

## КВАНТНО-МЕХАНИЧКА ТЕОРИЈА АТОМА

Рјешавањем Шредингерове једначине:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p) \Psi = 0$$

могу да се добију могућа стања атома.

Када се у Шредингерову једначину замијени вриједност за потенцијалну енергију електрона у електричном пољу језгра атома водоника

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

добијају се функције стања електрона у водониковом атому. Свако стационарно стање електрона одређено је са три квантна броја. Поред главног квантног броја  $n$ , који се појављује у Боровој теорији, за описивање стања електрона користе се и орбитални ( $l$ ) и магнетни ( $m_l$ ) квантни број.

**Главни квантни број  $n$ <sup>1</sup>** одређује енергију стационарних стања у атому водоника и може да има да има вриједности  $n = 1, 2, 3, \dots$

Стања са различитим вриједностима главног квантног броја означавају се на сљедећи начин:

главни квантни број	1	2	3	4	5	6	7
ознака стања	K	L	M	N	O	P	Q

<sup>1</sup> Има слично значење као квантни број  $n$  у Боровом моделу. Енергија стања зависи само од њега, на потпуно исти начин као у Боровом моделу.

**Орбитални квантни број**  $l$  одређује вриједности орбиталног момента импулса<sup>2</sup> електрона на орбити око језгра. Момент импулса кретања електрона око језгра може да има само одређене вриједности.

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad \text{где је } l=0, 1, \dots, n-1$$

Стања са различитим вриједностима орбиталног квантног броја означавају се на следећи начин:

орбитални квантни број	0	1	2	3	4	5
ознака стања	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>

Ознака стања електрона садржи информацију о вриједностима главног и орбиталног квантног броја.

Примјер:  $3p$        $n=3, l=1$

**Магнетни квантни број**  $m$  (често се означава и као  $m_l$ ) повезан је са магнетним моментом електрона<sup>3</sup>, који се јавља због његовог орбиталног кретања. Вриједност магнетног квантног броја одређује оријентацију путање (орбите) у простору.

<sup>2</sup> За разлику од класичне у квантној теорији вриједности интензитета вектора момента импулса нису једнаке производу цијелог броја и Планкове константе  $\hbar$  -  $mvr = n\hbar$ . Такође, према Боровој теорији орбитални момент не може бити једнак нули (то би значило да је  $r=0$ , односно електрон пролази кроз језгро), док према квантној теорији може бити и једнак нули. Поред тога, према класичној теорији орбитални момент може имати само једну вриједност за сваку вриједност квантног броја  $n$ , а према квантној теорији може имати више вриједности за одређену вриједност квантног броја  $n$ .

<sup>3</sup> Веза између магнетног и одговарајућег орбиталног момента импулса електрона (види I разред Магнетни момент атома):

- класична веза између магнетног момента и момента импулса

$$p_m = \frac{e}{2m_e} L$$

- у квантној механици је магнетни момент (означава се са  $\mu$ ) повезан са моментом импулса на исти начин

$$\mu = \frac{e}{2m_e} L$$

$$\mu = \frac{e}{2m_e} \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad \rightarrow \quad \mu = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad \text{или} \quad \mu = \frac{L}{\hbar} \mu_B$$

Ако електрон у атому унесемо у спољашње магнетно поље, па  $z$  – осу усмјеримо у смјер тог поља, тада магнетни квантни број одређује  $z$  – пројекцију орбиталног момента импулса:

$$L_z = \hbar \cdot m_l$$

Магнетни квантни број (назива се и квантни број пројекције орбиталног момента на  $z$  осу) може да има сљедеће вриједности:

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

Магнетни квантни број може да има  $2l+1$  различитих вриједности. То значи да се енергетски ниво, одређен главним квантним бројем, цијепа у  $2l+1$  енергетских поднивоа.

У табели су дате могуће вриједности квантних бројева за неколико првих вриједности главног квантног броја.

Главни квантни број $n$	Орбитални квантни број $l$	Магнетни квантни број $m_l$
1	0	0
2	0	0
	1	-1
		0
1	1	
3	0	0
	1	-1
		0
		1
	2	-2
		-1
		0
1		
2	2	

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9,27 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T} \approx 5,8 \cdot 10^{-5} \frac{eV}{T} \quad - \quad \text{Боров магнетон}$$

Пошто главни квантни број одређује енергију електрона, из табеле се види да се електрон са једном вриједношћу енергије може наћи у више различитих стања.

За стање система који има неколико подстања која имају исту енергију, каже се да дегенерисано. Основно стање ( $n=1$ ) није дегенерисано јер је једина дозвољена вриједност  $l=0$ , која нема магнетних подстања. Прво побуђено стање ( $n=2$ ) има два подстања са  $l=0$  и  $l=1$ , од којих прво нема магнетних подстања, а друго има три  $m_l = -1$ ,  $m_l = 0$  и  $m_l = +1$  што укупно чини четири подстања. Укупна дегенерација стања одређеног квантног броја  $n$  је  $n^2$ . На основу познавања структуре поднивоа могу да се објасне интензитети спектралних линија, постојање fine структуре спектралних линија и структура атома тежих од водоника.

Интензитети спектралних линија зависи од више параметара, али је најбитнији да ли прелаз између одређених подстања може да се деси. Ограничења за емисију или апсорпцију на основу главног квантног броја  $n$  не постоје. Ограничења која су повезана са орбиталним квантним бројем  $l$  – дозвољени су само прелази само између стања чији се орбитални квантни бројеви  $l$  разликују за  $\pm 1$ . Ограничења која су повезана са магнетним квантним бројем  $m_l$  – дозвољени су само прелази само између стања чији се магнетни квантни бројеви  $m_l$  разликују за 0 или  $\pm 1$ .

Према Шредингеровој једначини стање електрона у атому одређено је са три квантна броја (о којима је било ријечи). На основу експеримената закључено је да електрон има још један момент импулса који је назван спин. У почетку се мислило да је спин условљен обртањем електрона око сопствене осе и да постоје двије могућности његове ротације – у смјеру казаљке на сату и у супротном смјеру од смјера кретања казаљке на сату. Огледи су показали да представа о електрону као куглици која ротира око своје осе није тачна. У обзир морају да се узму и његова таласна својства.

Спин треба схватити као унутрашње својство електрона које електрон посједује, слично као што има масу и наелектрисање. Спин нема аналогију у макросвијету.

Спин је је сопствени или унутрашњи момент импулса електрона. Одговарајући магнетни момент зове се спински магнетни момент.

Спински квантни број се добија рјешавањем Диракове једначине која представља проширење Шредингерове једначине. Спин (**спински квантни број**) одређује сопствени момент импулса електрона. Вриједност спинског квантног броја је  $s = \frac{1}{2}$ .

Вриједност споственог момента импулса електрона (аналогија са орбиталним моментом импулса) је:

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} \quad s = \frac{1}{2}$$

$$S = \hbar \frac{\sqrt{3}}{2}$$

По аналогоји са орбиталним моментом, пројекција сопственог момента импулса је:

$$S_z = \hbar \cdot m_s$$

где је  $m_s$  **магнети спински квантни број**<sup>4</sup>.

По аналогоји са магнетним квантним бројем, који има вриједности  $-l \leq m \leq l$ , може да се напише да су магнетни спински квантни број и спински квантни број повезани на следећи начин:

$$\begin{aligned} -s &\leq m_s \leq s \\ -\frac{1}{2} &\leq m_s \leq \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Магнетни спински квантни број електрона за сваку комбинацију квантних бројева  $n$ ,  $l$  и  $m_l$  може да има само двије вриједности:

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

---

<sup>4</sup> Спински квантни број (спин) и магнетни спински квантни број су различити појмови, мада се на томе понекад не инсистира. Често се каже спин електрона је  $\frac{1}{2}$ , а пројекције спина су  $\pm \frac{1}{2}$ .

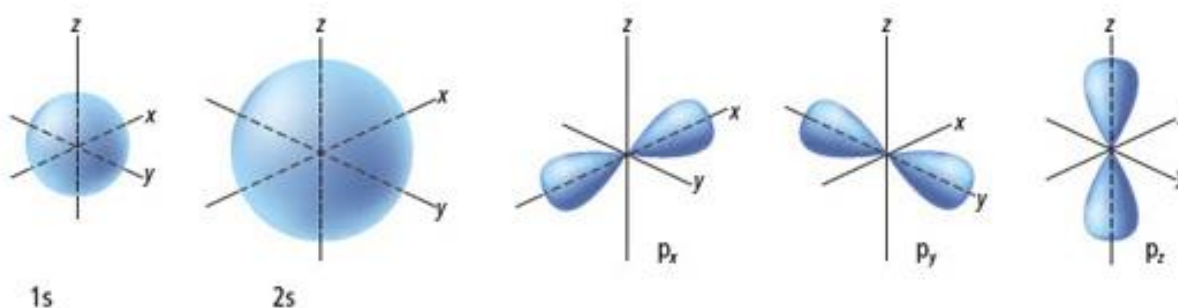
## Квантни електронски облак

У квантној теорији електрон се често представља електронским квантним облаком који представља расподјелу густине вјероватноће налажења електрона у одређеном дијелу простора око језгра.

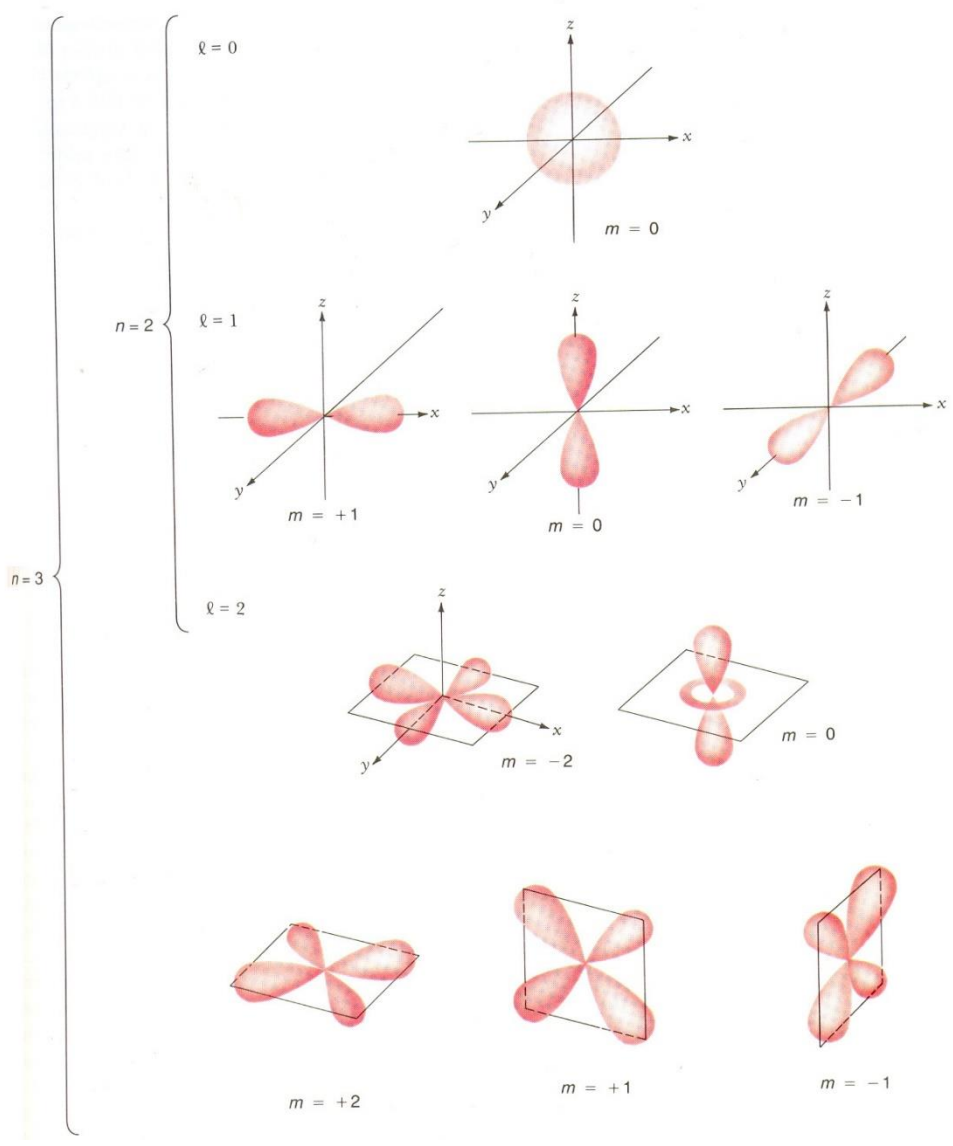
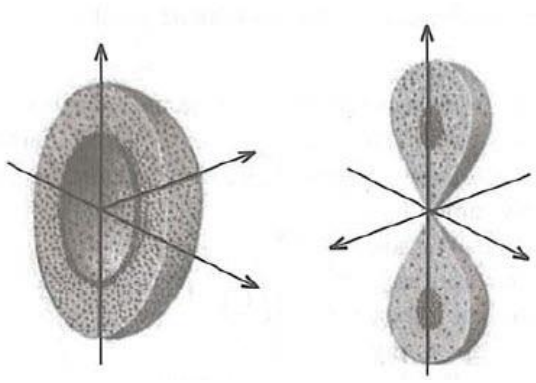
Примјеном Хајзенбергове релације неодређености на опис стања електрона у атому<sup>5</sup>, закључује се да електрон нема познату путању кретања јер би то значило да је неодређеност положаја електрона једнака нули. Ако је неодређеност положаја једнака нули неодређеност импулса би тежила бесконачности. То би значило да тачно знамо гдје је електрон, али пошто му је брзина веома велика он тамо не може да буде.

На питање где се електрон налази је негде унутар облака вјероватноће односно електронског облака. Назив квантни електронски облак је само сликовит приказ вјероватноће одређивања положаја електрона, а не облак у правом смислу те ријечи – није као облак на небу који заклања Сунце.

Изглед квантног електронског облака зависи од стања у коме се електрон налази. Пошто енергија зависи од квантног броја  $n$ , а квантни број  $l$  одређује момент импулса, а  $m$  његову оријентацију, значи да изглед електронског облака зависи од вриједности ових квантних бројева.

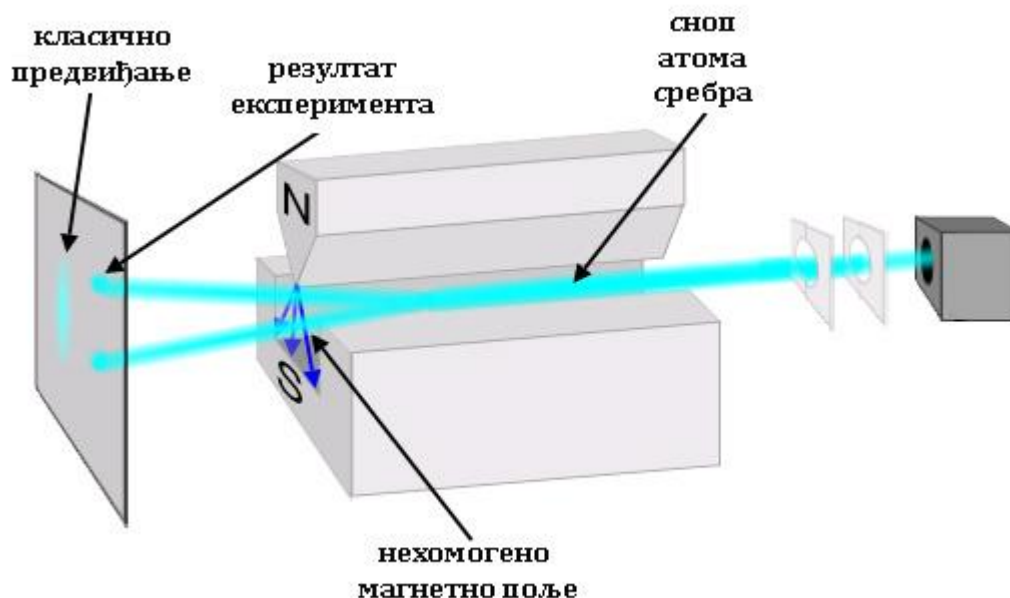


<sup>5</sup> Помоћу Хајзенбергове релације неодређености може (такође) да се докаже да електрон не може да се нађе у језгру.



## ШТЕРН-ГЕРЛАХОВ ОГЛЕД

Њемачки физичари Ото Штерн и Валтер Герлах извели су експеримент (1921.) са снопом атома сребра. Атоме сребра, су кроз узани отвор, усмјеравали у нехомогено магнетно поље. Магнетно поље се постепено појачава према крају на којем снап излази из магнетног поља.



Експеримент је показао да се снап дијели на два дијела, тако да се на фотографској плочи региструју два трага.

Атоми сребра имају само један валентни електрон у  $s$  стању (у основном стању), које је одређено орбиталним квантним бројем  $l=0$ . Због тога је и орбитални магнетни момент електрона једнак нули. Зато не може да дође до интеракције између спољашњег магнетног поља и магнетног поља електрона који је последица орбиталног кретања око језгра. Подјела снопа атома сребра на два дијела, под утицајем спољашњег магнетног поља, указује да електрон посједује још неки додатни магнетни момент. Овај магнетни момент може да има двије оријентације – једна у смјеру спољашњег магнетног поља, а друга у супротном смјеру.

Овај неочекивани резултат је омогућио увођење сопственог момента импулса електрона односно спина.



Холандски физичари Самјуел Гаудсмит и Џорџ Уленбек (1925.) мјерени магнетни момент електрона објашњавају ротацијом електрона око сопствене осе. Од тога потиче и порекло назива спин. Показало се да такво тумачење није коректно, али је назив остао. Показало се да је спин уствари унутрашње својство честица, као на примјер маса и наелектрисање.

#### Додатак 1

Проучавањем атомских спектра утврђено је да се поједини нивои атома у магнетном пољу не цијепају на  $2l + 1$  поднивоа као што предвиђа теорија. Посебно су запажени необични случајева цијепања нивоа на два поднивоа. Да би се објаснио овај недостатак холандски физичари Самјуел Гаудсмит и Џорџ Уленбек (1925.) су претпоставили да електрон поред орбиталног, има и сопствени магнетни момент, који су назвали спински магнетни момент или спин електрона.

Својим орбиталним кретањем у атому електрон ствара сопствено магнетно поље. Ако је претпоставка о спину тачна, због међусобног дјеловања спинског магнетног поља и сопственог магнетног поља (због орбиталног кретања) требало би да се јави цијепање енергетских нивоа и без спољашњег магнетног поља. Ово је потврђено експериментално. Многе спектралне линије се цијепају на дублете. Примјер: Прва линија Балмерове серије, која настаје при преласку електрона из М у L љуску, цијепа се на двије блиске линије које су узајамно удаљене 0,14nm.

#### Додатак 2

Показало се да је спин електрона физичко својство не само електрона већ и свих честица миросвијета. Честице које имају цјелобројни спин називају се бозони, а честице које имају полуцијели спин називају се фермиони.