

Model valentnog elektrona

v/1

Do sada smo razmatrali atom vodonika ili ujemu sličnih atoma (iona). Kada imamo više e^- , tada rešenje Schröd. j-ne biće f-ja koordinata sviju elektrona. Nalaženje tih rešenja je izuzetno težak posao često puta nerešiv.

Međutim, spektar alkaličnih metala je sličan vodoniku. Tako da se talasni brojevi spektralnih linija mogu dobiti razlikom dvaju termina, stinu što sada termin biće oblika $T = \frac{R}{(n+\sigma)^2}$, gde je σ -veća popravka broja n . Ova popravka za određen seriju ima određenu vrednost. Kod alkaličnih atoma poslednji elektron je slabo vezan za 'ostatak' atoma. Tako da se govori o 'kretanju 'valentnog elektrona' u efektivnom polju 'ostataka'. Energija jonizacije e^- He je 24,58 eV dok za Li je 5,39 eV; za Ne 21,56 a za Na 5,14 eV.

Znači (Z-1)-elektron obrazuju stabilnu strukturu.

Valentni elektron je ekraniran od jezgra pomoću (Z-1)-elektrona

Molimo 'ostatak' deluje na e^- ne kao tačkasto naelektrisanje već kao složen sistem and se pot. energija može predstaviti redom:

$$U = -\frac{e^2}{r} - c_1 \frac{e^2}{r^2} - c_2 \frac{e^2}{r^3} - \dots$$

Prvi član - polje tačkastog naelektrisanja, drugi - pot. energija e^- u polju dipola $(\frac{e^2}{r^2})$ itd. U prvoj aproksimaciji:

$$U(r) \approx -\frac{e^2}{r} - c_1 \frac{e^2}{r^2}$$

Šr. j-na je sada:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin^2 \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} + c_1 \frac{e^2}{r^2} \right) \psi = 0.$$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$$

$$\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin^2 \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + l(l+1) Y = 0$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} + c_1 \frac{e^2}{r^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0$$

UPOREDIMO

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E + \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left[l(l+1) - c_1 \frac{2me^2}{\hbar^2} \right] \right\} R = 0 \quad [\text{ZA ALKALIJI ATOM}]$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E + \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad [\text{ZA ATOM VODONIKA}]$$

Možemo formulu da ih izjednačimo ako stavimo

$$l'(l'+1) = l(l+1) - c_1 \frac{2me^2}{\hbar^2}$$

Rešenje kv. j-ve (uzimajući samo zveče +) je:

$$l' = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(2l+1)^2 - 4 \frac{2me^2}{\hbar^2} c_1}$$

ili približno:

$$\sqrt{1-x} \approx 1 - \frac{1}{2}x$$

$$l' = -\frac{1}{2} + \frac{(2l+1)}{2} \sqrt{1 - \underbrace{4 \frac{2me^2}{\hbar^2} c_1}_{\text{malo}}} \approx -\frac{1}{2} + \frac{(2l+1)}{2} \left[1 - \frac{4me^2}{\hbar^2 (2l+1)^2} c_1 \right]$$

Ako je $c_1 = 0$ to $l' = l$. Člku $\frac{2me^2 c_1}{\hbar^2 (2l+1)^2}$ uračunava popravku

Dalje;

$$l' = l - \frac{me^2 c_1}{\hbar^2 (l + \frac{1}{2})}$$

Prije energija samo zvečeli:

$$E_{n,l} = - \frac{me^4}{2(n_r + l' + 1)^2 \hbar^2}$$

Umesto glavnoj kv. broja $n = n_r + l + 1$ dobijamo, uopšteno govoreći neko broj $n^* = n_r + l' + 1$ (efektivni glavni kv. broj)

ili:

$$n^* = n_r + l + 1 - c_1 \frac{me^2}{\hbar^2 (l + \frac{1}{2})} \equiv n + \sigma_l$$

Popravka σ_l je:

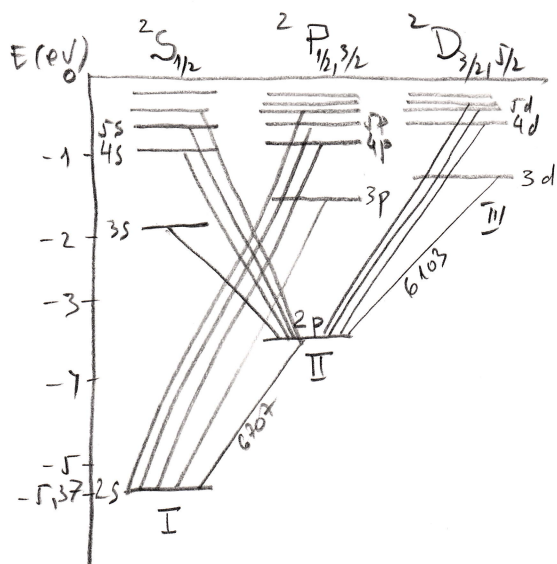
$$\sigma_l = -c_1 \frac{me^2}{\hbar^2 (l + \frac{1}{2})}$$

Dalje:

$$E_{n,l} = - \frac{me^4}{2\hbar^2 (n + \sigma_l)^2}$$

Novina je što energija sada zavisi i od orbitalnog kv. broja što daje suštinsku razliku energije alkalijskog metala od energije vodonika.

šema nivoa atoma litijuma



Zračenje nastaje prelaskom optičkog e^- sa jednog nivoa na drugi. Međutim nisu svi prelazi mogućii. Tu važe sledeća selekciona pravila:

Δn - proizvoljno $\Delta l = \pm 1$

ti. gl. kv. broj može se menjati za proizvoljnu vrednost, a orbitelni samo za jedinicu.

Kod **Li** valentni e^- zauzima 2s-staje, prvi pobudeni nivo je 2p
 Linija je ~~na~~ 2p-2s je najintenzivnija jer je v-c'a da se desi
 takav prelat najveća to je tzv. rezonantna linija ($\lambda = 6707, 85 \text{ \AA}$)

Prelazi sa proizvoljnih p-stanja na 2s čini tzv. glavnu seriju

$w = 2s - mp \quad (m = 2, 3, 4, \dots)$

Daže, postoje još serije: Difuziona serija (prva boćna)

$w = 2p - md \quad (m = 3, 4, 5, \dots)$

Druge boćna (oštra) serija

$w = 2p - ms \quad (m = 3, 4, 5)$

Serije 3d-nf za Li i Na nazivaju se fundamentalne ili Bergmanove serije. One leže u infracrvenom delu spektra

Kod $_{11}\text{Na}$ ($1s^2 2s^2 2p^6 3s$) najviši nivo optičkog e^- je 3s staja, a prvi pobudeni nivo je 3p tako da taj prelat je najverovatniji i ta linija u spektru je najintenzivnija (žuta - $\lambda = 5890 \text{ \AA}$) i ovde mogu da se posmatraju difuziona, oštra, fundamentalna serija itd.

Za cesijum Cs najviši nivo je 6s

2.11.03

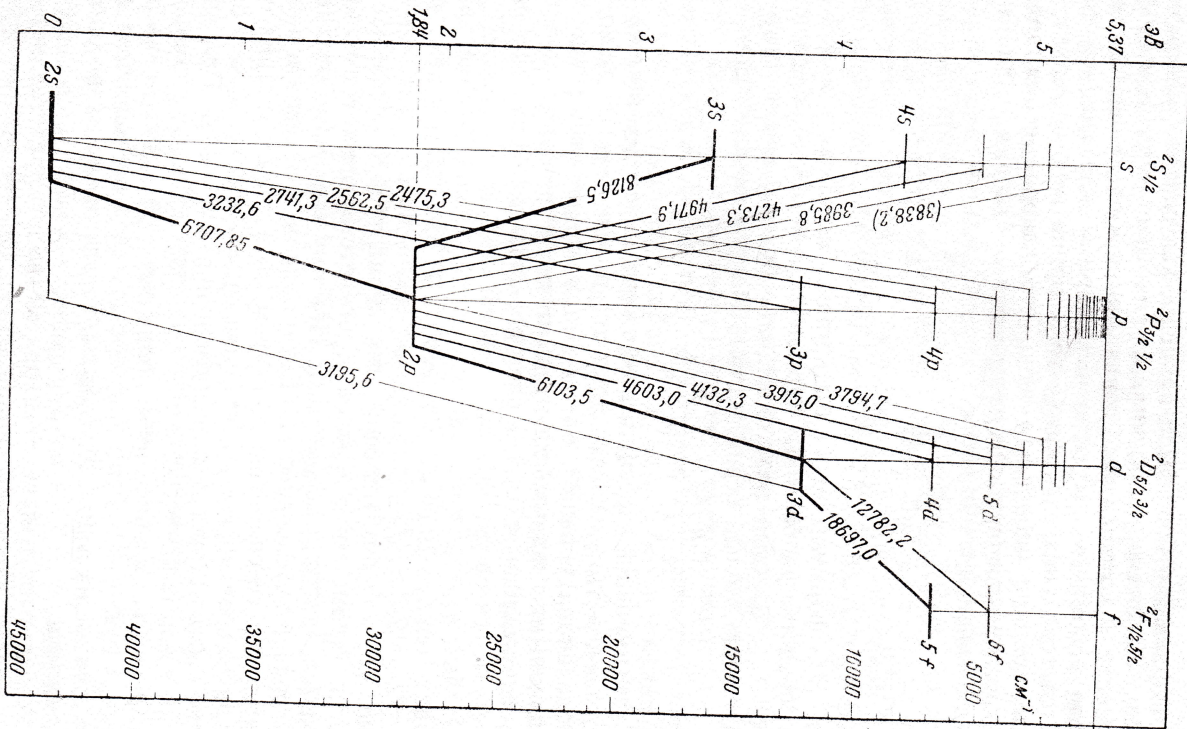


Рис. 31. Схема уровней энергии атома лития

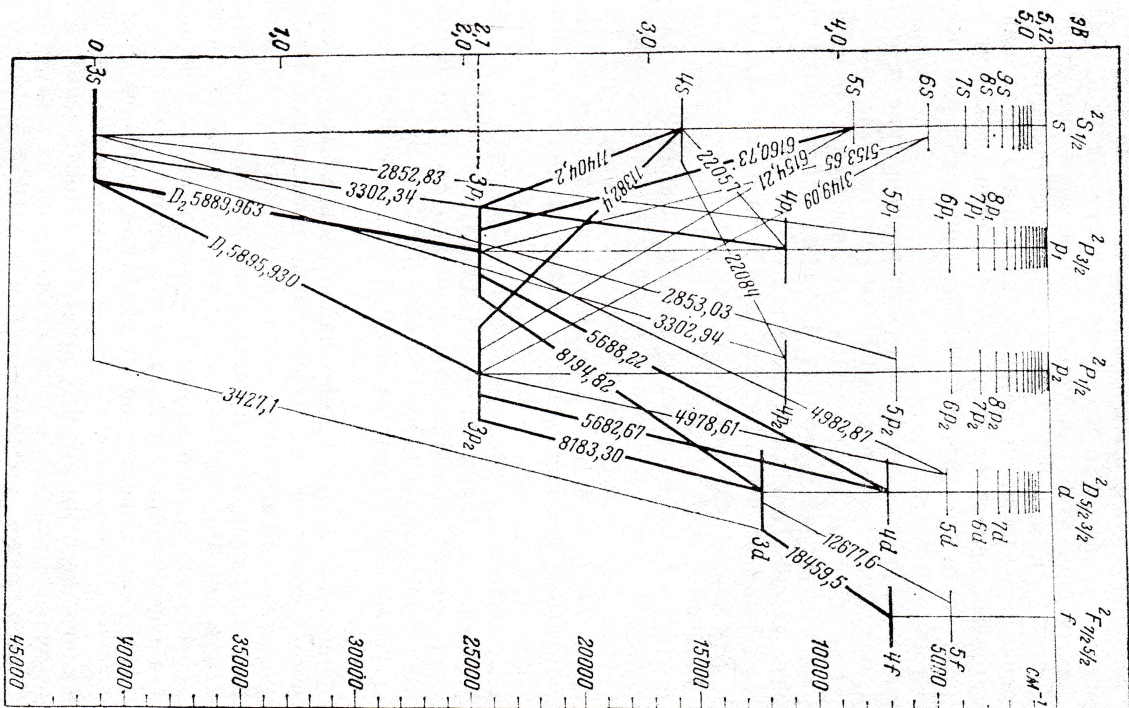


Рис. 32. Схема уровней энергии атома натрия