



UiO : **Fysisk institutt**

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Forelesning 25



Ukens program

- **Tirsdag:** Atomer (Avsnitt 5.2 i Griffiths).
- **Fredag:** Ingen forelesning.
- **Gruppetimer:** Ingen oblig denne uken.
- **Kollokvium mandag:** Vi ser på fjorårets eksamen.

- **Neste uke:** Ingen forelesning fredag & gruppetimer torsdag. De som har gruppetimer på torsdag må finne seg et annet tidspunkt.

Kort repetisjon

- Vi må beskrive identiske partikler med **symmetriske** (boson, heltalls spinn) og **anti-symmetriske** (fermion, halvtalls spinn) **totale bølgefunksjoner**.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \pm \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

- **Paulis eksklusjonsprinsipp**: to identiske fermioner kan aldri ha samme kvantetall, det vil si de kan aldri befinne seg i samme tilstand.

Kort repetisjon

- Identiske partikler med **symmetrisk romlig bølgefunksjon** er **nærmere** hverandre (forventningsverdi) enn de med **antisymmetrisk romlig bølgefunksjon**. Dette er en ren kvanteeffekt. (“**Exchange force**”)
- Den forventede avstanden mellom to identiske partikler i tilstand ψ_a og ψ_b er (i én dimensjon):

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2 \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \mp 2 |\langle x \rangle_{ab}|^2$$

Fortegnet er bestemt av symmetrisk/anti-symmetrisk romlig bølgefunksjon.

Kort repetisjon

- Den **totale bølgefunksjonen** for elektronene i et H₂-molekyl er må være anti-symmetrisk:

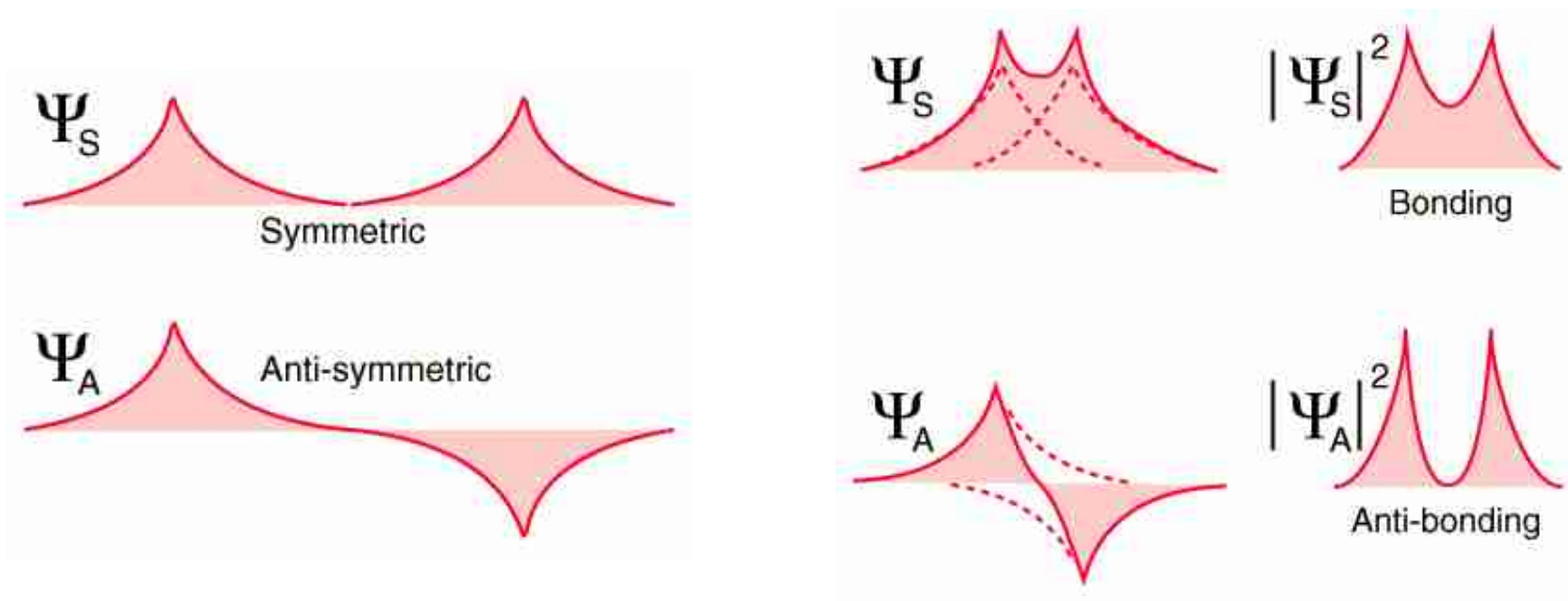
$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(m_{s_1}, m_{s_2}) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \chi(m_{s_2}, m_{s_1})$$

- **Kovalent binding** oppstår når den romlige bølgefunksjonen er symmetrisk. Derfor må spinn-delen av bølgefunksjonen være anti-symmetrisk (singlet):

$$\chi(m_{s_1}, m_{s_2}) = \chi_{\uparrow} \chi_{\downarrow} - \chi_{\downarrow} \chi_{\uparrow}$$

Kort repetisjon

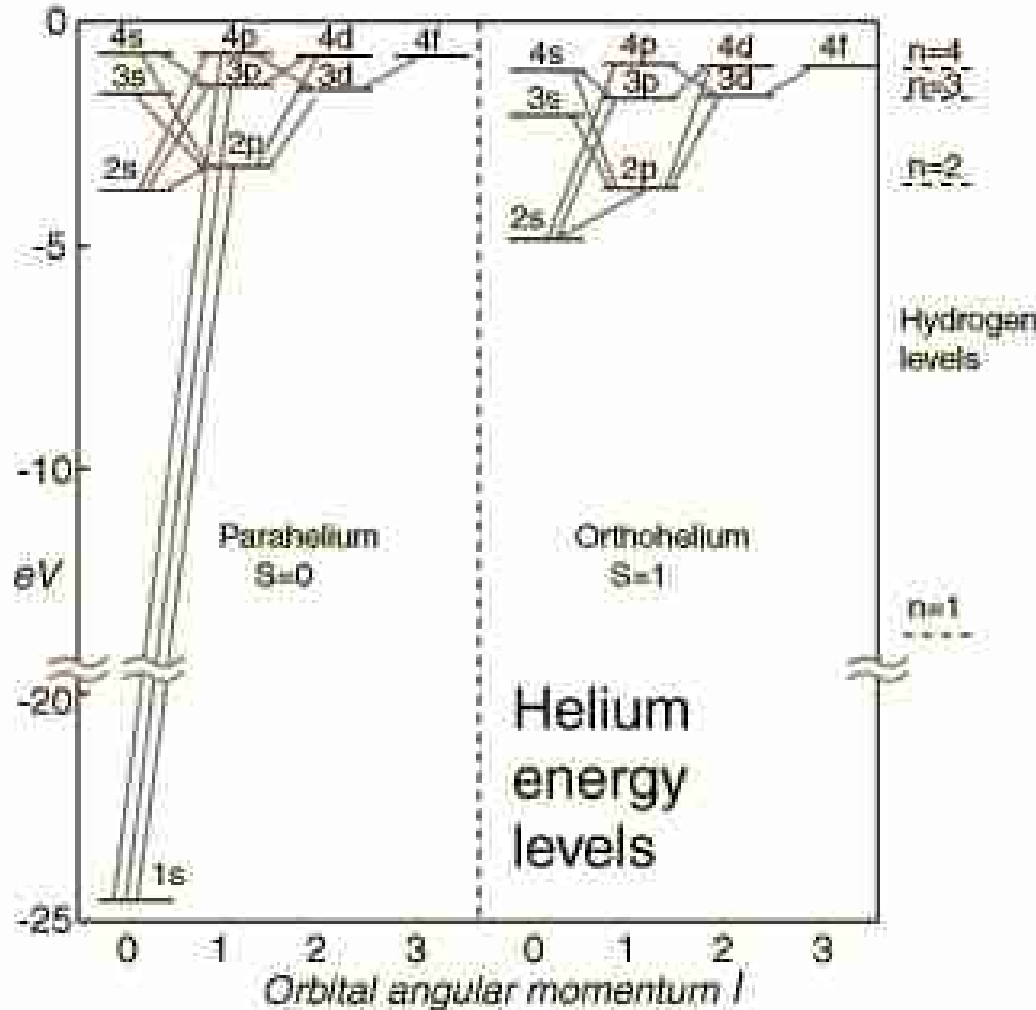
- Kovalent binding: når romdelen i bølgefunksjonen for H_2 -molekylet er symmetrisk har elektronene høyere sannsynlighet for å være mellom protonene:



I dag

- Vi begynner med anvendelser av kvantefysikk
 - Prinsippene bak grunnstoffene i det periodiske system.
 - Fokus på **helium** som er det neste enkleste grunnstoffet.

Helium



Et elektron er i 1s, plottet viser tilstanden til det andre elektronet.

Energien er gitt relativ til grunntilstanden for He^+ hvor

$$E = 4 \times (-13.6 \text{ eV}) = -54.4 \text{ eV}$$

[E.A. Hylleraas, *Z. Phys.* **65**, 209 (1930)]

Det periodiske system

hydrogen 1 H 1.0079																	helium 2 He 4.0026	
lithium 3 Li 6.941	beryllium 4 Be 9.0122											boron 5 B 10.811	carbon 6 C 12.011	nitrogen 7 N 14.007	oxygen 8 O 15.999	fluorine 9 F 18.998	neon 10 Ne 20.180	
sodium 11 Na 22.990	magnesium 12 Mg 24.305											aluminium 13 Al 26.982	silicon 14 Si 28.086	phosphorus 15 P 30.974	sulfur 16 S 32.065	chlorine 17 Cl 35.453	argon 18 Ar 39.948	
potassium 19 K 39.098	calcium 20 Ca 40.078	scandium 21 Sc 44.956	titanium 22 Ti 47.867	vanadium 23 V 50.942	chromium 24 Cr 51.996	manganese 25 Mn 54.938	iron 26 Fe 55.845	cobalt 27 Co 58.933	nickel 28 Ni 58.693	copper 29 Cu 63.546	zinc 30 Zn 65.39	gallium 31 Ga 69.723	germanium 32 Ge 72.61	arsenic 33 As 74.922	selenium 34 Se 78.96	bromine 35 Br 79.904	krypton 36 Kr 83.80	
rubidium 37 Rb 85.468	strontium 38 Sr 87.62	yttrium 39 Y 88.906	zirconium 40 Zr 91.224	niobium 41 Nb 92.906	molybdenum 42 Mo 95.94	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07	rhodium 45 Rh 102.91	palladium 46 Pd 106.42	silver 47 Ag 107.87	cadmium 48 Cd 112.41	indium 49 In 114.82	tin 50 Sn 118.71	antimony 51 Sb 121.76	tellurium 52 Te 127.60	iodine 53 I 126.90	xenon 54 Xe 131.29	
caesium 55 Cs 132.91	barium 56 Ba 137.33	57-70 *	lutetium 71 Lu 174.97	hafnium 72 Hf 178.49	tantalum 73 Ta 180.95	tungsten 74 W 183.84	rhenium 75 Re 186.21	osmium 76 Os 190.23	iridium 77 Ir 192.22	platinum 78 Pt 195.08	gold 79 Au 196.97	mercury 80 Hg 200.59	thallium 81 Tl 204.38	lead 82 Pb 207.2	bismuth 83 Bi 208.98	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	89-102 * *	lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	ununnilium 110 Uun [271]	unununium 111 Uuu [272]	ununbium 112 Uub [277]	ununquadium 114 Uuq [289]					

* Lanthanide series

lanthanum 57 La 138.91	cerium 58 Ce 140.12	praseodymium 59 Pr 140.91	neodymium 60 Nd 144.24	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36	europium 63 Eu 151.96	gadolinium 64 Gd 157.25	terbium 65 Tb 158.93	dysprosium 66 Dy 162.50	holmium 67 Ho 164.93	erbium 68 Er 167.26	thulium 69 Tm 168.93	ytterbium 70 Yb 173.04
--	-------------------------------------	---	--	--	---------------------------------------	---------------------------------------	---	--------------------------------------	---	--------------------------------------	-------------------------------------	--------------------------------------	--

** Actinide series

actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.04	protactinium 91 Pa 231.04	uranium 92 U 238.03	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]
--------------------------------------	--------------------------------------	---	-------------------------------------	---------------------------------------	---------------------------------------	---------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------------	---	---	--------------------------------------	--	---------------------------------------

Oppsummering

- Elektronstrukturen til grunnstoffer (kjemi) kan forklares ved hjelp av kvantemekanikk.
- “Skallene” fylles opp etter flere **utvalgsregler** som minimerer energi. Noen av disse er:
 - Lav orbitalt angulærmoment gir sterkere binding til kjernen (lav energi) på grunn av mindre avstand. For eksempel foretrekkes 2s over 2p.
 - Høy totalspin gir lav energi pga. symmetrisk spindel av bølgefunksjon som gir anti-symmetrisk romdel og elektroner som er lengre fra hverandre (mindre frastøtning).