOJEĆI TALAS! (3D)



Da ne bi došlo do poništavanja talasa interferencijom, tj. do nestanka impulsa elektrona, mora biti:

$$2r\pi = n\lambda$$

I način:

$$m v_e 2r\pi = nh$$

$$2r\pi = \frac{nh}{m v_e}$$

$$n\lambda = \frac{nh}{m v_e}$$

$$\lambda = \frac{h}{m v_e} \quad \text{©TMF}$$

II način:

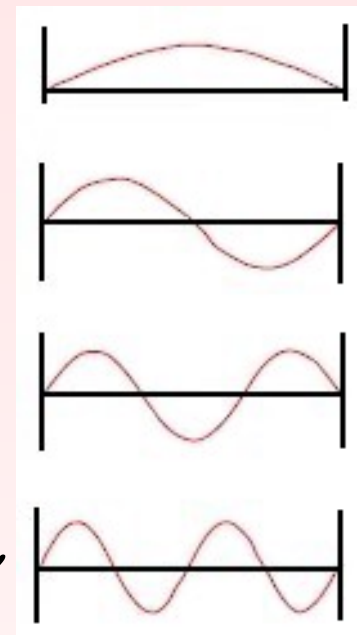
$$E = mc^2; E = h\nu$$

$$mc^2 = h\nu$$

$$mc = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{h}{mc}$$

$$\nu \rightarrow 0, \lambda \rightarrow \infty, \nu \rightarrow 0$$



(1D)

HAJZENBERGOV PRINCIP NEODREĐENOSTI

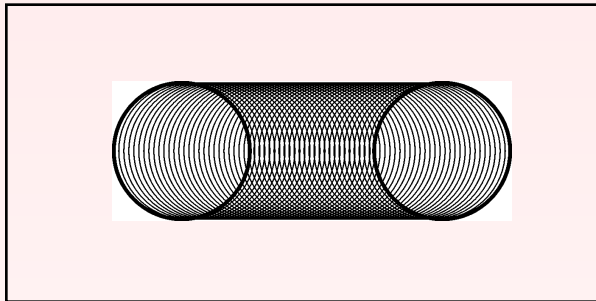
Nemoguće je istovremeno odrediti brzinu elektrona (tj. momenat kretanja, $m\nu$) i njegov položaj u prostoru oko jezgra.

impuls elektrona: $p = m\nu$

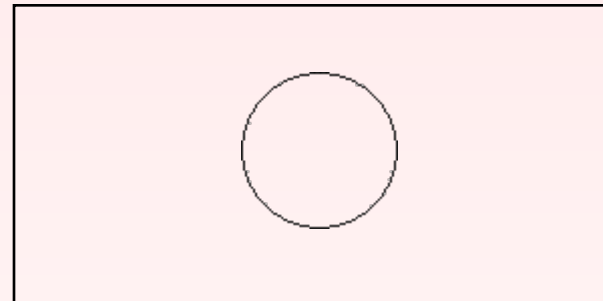
$$\Delta p \cdot \Delta x \geq h$$

Δp - neodređenost impulsa

Δx - neodređenost položaja

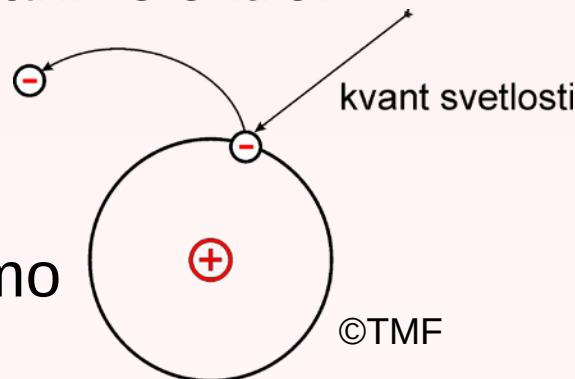


$x = ?$ „razmazani” elektron



$p = ?, \nu = ?$

Zašto u stvari
nikako ne možemo
„videti” elektron?



Posledica Hajz. principa:
elektronu se ne može pripisati
jedna određena orbita, već
govorimo o verovatnoći
nalaženja elektrona!

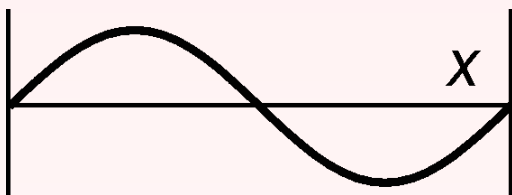
ELEKTRON ???

Ako je elektron **čestica**, onda nismo sigurni gde se nalazi, pa govorimo o **razmazanom elektronu**, odnosno preciznije o **elektronskom oblaku**, koji se nalazi u nekom delu prostora.

Ako je elektron **talas**, onda on mora biti **stojeći talas**, a njegovo kretanje moramo opisivati odgovarajućim talasnim funkcijama. (Normalno je što ga ne vidimo.)

Ψ - talasna funkcija (psi-funkcija)

$$\Psi = f(x, y, z)$$



kretanje stojećeg talasa u jednoj dimenziji

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} f(x) = 0$$

diferencijalna jednačina drugog reda

Šredinger, 1926. (kretanje talasa-elektrona u tri dimenzije)

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \Psi = 0 \quad \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} f(x) = 0$$

$$\nabla^2 \Psi$$

$$\text{smene: } \lambda = \frac{h}{m\nu}; E_k = E_u - E_p = \frac{m\nu^2}{2}; \nu^2 = \frac{2(E_u - E_p)}{m}$$

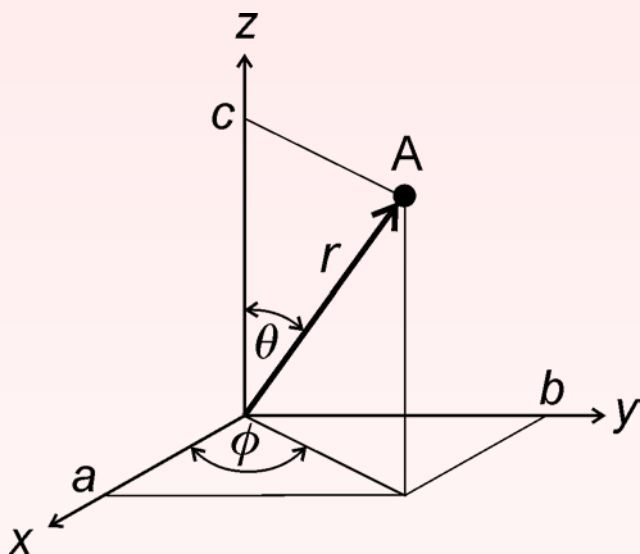
$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E_u - E_p) \Psi = 0$$

$$H\Psi = E\Psi$$

Suština: Šredingerova diferencijalna jednačina daje vezu između položaja i energije elektrona.

Parametri talasne funkcije pri rešavanju
Šredingerove jednačine: n, l, m_l (m_s)

Ψ -funkcija ili **ORBITALA** - deo prostora u kojem
postoji 90 % verovatnoće nalaženja elektrona



$A(a, b, c)$ – ortogonalne koordinate

$A(r, \phi, \theta)$ – polarne koordinate

Oblici talasne funkcije

n l m_l oznaka

1 0 0 1s

$$\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

$R(r)$ $Y(\phi, \theta)$

Ψ

2 0 0 2s

$$\frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

2 1 0 $2p_z$

$$\frac{1}{\sqrt{128\pi a_0^5}} \cdot r \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \cos \theta$$

2 1 -1 $2p_y$

$$\frac{1}{\sqrt{512\pi a_0^5}} \cdot r \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sin \theta \sin \phi$$

3 2 0 $3d_{z^2}$

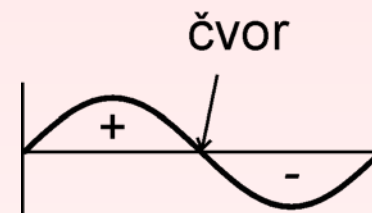
$$\frac{1}{81\sqrt{6\pi a_0^7}} \cdot r^2 \cdot \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right) (3\cos^2 \theta - 1)$$

$$\Psi(r, \phi, \theta) = R(r) \cdot Y(\phi, \theta)$$

·	
funkcija	funkcija
radijalne	ugaone
raspodele	raspodele

s-orbitale: $Y(\phi, \theta) = 1 \Rightarrow \Psi = R(r) \Rightarrow$ sferna simetrija

Ψ - opisuje stojeći talas u prostoru
(čista matematika – nema fizički smisao)



Ψ^2 - opisuje verovatnoću nalaženja elektrona u prostoru (ima fizički smisao, ali mora biti „normalizovana”)

$$\int_0^{\infty} \Psi^2 d\Psi = 1$$

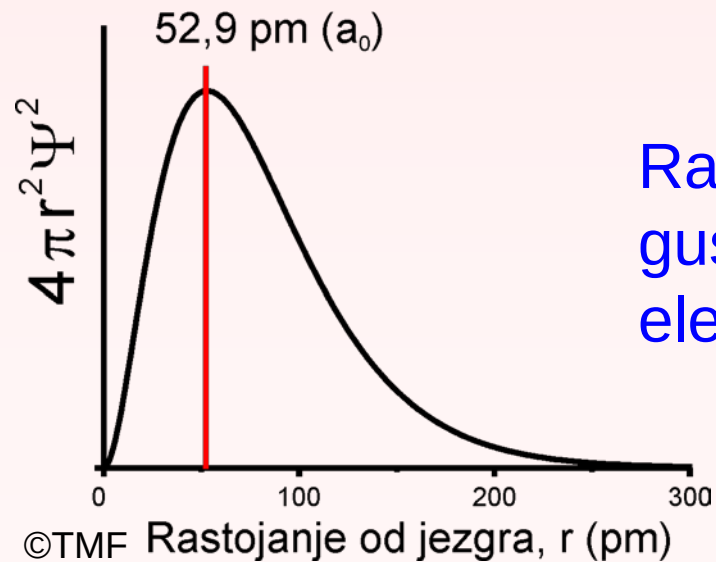
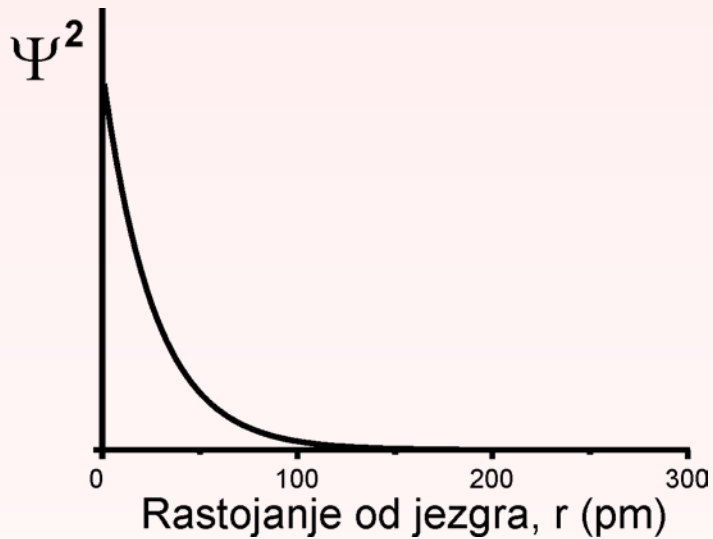
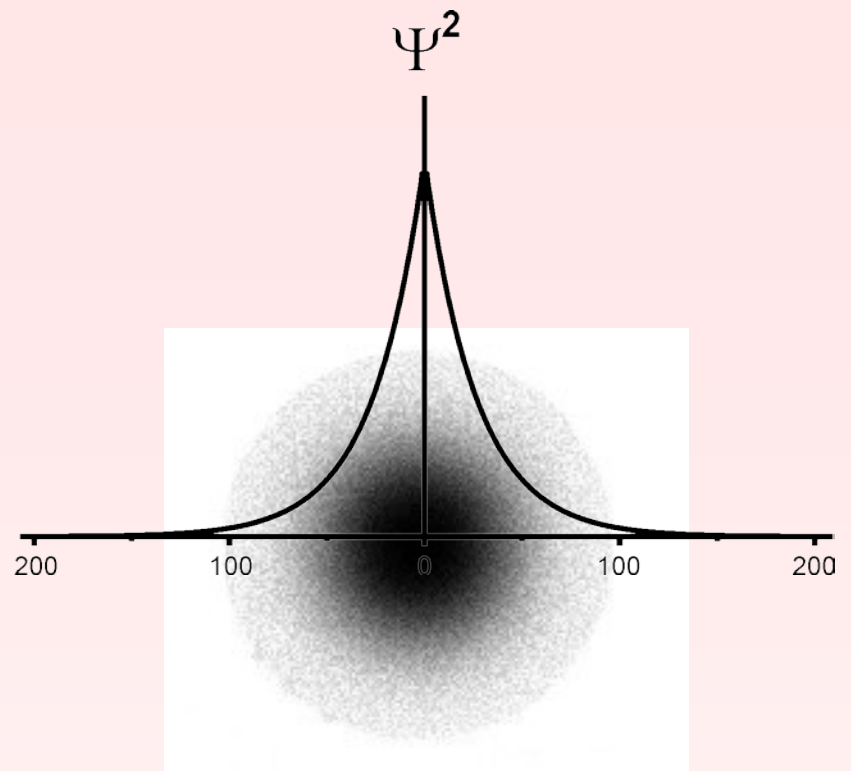
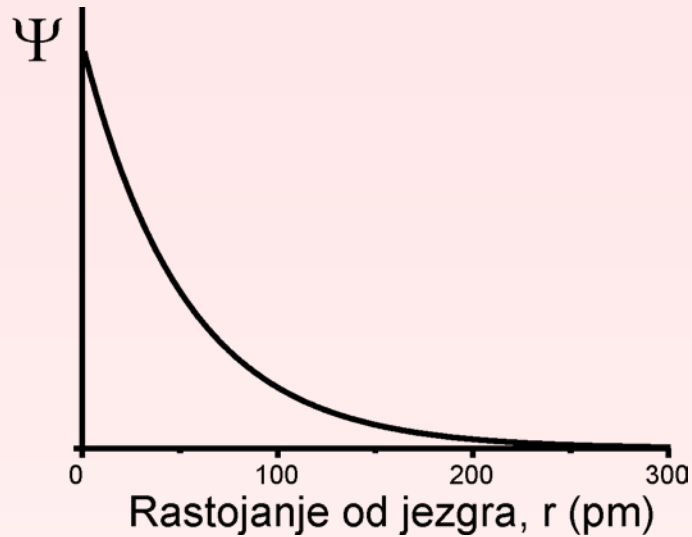
NAJVAŽNIJE:

$4\pi r^2 R^2$ – radijalna gustina elektrona (*p*, *d*, *f*-elektroni)

$4\pi r^2 \Psi^2$ – radijalna gustina elektrona (*s*-elektroni)

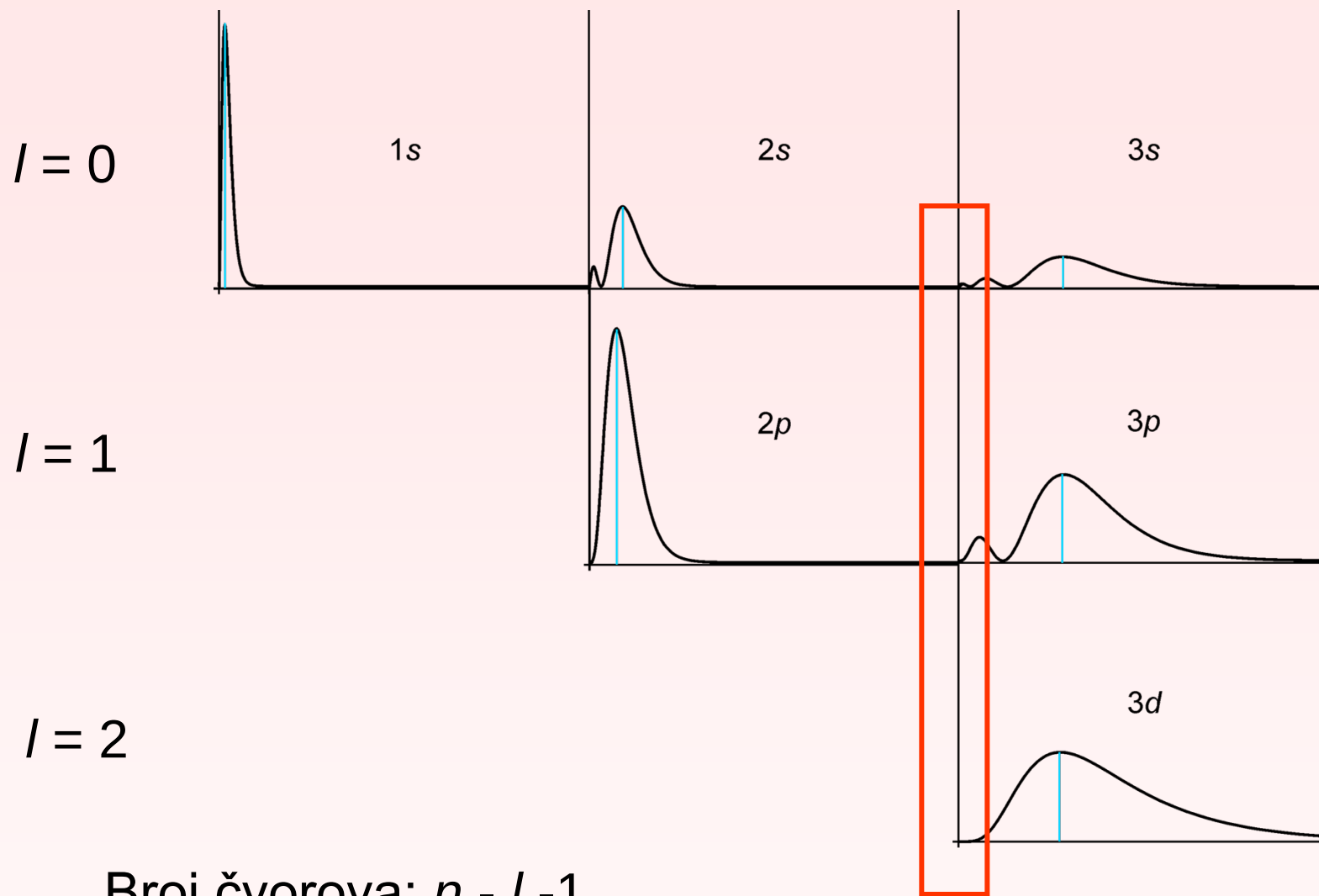
Predstavljaju verovatnoću nalaženja elektrona između
dve bliske koncentrične sfere. ©TMF

1s-orbitala



Radijalna
gustina
elektrona

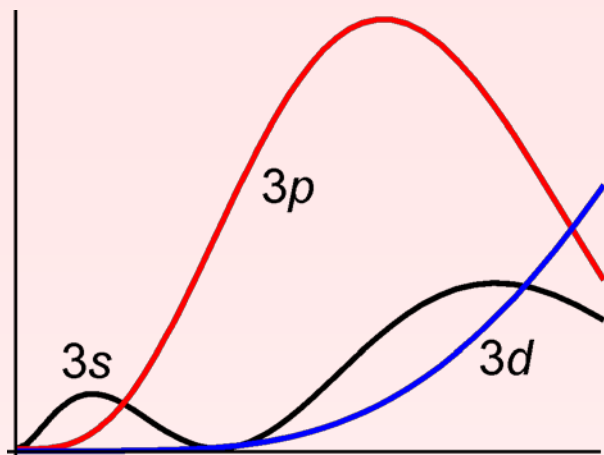
Poređenje radijalnih gustina elektrona za različite orbitale



Broj čvorova: $n - l - 1$

Položaj maksimuma verovatnoće

Prodiranje i međusobno zasenjivanje elektrona



Prodiranje ka jezgru raste:

$$f < d < p < s$$

Moć zasenjivanja opada:

$$s > p > d > f$$

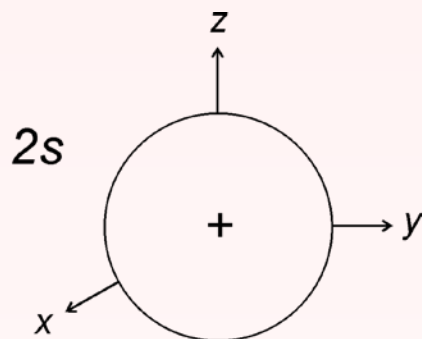
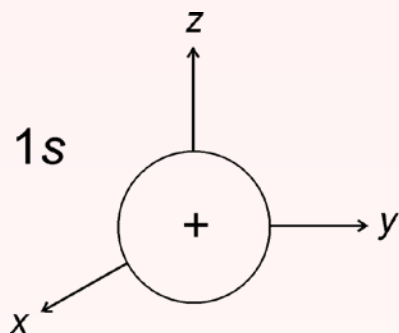
Energija orbitala raste:

$$s < p < d < f$$

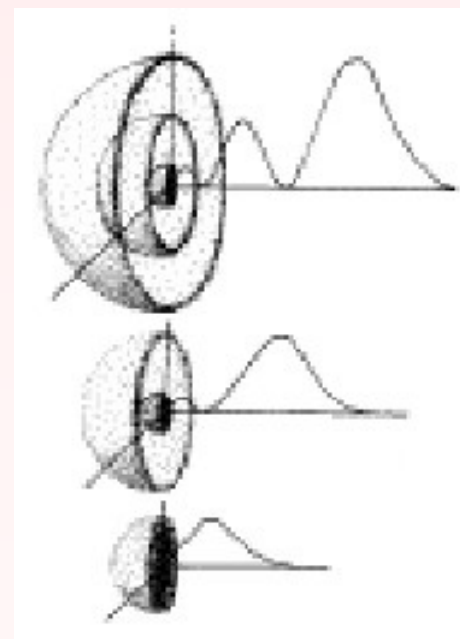
Umesto Z treba koristiti Z^* -
efektivno naelektrisanje jezgra

$$Y^2(\phi, \theta)$$

s-orbitale:

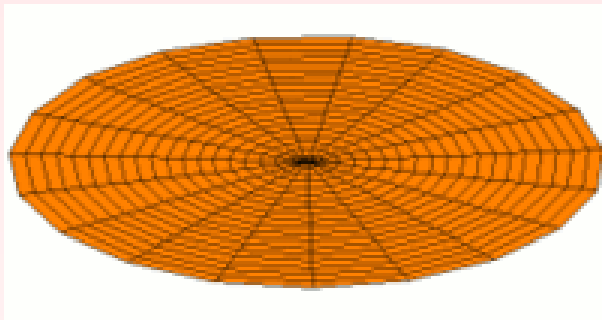


©TMF

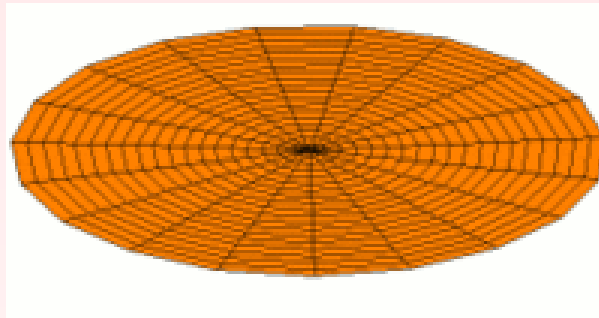


Talasne funkcije $\Psi(r, \phi, \theta)$

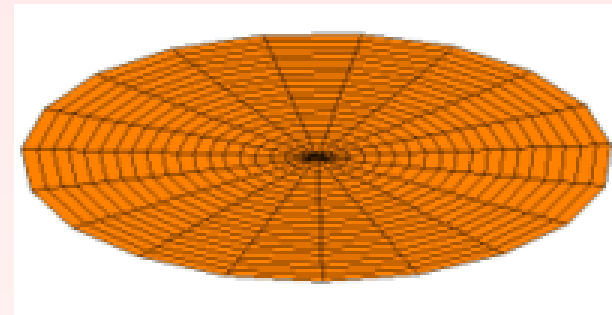
s-orbitale



1s



2s

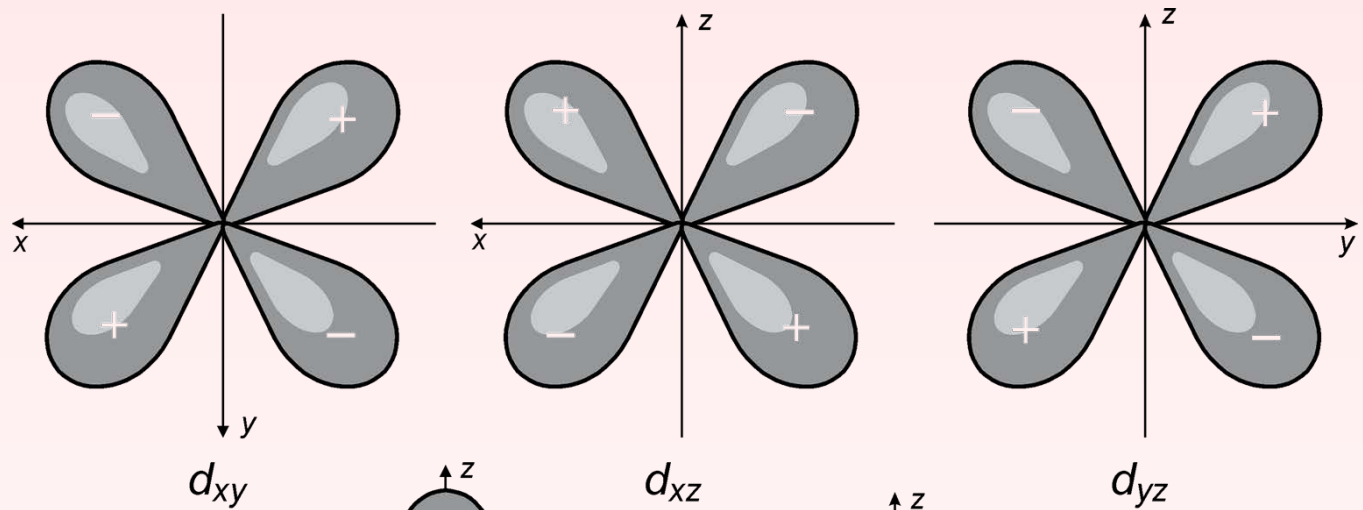
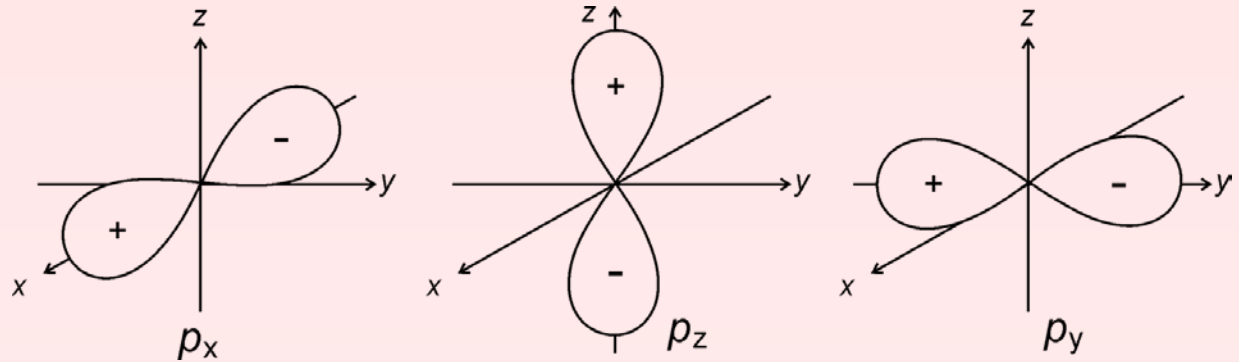


3s

p-orbitale:

$$l = 1$$

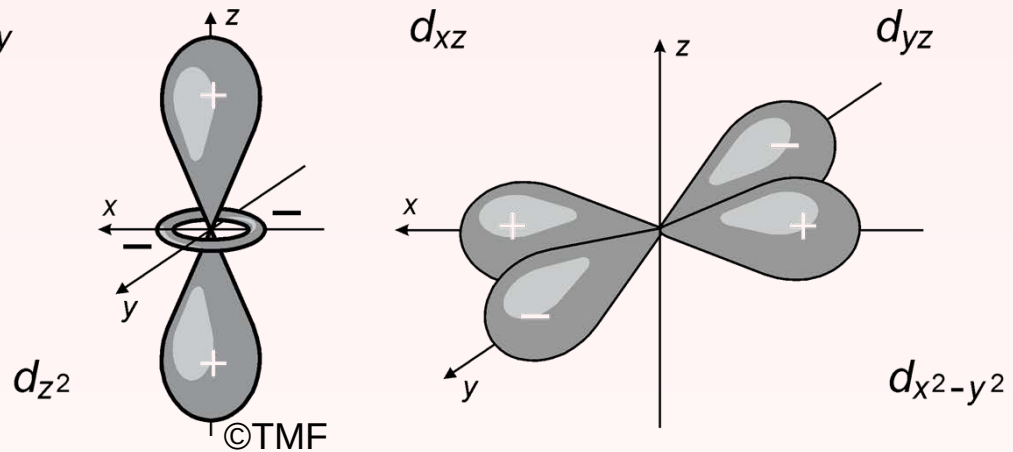
$$m_l = -1, 0, 1$$



d-orbitale:

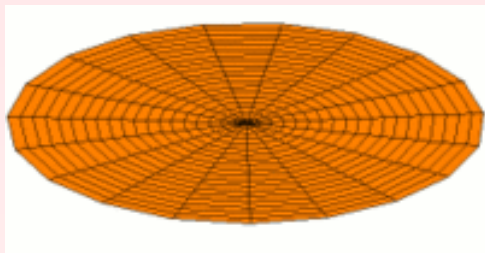
$$l = 2$$

$$m_l = -2, -1, 0, 1, 2$$

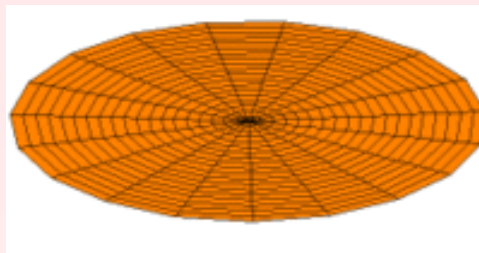


Talasne funkcije $\Psi(r, \phi, \theta)$

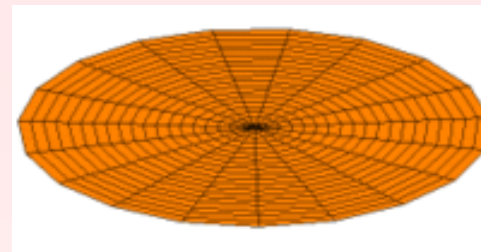
***p*-orbitale**



2p

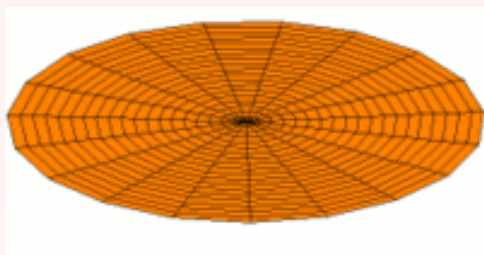


3p

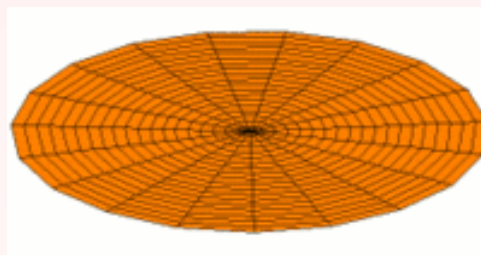


4p

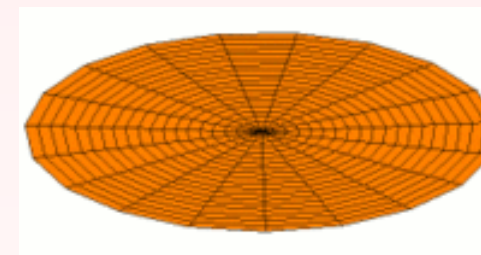
***d*-orbitale**



3d

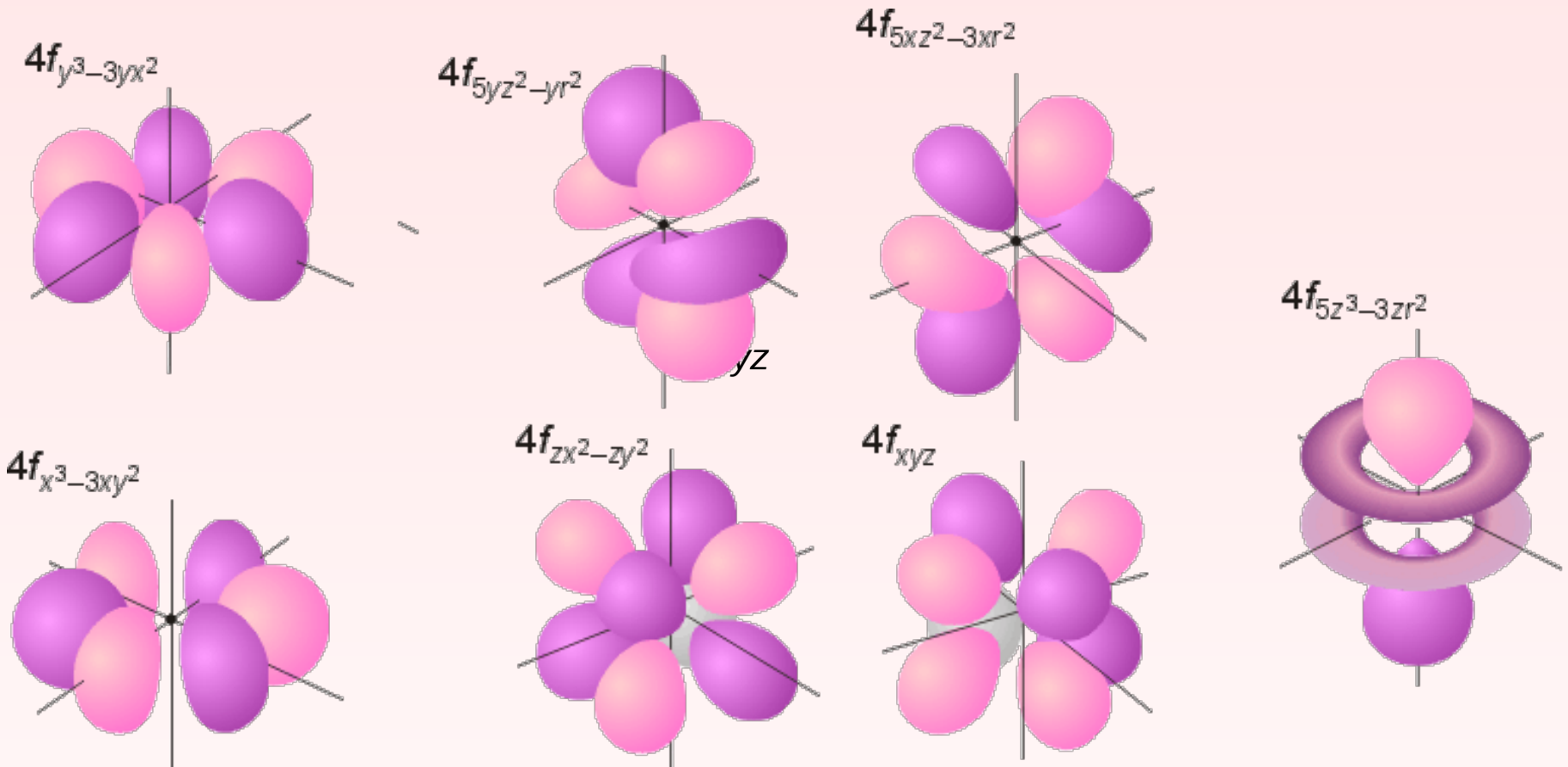


4d
©TMF



5d

f -orbitale (ne treba učiti) - veoma komplikovanog oblika



ELEKTRONSKA KONFIGURACIJA

- način na koji su orbitale (podnivoi) popunjene u atomu

Valentni elektroni: elektroni koji se nalaze u podnivoima najvišeg glavnog kvantnog broja

Podnivoi u kojima se nalaze valentni elektroni zajednički se nazivaju valentna ljuska.

n	oznaka	maksimalan broj elektrona na orbitalama
1	K	$1s^2$
2	L	$2s^2, 2p^6$
3	M	$3s^2, 3p^6, 3d^{10}$
4	N	$4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 4f^{14}$
5	O	$5s^2, 5p^6, 5d^{10}, 5f^{14}$
6	P	$6s^2, 6p^6, 6d^{10}$?
7	Q	$7s^2, \dots\dots\dots$?

Pri raspoređivanju elektrona po orbitalama i pisanju elektronske konfiguracije atoma treba voditi računa o **4** principa.

1. princip - Princip minimuma energije

2. princip – Paulijev princip isključenja

3. princip – Hundovo pravilo maksimalnog multipliciteta

4. princip – Princip stabilnosti popunjenih i polupopunjenih orbitala

1. princip - Princip minimuma energije:

U celini (energetski nivoi) ili u okviru nivoa (podnivoi) prvo se popunjavaju orbitale sa nižom energijom.

Kod atoma H energija zavisi samo od vrednosti n (može se odmah zaboraviti, jer se radi o jednom jedinom elektronu).

Kod svih ostalih atoma energija zavisi od n i l , odnosno zbira $n+l$. Manji zbir – niža energija!

primer: 2s- i 3s-orbitale, $2+0$ je manje od $3+0$, sledi
2s-orbitale se popunjavaju pre 3s-orbitala.

Manja vrednost n ne znači automatski nižu energiju (kada n raste, energetske nivoe se približavaju - „zgušnjavaju”).

Za $n=\text{const.}$ energija raste u nizu $s < p < d < f$ (tj. $l = 0, 1, 2, 3$).

primer: 3s- i 3p-orbitale, $3+0=3$ je manje od $3+1=4$, sledi
prvo se popunjavaju 3s-orbitale

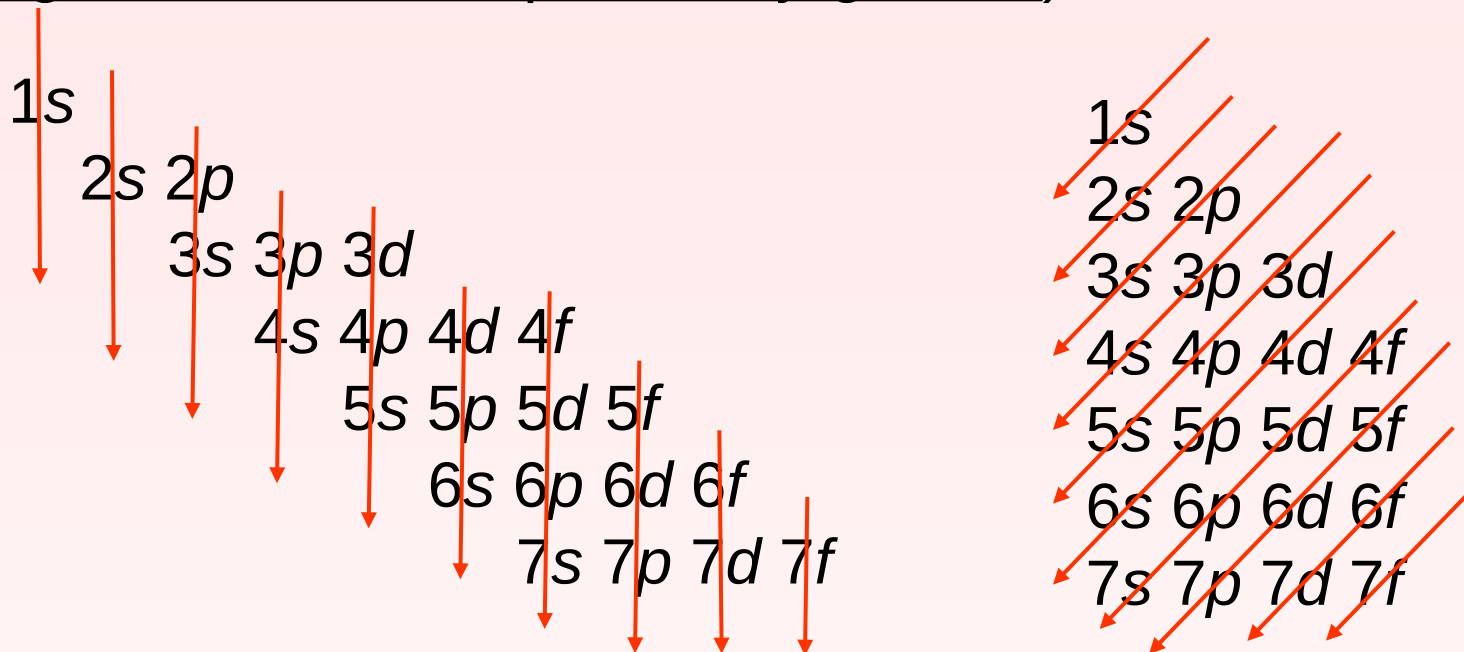
primer: 4s- i 3d-orbitale, $4+0=4$, $3+2=5$, sledi
prvo se popunjavaju 4s-orbitale

primer: 4s- i 3p-orbitale, $4+0=4$, $3+1=4$???????
prvo se popunjavaju 3p-orbitale

Ako su zbrojevi jednaki nižu energiju imaju orbitale sa manjim n !

Važno je uočiti da se 4s- popunjavaju pre 3d-orbitala, 5s- pre 4d-orbitala, 4f- pre 5d-orbitala itd.

Pomoćna šema (u knjizi Opšta hemija, I deo, M. Dragojević i dr. pogrešno nazvana „pravilo dijagonala”):



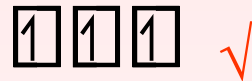
2. princip – Paulijev princip isključenja:

Određuje maksimalan broj elektrona na pojedinačnim orbitalama, na podnivoima i nivoima i opisan je ranije!

3. princip – Hundovo pravilo maksimalnog multipliciteta

Ako postoji više orbitala iste energije – tzv. degenerisane orbitale – one se prvo popunjavaju sa po jednim elektronom, pri čemu su svi elektroni istog spina.

primer: postoje tri *p*-orbitale, ako na njih treba rasporediti tri elektrona postoje dve mogućnosti



Elektroni su negativno naelektrisani, međusobno se odbijaju i teže da se, koliko je to moguće, udalje jedni od drugih, a da istovremeno imaju paralelne spinove (**maksimalni multiplicitet**).

Postoji **energija sparivanja elektrona**, koja je veća od nule. Elektroni će se sparivati samo ako je razlika u energiji energetske nivoa veća od energije sparivanja elektrona.

Ako se u orbitali nalaze dva elektrona, oni moraju imati suprotne spinove i za njih kažemo da su **SPARENI**.

Elektroni koji se nalaze u polupopunjenim orbitalama su **NESPARENI** elektroni.

PARAMAGNETICI – supstance koje sadrže nesparene elektrone

- ponašaju se kao magneti, magnetno polje ih privlači!

DIJAMAGNETICI – supstance kod kojih su svi elektroni spareni

- magnetno polje ih odbija!

4. princip – Princip stabilnosti popunjenih i polupopunjenih orbitala

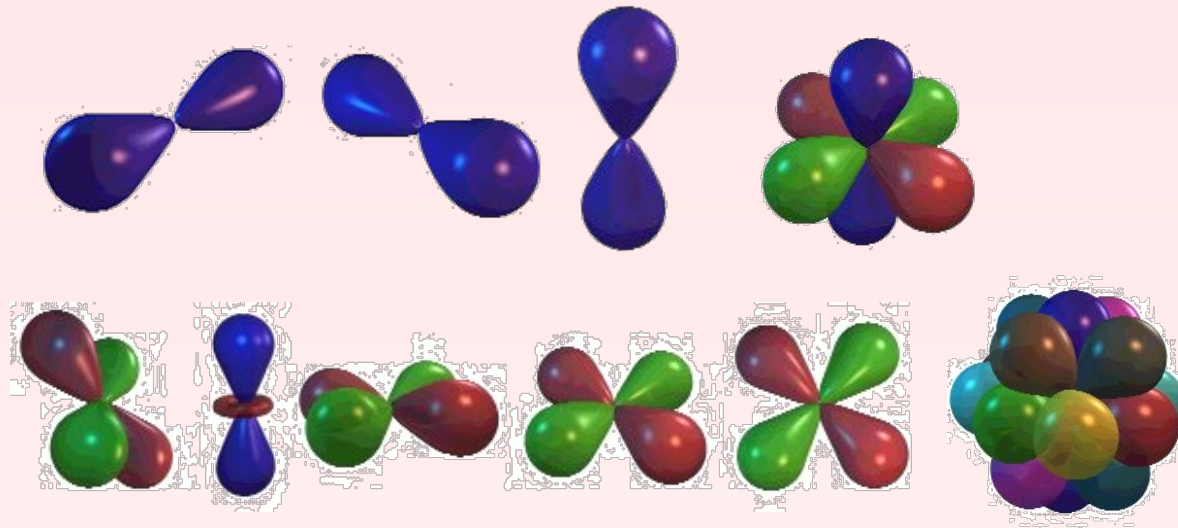
Empirijsko pravilo koje potvrđuju:

- izuzetna stabilnost elektronskih konfiguracija plemenitih gasova, koji veoma teško stupaju u hemijske reakcije,
- neki elementi oko sredine i pri kraju d -bloka elemenata.

primeri:

- očekivana konfiguracija valentnih elektrona $_{24}\text{Cr}$: $3d^4 4s^2$
- stvarna konfiguracija $_{24}\text{Cr}$: $3d^5 4s^1$
- očekivana konfiguracija valentnih elektrona elemenata grupe bakra (11. grupa, Cu, Ag i Au): $(n-1)d^9 ns^2$
- stvarna konfiguracija: $(n-1)d^{10} ns^1$

Najjednostavnije objašnjenje:



Uzete zajedno p -,
odnosno d -orbitale
čine približno sfernu
simetriju.

Elektronske konfiguracije nekih elemenata:

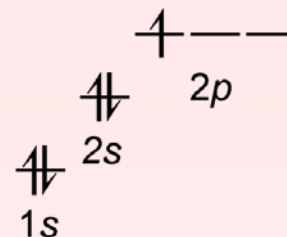
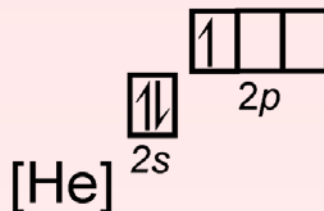
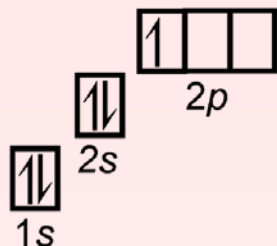
${}_1\text{H}$ $1s^1$

${}_2\text{He}$ $1s^2$ (popunjena K-ljuska)

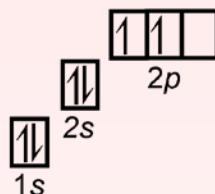
${}_3\text{Li}$ $1s^2 2s^1$

${}_4\text{Be}$ $1s^2 2s^2$ (popunjena 2s-orbitala)

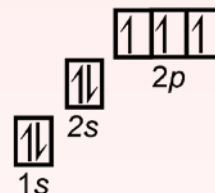
${}_5\text{B}$ $1s^2 2s^2 2p^1$ (konfiguraciju prethodne ljuske
 $[\text{He}] 2s^2 2p_x^1$ zamenjujemo plemenitim gasom)



${}_6\text{C}$ $[\text{He}] 2s^2 2p^2$

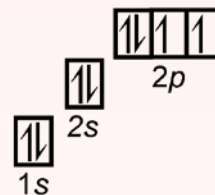


${}_7\text{N}$ $[\text{He}] 2s^2 2p^3$



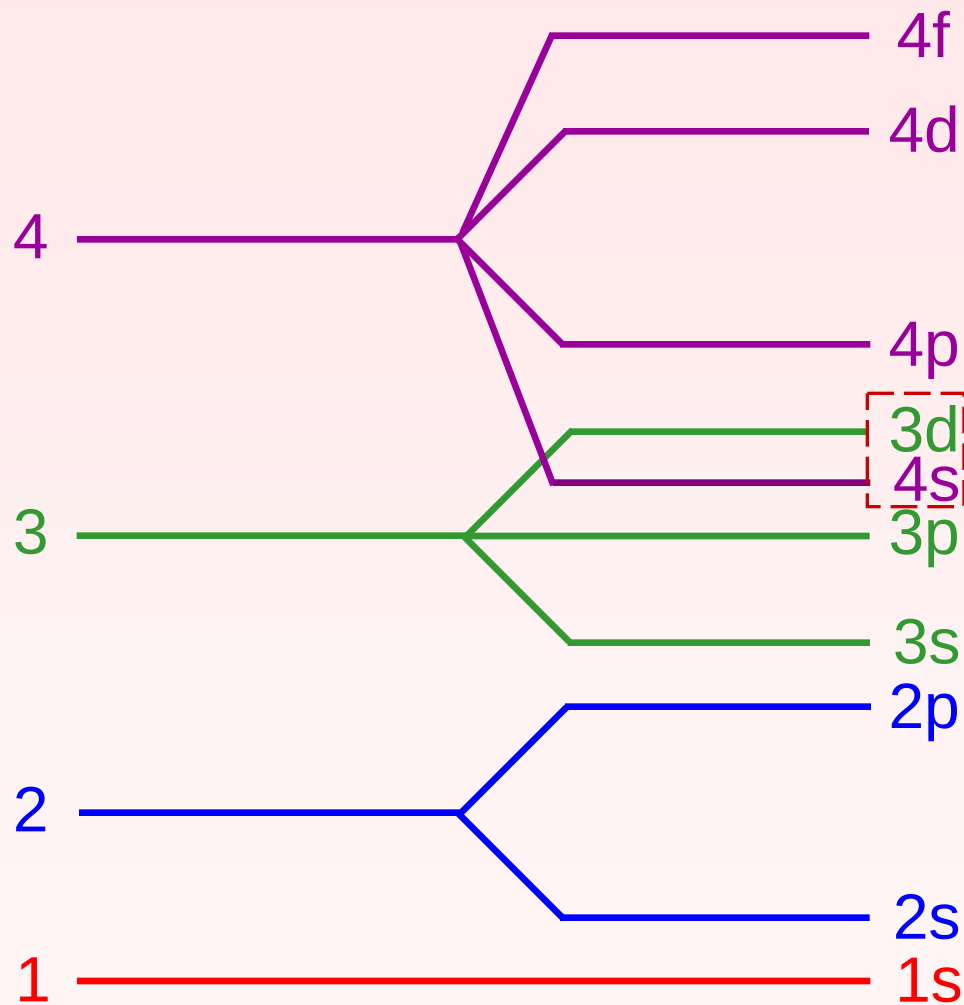
Hund: maksimalan broj
nesparenih elektrona!

${}_8\text{O}$ $[\text{He}] 2s^2 2p^4$



itd.

Energija



$_{30}\text{Zn}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$

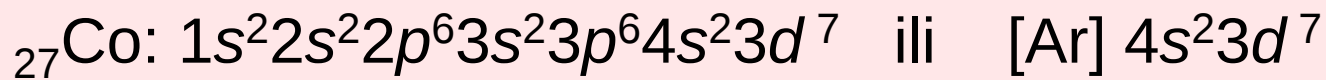
$_{28}\text{Ni}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$

$_{20}\text{Ca}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

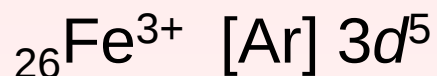
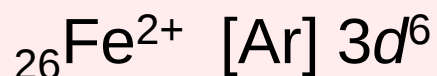
$_{18}\text{Ar}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

$_{16}\text{S}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

$_{12}\text{Mg}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

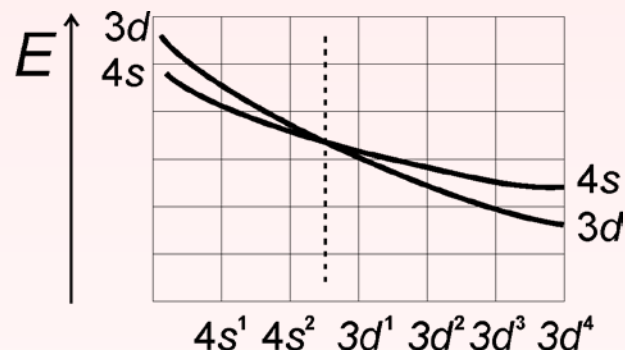


Umesto $[\text{Ar}] 4s^2 3d^7$ bolje je na kraju napisati $[\text{Ar}] 3d^7 4s^2$, jer to pokazuje pravi redosled jonizacije elektrona, što će nam trebati kasnije. Na primer, kada nastane jon Co^{2+} , on ima konfiguraciju $[\text{Ar}] 3d^7$.



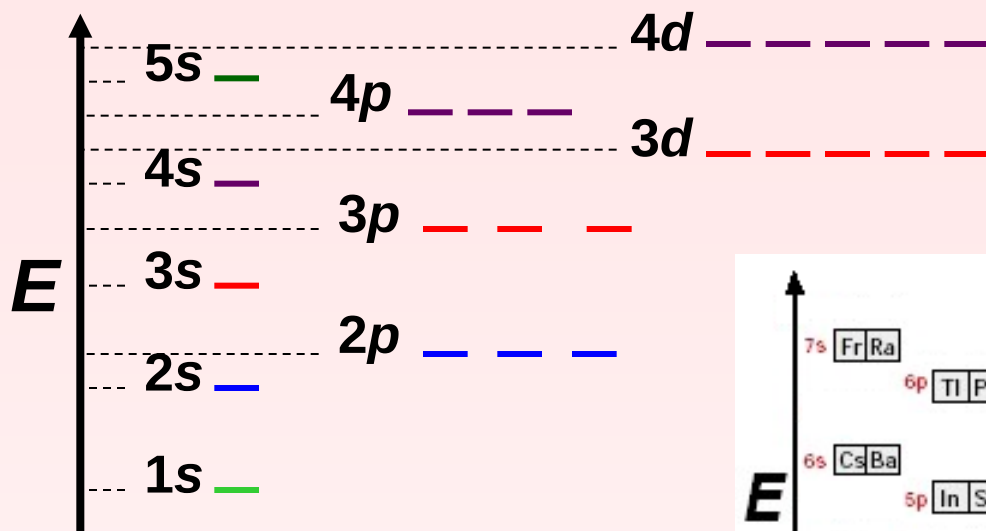
Pravilo: Šta se prvo puni, to se prvo prazni!

Dakle, redosled popunjavanja i redosled jonizacije se razlikuju!



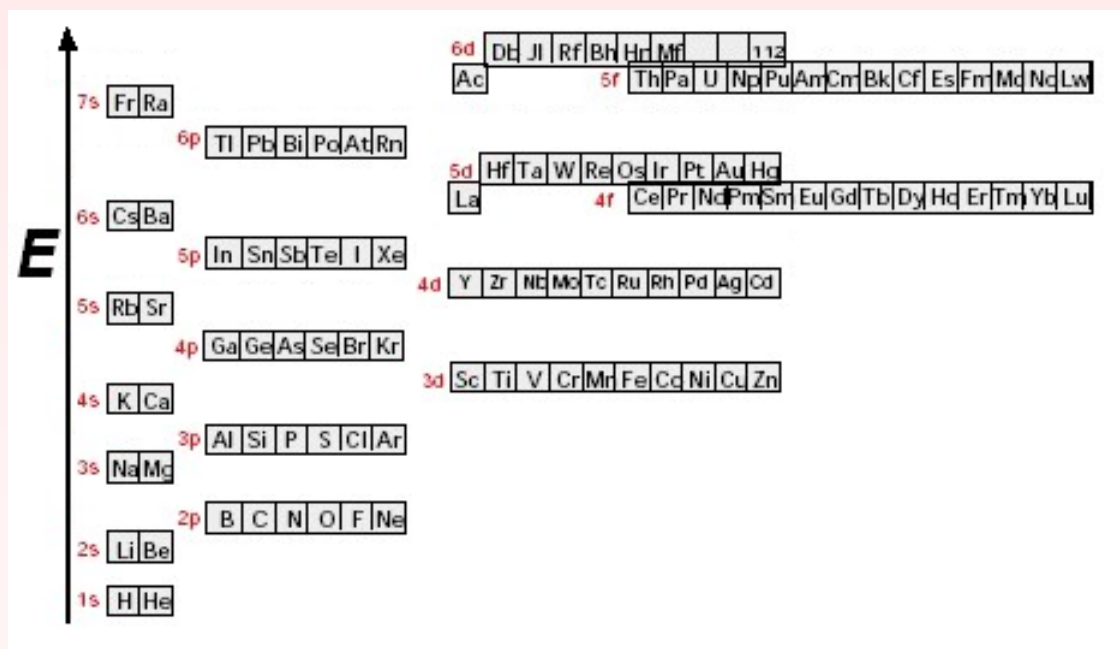
Objašnjenje: kada počne popunjavanje 3d-orbitala njihova energija padne ispod energije 4s-orbitala.

Redosled popunjavanja orbitala može se videti i iz sledećih šema (energije nisu u razmeri):



← bez *f*-orbitala

kompletna slika ⇒



Napomena: cela priča se odnosila na atome u osnovnom stanju (izolovani atomi bez interakcija sa drugim česticama, što praktično podrazumeva gasovito agregatno stanje).