

Физичка хемија 2

за студијски програм Хемикар (022Н1)

шк. 2019/2020

8. Векторски модел атома-угаони моменти електрона

19. март 2020.

Др Гордана Ћирић-Марјановић, редовни професор

Vektorski model atoma

Vektorski model atoma je model kod koga se **prikaz atoma svodi na zamenu svih njegovih elemenata odgovarajućim vektorima.**

Na primer, kruženje elektrona oko jezgra predstavlja se, umesto orbitama, vektorima orbitnog ugaonog i orbitnog magnetnog momenta.

Mnoge pojave mogu se opisati svođenjem na interakciju odgovarajućih vektora.

Ovaj model ima prednost jer se u njemu koriste veličine koje mogu da se mere i naročito je koristan u atomskoj spektroskopiji.

Elementi vektorskog modela

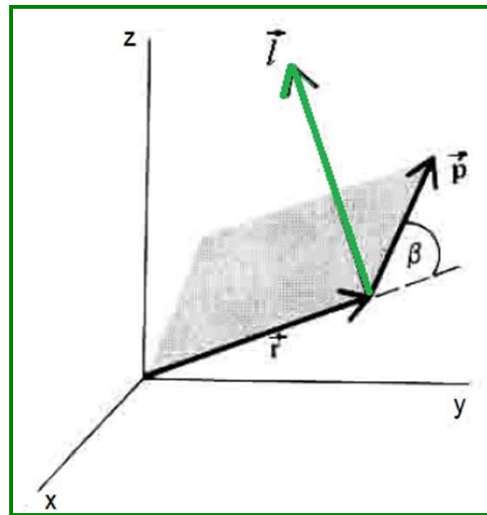
Osnovni elementi vektorskog modela su ugaoni momenti elektrona:

- **orbitalni ugaoni moment elektrona**
- **spinski ugaoni moment elektrona.**

Orbitalni ugaoni moment elektrona

Kvantni brojevi l i m , definišu orbitalni ugaoni momenat l elektrona koji kruži oko jezgra. Da bi objasnili značenje ovih kvantnih brojeva treba da znamo definiciju orbitalnog ugaonog momenta \vec{l} .

Orbitalni ugaoni moment \vec{l} čestice definiše se vektorskim proizvodom $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$. To je vektor \vec{l} koji je normalan na vektore \vec{r} i \vec{p} i ima intenzitet $rp\sin\beta$, kao što je prikazano na Slici 3.



**Podsećanje:* Linearni moment \vec{p} definisan je sa $\vec{p} = m\vec{v}$, gde je m masa čestice, u našem slučaju elektrona.

SLIKA - Definicija orbitalnog ugaonog momenta kao vektora.

Elektron u orbitali sa kvantnim brojem l ima orbitalni ugaoni moment veličine (intenziteta) $\sqrt{l(l+1)} \hbar$. Dakle, kvantni broj l kvantira orbitalni ugaoni moment \vec{L} .

$$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

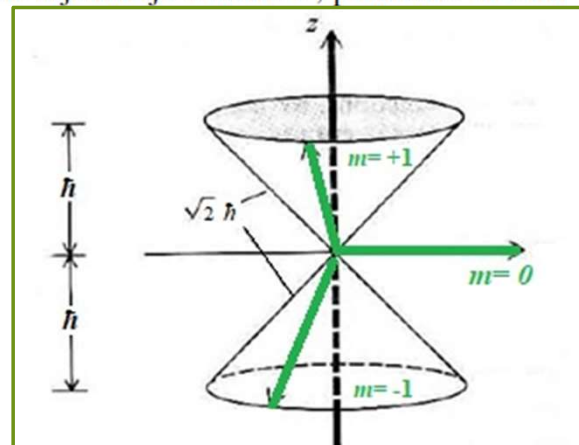
Elektron u orbitali sa kvantnim brojem m_l ima z-komponentu ugaonog orbitalnog momenta jednaku $m_l \hbar$, gde je

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

Pod z-komponentom ugaonog momenta podrazumevamo veličinu projekcije ovog momenta na proizvoljno izabranu z-osu, koju obeležavamo sa L_z

$$L_z = m_l \hbar$$

Na Slici prikazane su dozvoljene prostorne orijentacije vektora orbitalnog ugaonog momenta \vec{L} i njegove projekcije na z-osu, za slučaj kada je $l = 1$. Dakle, ako je kvantni broj $l = 1$, intenzitet vektora ugaonog orbitalnog momenta $|\vec{L}|$ ima vrednost $\sqrt{2} \hbar$. Kvantni broj m_l ima vrednosti $-1, 0, +1$, tako da projekcije vektora \vec{L} na z-osu imaju vrednosti $-\hbar, 0$ i \hbar (dakle ukupno $(2l+1)$ mogućih vrednosti, tj. onoliko različitih vrednosti koliko ima i kvantni broj m_l). Znači, u ovom slučaju postoje tri prostorne orijentacije vektora \vec{L} , prikazane na Slici

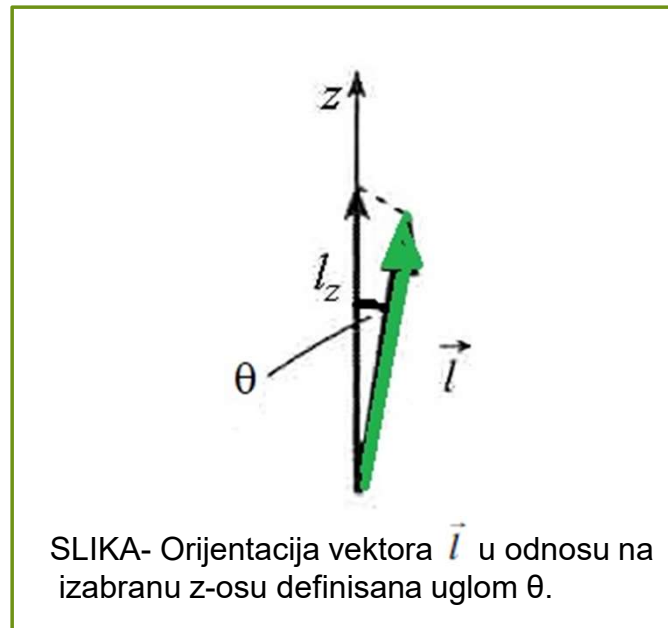


Slika Dozvoljene prostorne orijentacije vektora \vec{L} elektrona za $l = 1$. Projekcije vektora \vec{L} definisane su magnetnim orbitalnim kvantnim brojem m_l (koji može za $l=1$ imati vrednosti $-1, 0$ i $+1$) i iznose $-\hbar, 0$ i \hbar . Intenzitet vektora \vec{L} je $\sqrt{2} \hbar$.

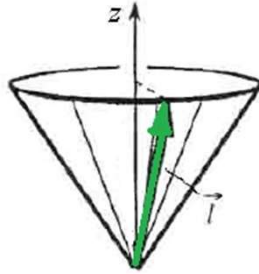
Ugao (θ) između vektora orbitalnog ugaonog momenta \vec{l} i njegove projekcije projekcije l_z (vidi sliku ispod) može imati samo određene vrednosti, koje se izračunavaju iz relacije

$$\cos\theta = \frac{l_z}{|\vec{l}|} = \frac{m_l \hbar}{\sqrt{l(l+1)\hbar}} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Vrednosti $\cos\theta$ (tj. odnosa vektora \vec{l} i njegove projekcije l_z) jednoznačno su određene kvantnim brojevima l i m_l . Dakle, prema gornjem izrazu, **samo određene orijentacije vektora (određene uglom θ) su dozvoljene, i njih definišu kvantni brojevi l i m_l**

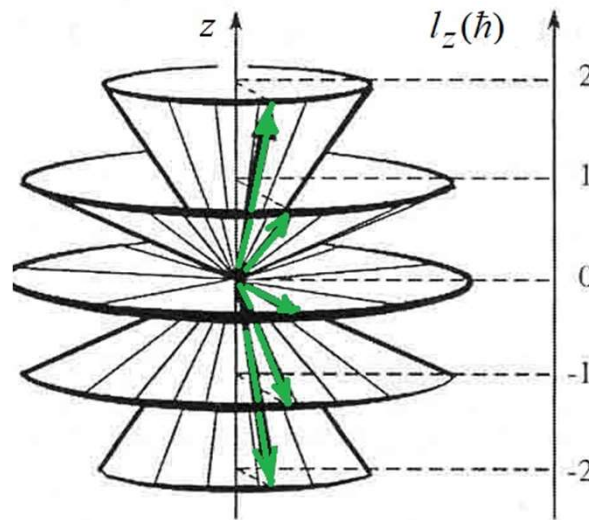


Vektor \vec{l} se u stvari nalazi na površini **konusa** opisanog oko pravca proizvoljno odabrane z ose, koji je definisan konusnim uglom θ (slika ispod), odnosno kvantnim brojevima l i m_l .



SLIKA - Prostorno kvantiranje vektora orbitalnog ugaonog momenta \vec{l} .
 Za svaku orijentaciju (svaki ugao θ) vektor \vec{l} nalazi se na površini kupe određene uglom θ .
 Ugao kupe zavisi od kvantnih brojeva l i m_l .

Primer. Za kvantni broj $l = 2$ postoji $2l + 1 = 5$ stanja sa različitim kvantnim brojem $m_l = 2, 1, 0, -1, -2$, za koje su vrednosti projekcija $l_z = 2\hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2\hbar$. To su degenerisana stanja podjednake energije (5 degenerisanih stanja sa istim l i različitim m_l , slika ispod).



Spinski ugaoni moment elektrona

Da bi se potpuno definisalo stanje elektrona u atomu, potrebno je odrediti ne samo orbitale koje on zauzima (odnosno kvantne brojeve n , l i m_l) već i njegov **ugaoni spinski moment** \vec{s} .

Prema Dirakovoj relativističkoj kvantnoj mehanici spinski ugaoni momenat je unutrašnja, osnovna osobina elektrona kao što je njegova masa i naelektrisanje.

Spinski ugaoni momenat opisuje se pomoću dva kvantna broja: **kvantnim brojem spina s** , i **magnetnim spinskim kvantnim brojem m_s** koji kvantira spin, tj. određuje vrednost projekcije spinskog ugaonog momenta na z osu, s_z .

Intenzitet spinskog ugaonog momenta određuje se izrazom:

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

s je kvantni broj spina koji za elektron ima samo jednu vrednost $\frac{1}{2}$.

To znači da i veličina (intenzitet vektora) ugaonog spinskog momenta elektrona ima konstantnu vrednost $|\vec{s}| = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar$.

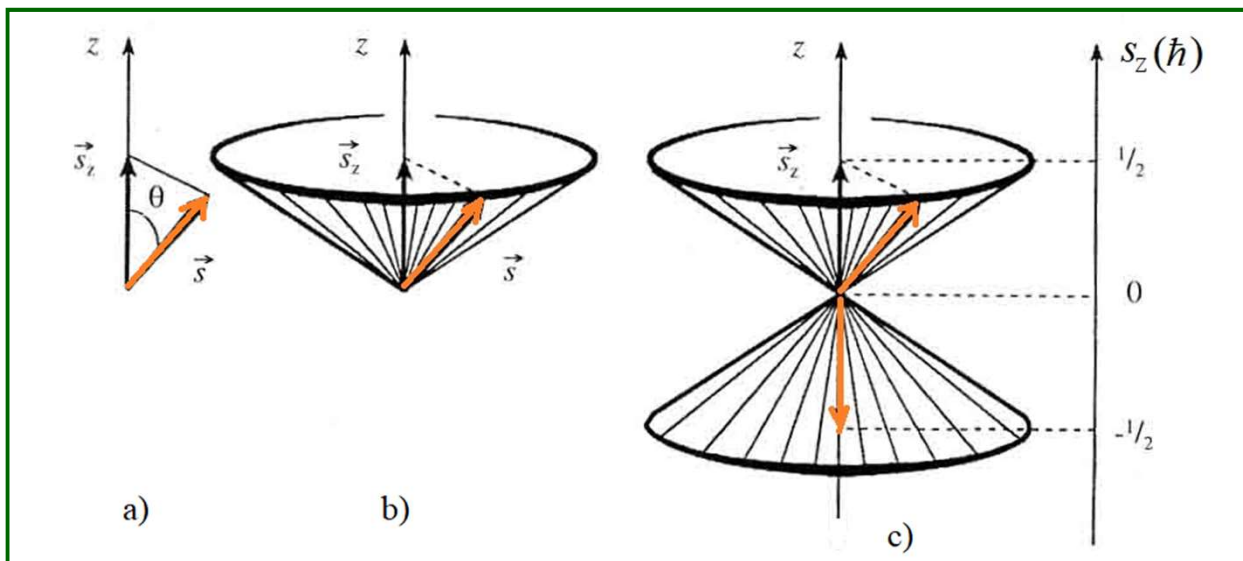
Projekcija spina s_z duž odabranog pravca (z) može imati vrednosti

$$s_z = m_s \hbar$$

gde je **m_s magnetni kvantni broj spina** čije su vrednosti $m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

dakle, moguće su samo dve orijentacije vektora \vec{s} elektrona duž odabrane z ose, odnosno dve vrednosti projekcije: $s_z = \frac{1}{2} \hbar$ i $s_z = -\frac{1}{2} \hbar$ (slika ispod).

Orijentacija koja odgovara $m_s = +\frac{1}{2}$ često se obeležava sa α ili \uparrow a orijentacija koja odgovara $m_s = -\frac{1}{2}$ obeležava se sa β ili \downarrow



Spinski ugaoni momenat elektrona \vec{s} i njegove orijentacije u odnosu na z osu.

Spin-orbitna interakcija-ukupni ugaoni moment elektrona

Naelektrisanja u kretanju stvaraju magnetna polja. Elektron ima magnetni spinski momenat, μ_s , koji proizilazi iz njegovog spina i magnetni orbitalni momenat, μ_l , koji potiče od njegovog orbitalnog ugaonog momenta. Oba vektora magnetnog spinskog i magnetnog orbitalnog momenta antiparalelna su odgovarajućim ugaonim momentima.

Spinski i orbitalni magnetni momenat međusobno interaguju i ta interakcija, poznata kao **spin-orbitna interakcija** (ili sprezanje), prenosi se na ugaone momente prouzrokujući njihovo sprezanje (vektorsko) u *ukupni ugaoni momenat elektrona*, \vec{j}

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$$

Ukupni ugaoni momenat elektrona, \vec{j} opisan je kvantnim brojevima j i m_j . Moguće vredosti ukupnog ugaonog momenta date su izrazom:

$$|\vec{j}| = \sqrt{j(j+1)} \hbar$$

gde je j = kvantni broj ukupnog ugaonog momenta elektrona, i ima vrednosti

$$j = l \pm s = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{za } l > 0 \quad \text{i}$$

$$j = \frac{1}{2} \quad \text{za } l = 0$$

Duž proizvoljno izabrane (z) ose vektor \vec{j} ima projekciju j_z datu izrazom

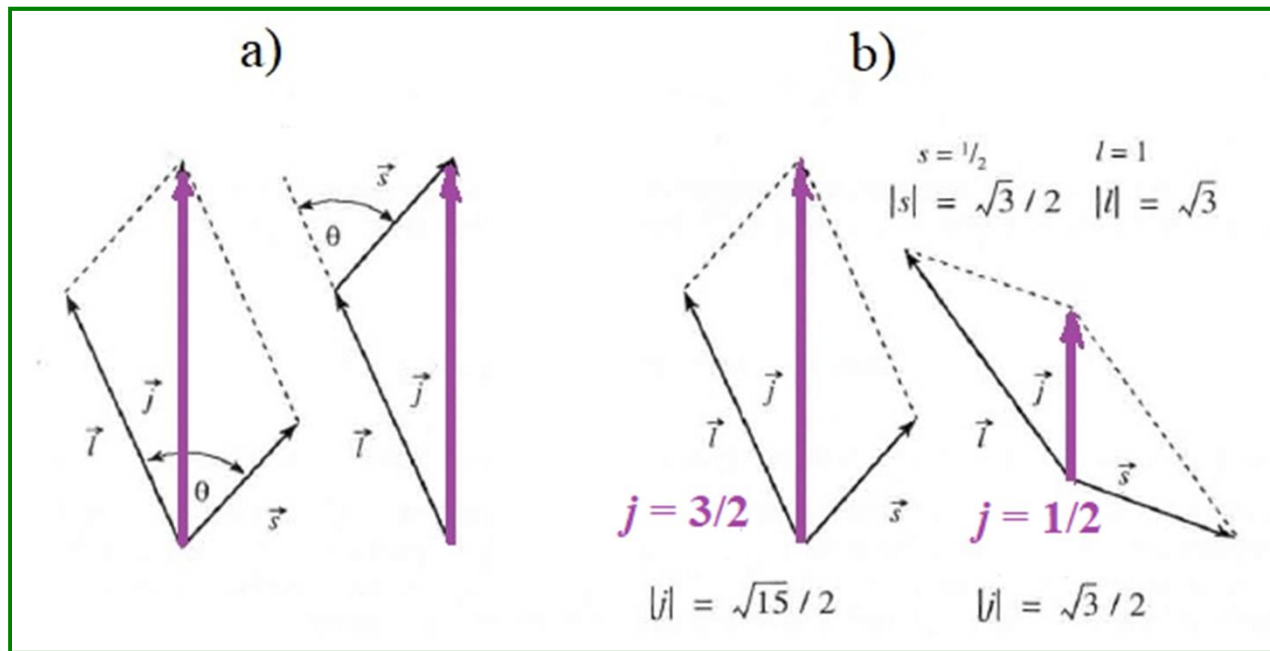
$$j_z = m_j \hbar$$

$$m_j = j, j-1, \dots, -j$$

m_j je magnetni kvantni broj ukupnog ugaonog momenta elektrona.

Za dati kvantni broj j postoji $(2j + 1)$ vrednosti kvantnog broja m_j .

videti sliku na narednom slajdu



Slika Ukupni ugaoni moment \vec{j} vektorski je zbir orbitnog \vec{l} i spinskog \vec{s} momenta impulsa (ugaonog momenta): a) vektori \vec{l} i \vec{s} sabiraju se po pravilu trougla ili po pravilu paralelograma, obrazujući kao rezultantu ukupni ugaoni moment \vec{j} ; b) slaganjem orbitnog i spinskog momenta impulsa, za $l = 1$ i $s = 1/2$ dobijaju se dva vektora ukupnog ugaonog momenta sa $j = 3/2$ i $j = 1/2$.