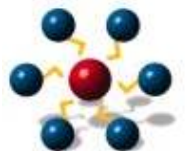


Atomernas spektra

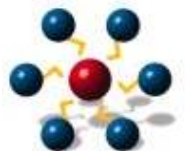
Matti Hotokka



Väteatomen

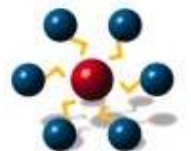
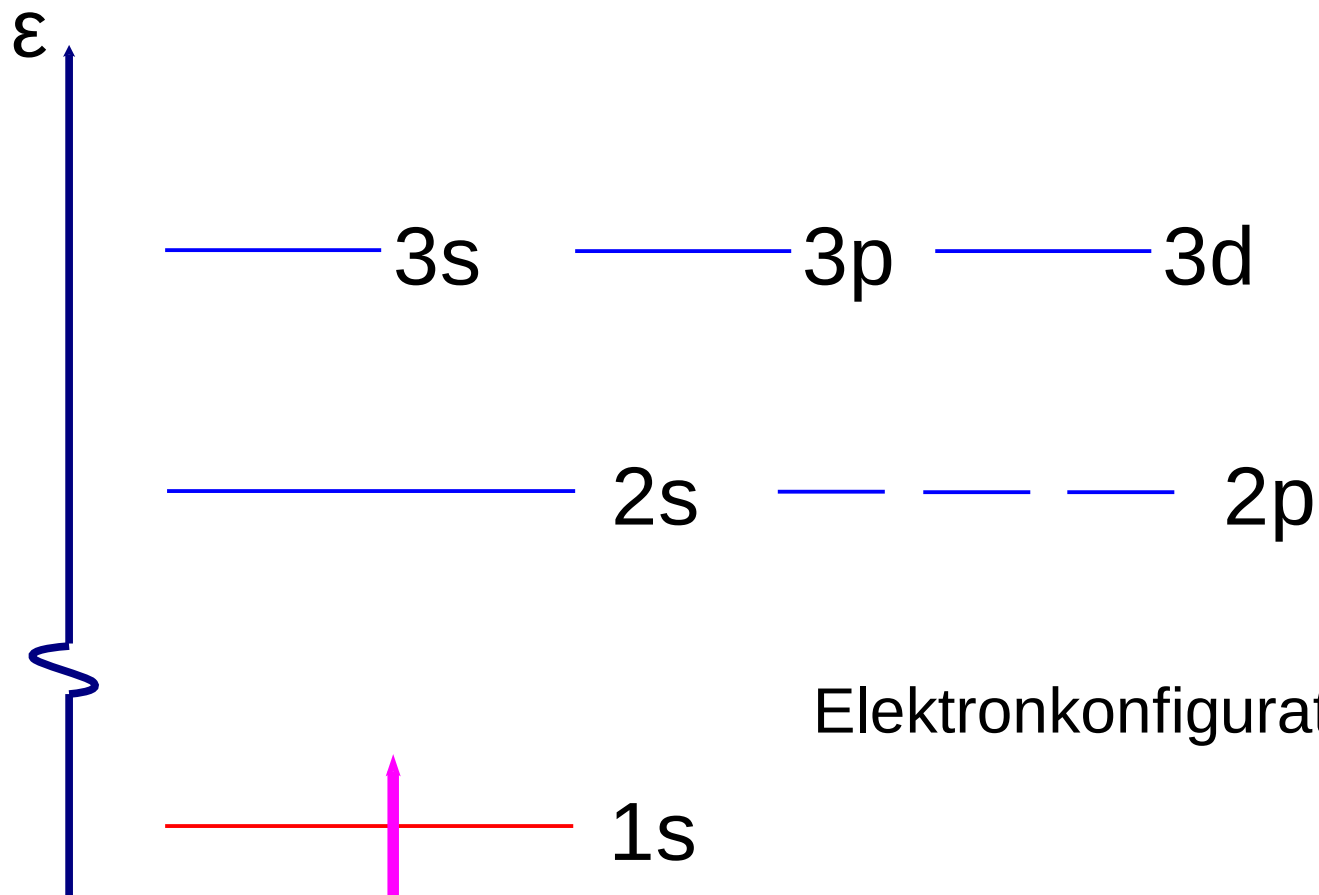
Olika atommodeller

- ⇒ Rutherford
- ⇒ Bohr
- ⇒ Schrödinger



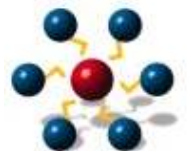
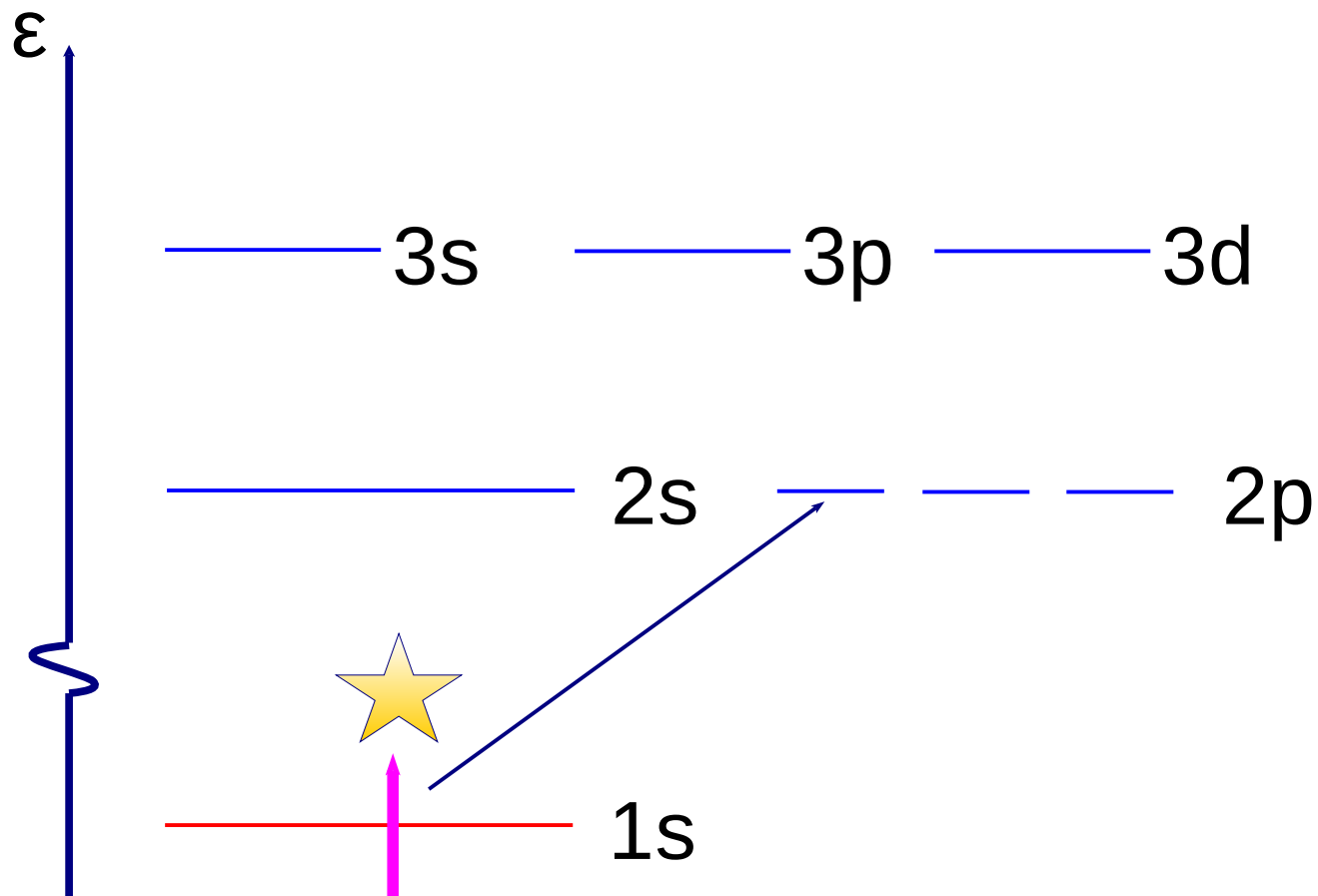
Väteatomen

Atomorbitaler



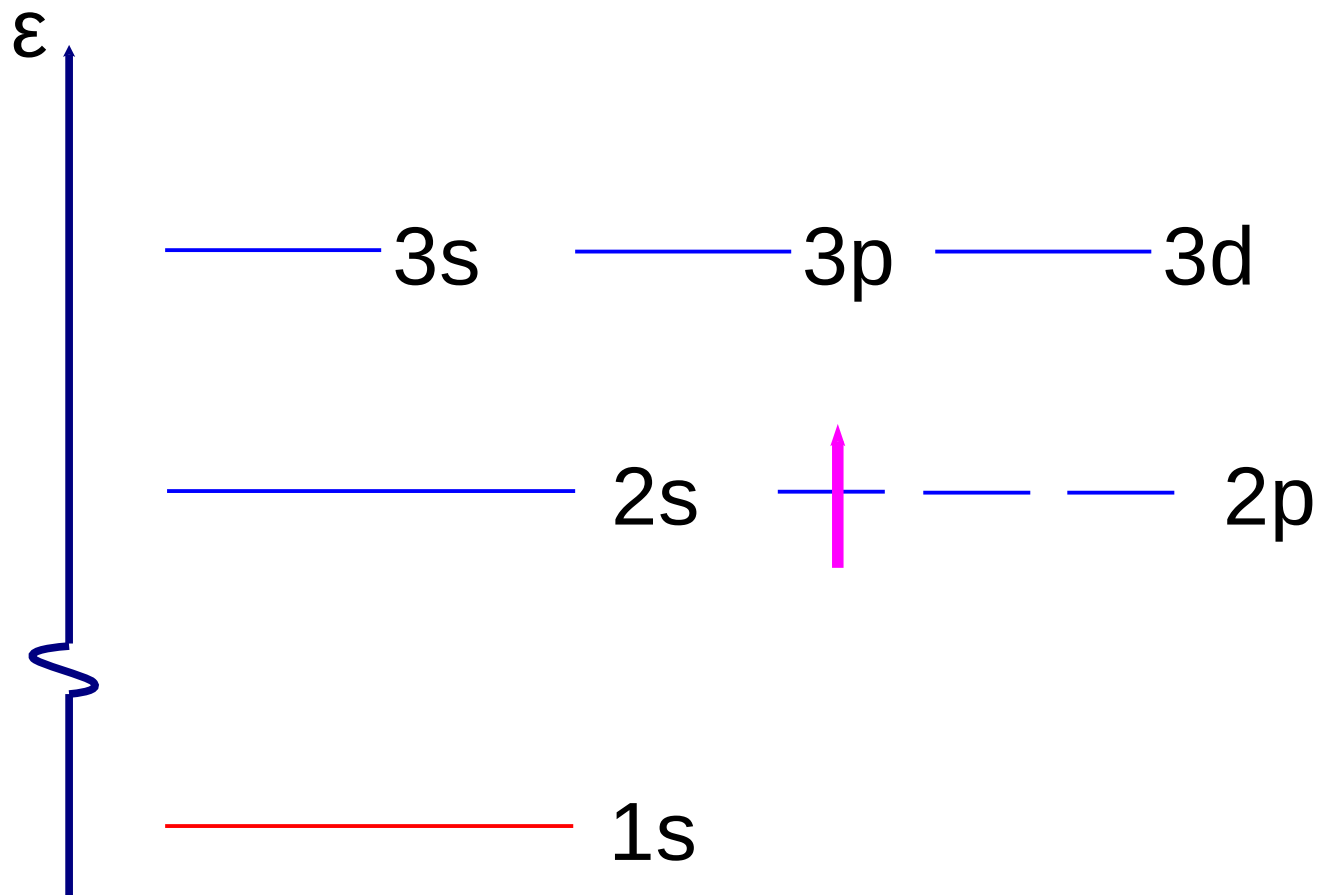
Väteatomen

Övergång: elektronen flyttas



Väteatomen

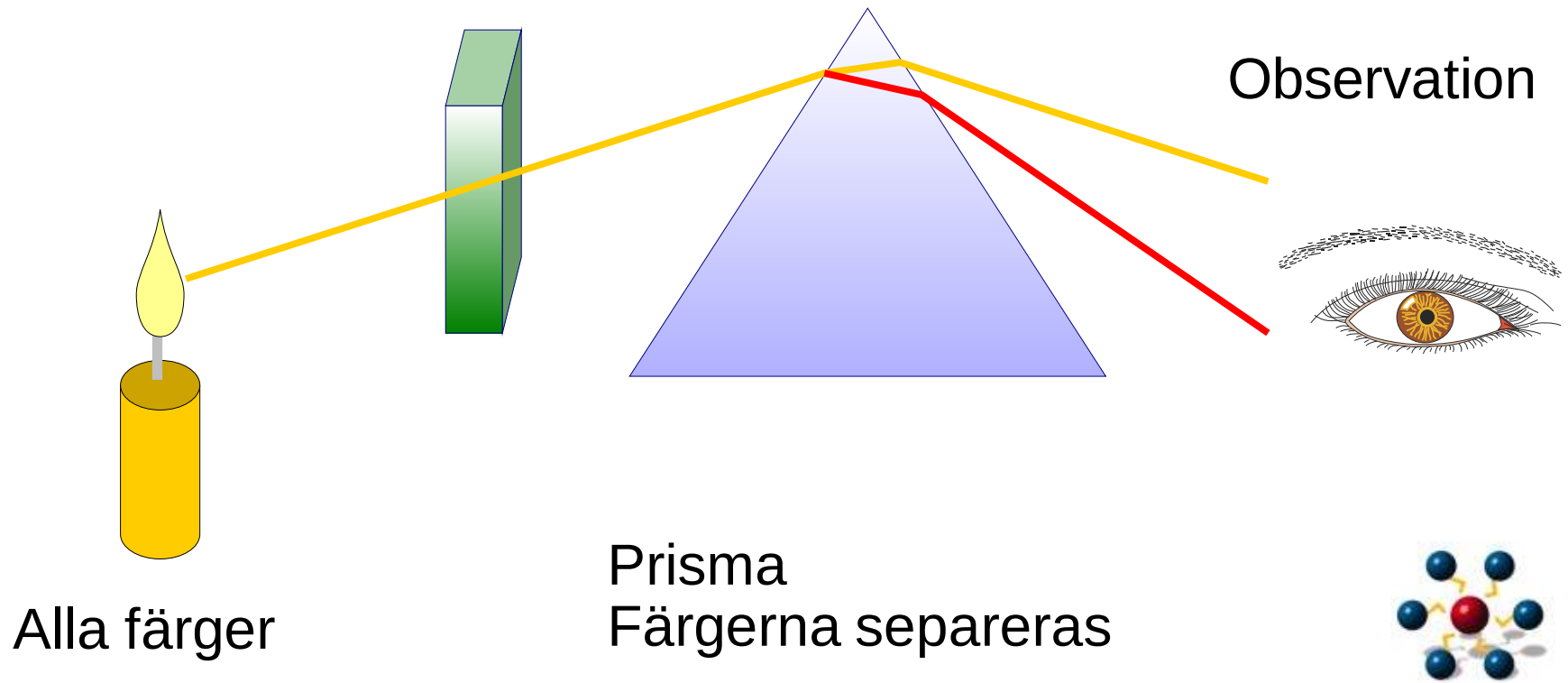
Övergång: elektronen flyttas



Hur observeras?

Spektroskopi

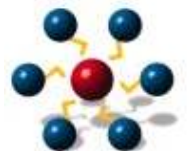
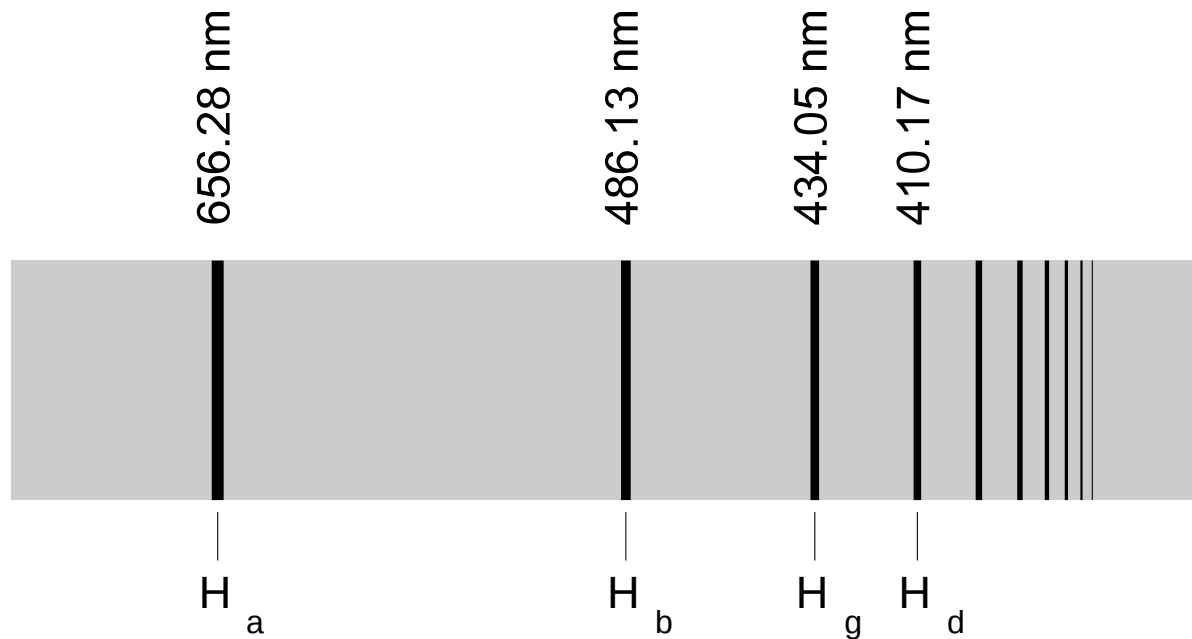
En färg absorberas



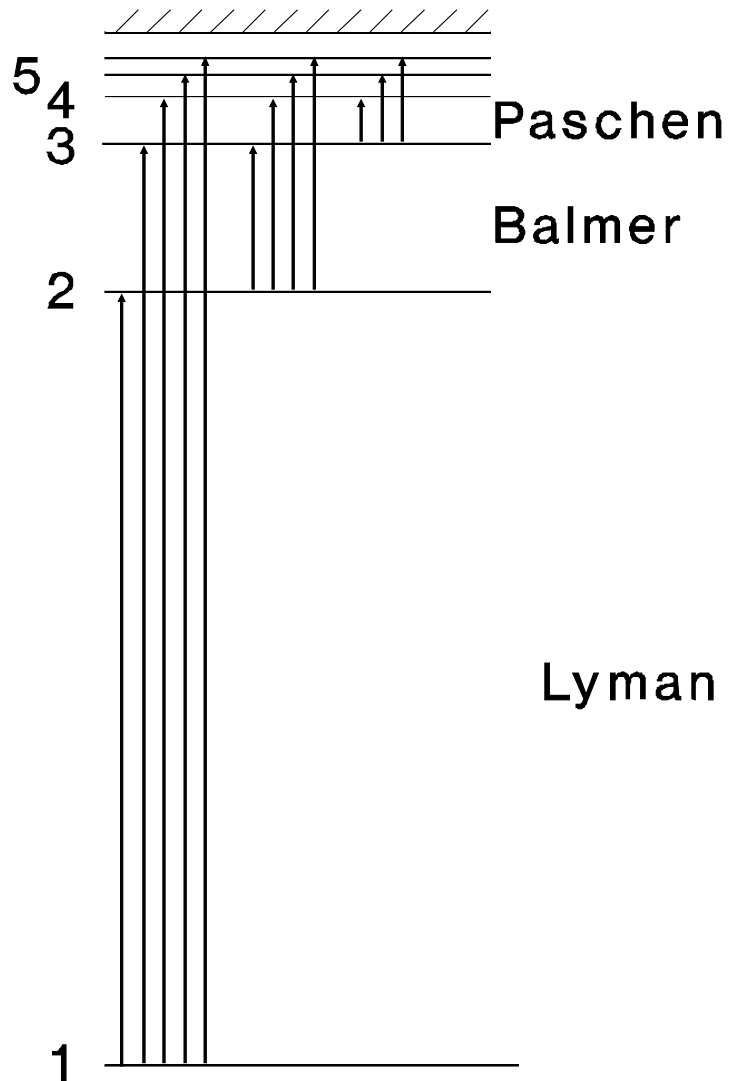
Vad observeras?

Absorptionslinjer

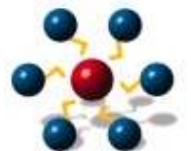
- ⇒ Mörka linjer mot ljus bakgrund
- ⇒ Här Balmer serie



Väteatomens absorptioner

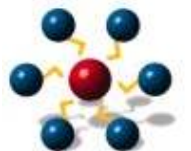


Lyman	121.58 nm
	102.58 nm
	97.26 nm
	656.53 nm
Balmer	486.32 nm
	434.21 nm
	1.8758 μm
Paschen	1.2822 μm
	1.0942 μm
	2467.5 cm^{-1}
Brackett	3807.9 cm^{-1}
	4616.1 cm^{-1}
Pfund	1304.4 cm^{-1}
	2148.6 cm^{-1}
	2673.1 cm^{-1}



Emission

- ⇒ Om man har lyckats excitera väteatomen så övergår den spontant tillbaka till grundtillståndet
- ⇒ Då emitteras ljus med samma våglängd där absorptionen sker
- ⇒ Enstaka ljusa spektrallinjer observeras mot mörk bakgrund



Övergångsenergi

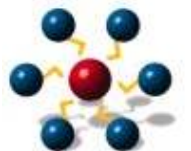
Rydbergs formel

- ⇒ Orbitalens huvudkvanttal n bestämmer väteatomens energi

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{8n^2\varepsilon_0^2h^2}$$

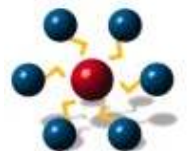
- ⇒ Övergångsenergin då elektronen flyttas från nivå n_1 till nivå n_2 är

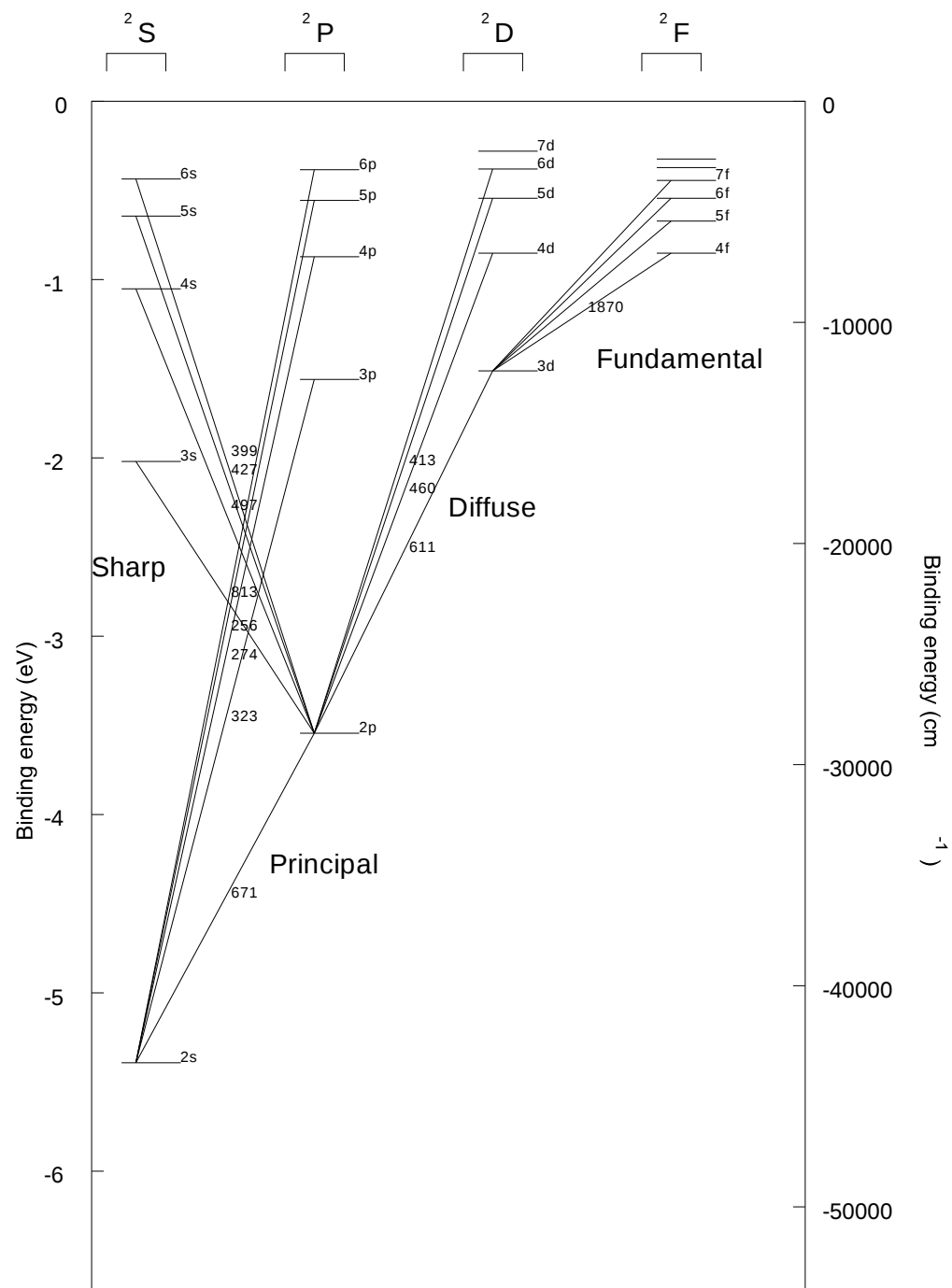
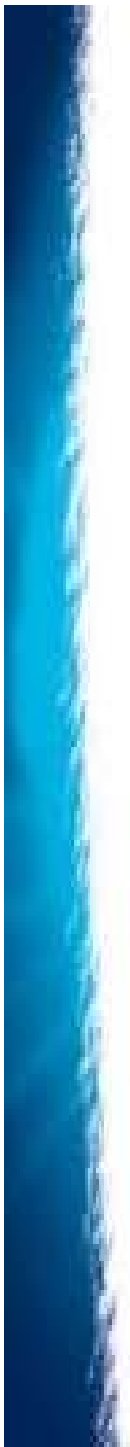
$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{mZ^2e^4}{8\varepsilon_0^2h^2} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$



Alkalimetaller

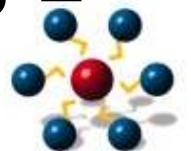
- ⇒ Nästan väteatomer: en ns elektron
- ⇒ Skillnad: i Li har 2s och 2p olika energier
- ⇒ Likaledes har 3s, 3p och 3d olika energier
- ⇒ Således kommer spektret att visa inte en spektrallinje för övergångarna $3 \leftarrow 2$ utan en serie linjer för $np \leftarrow 2s$ ($2p \leftarrow 2s$ möjlig), en annan serie för $ns \leftarrow 2p$, en tredje för $nd \leftarrow 2p$ etc.





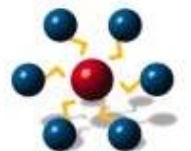
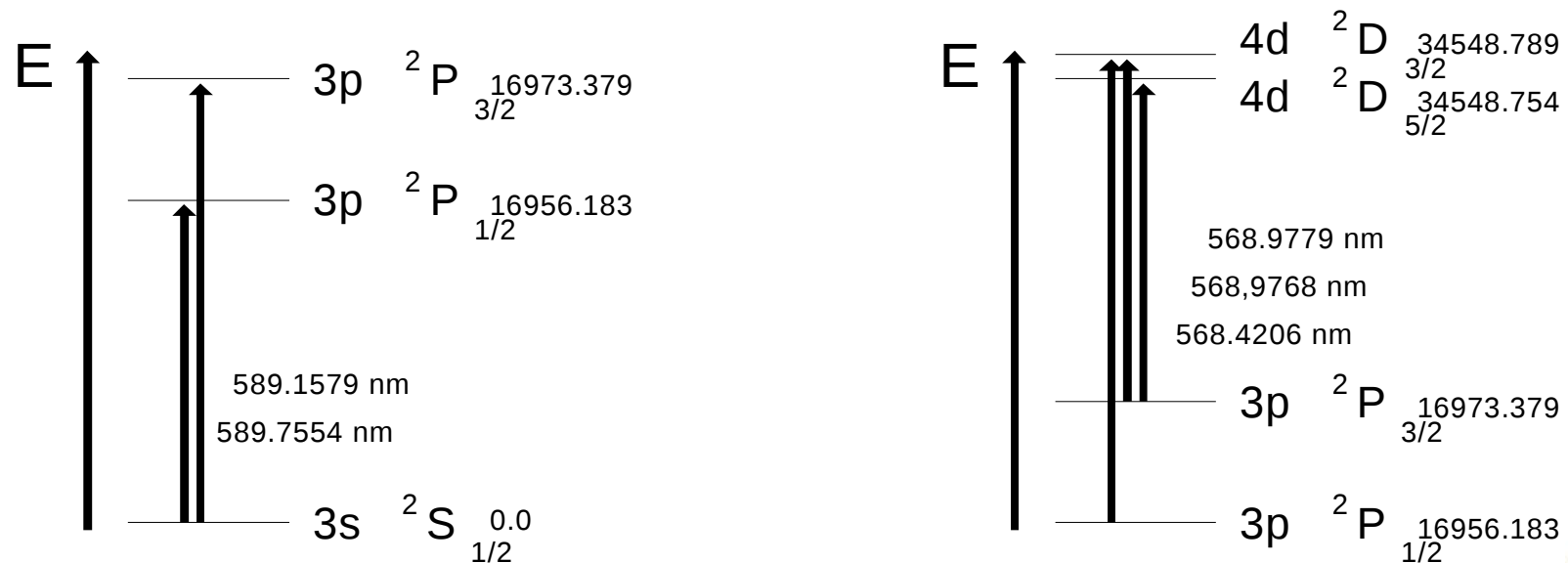
Impulsmoment

- ⇒ Atomorbitalens bikvanttal ℓ
- ⇒ Elektronens spinn S
- ⇒ Kan inte blandas
- ⇒ I den relativistiska kvantkemin blandas de ändå
- ⇒ Låt t.ex. Na ha i exciterat tillstånd en elektron i 3p orbitalen: $\ell = 1$, $S = \frac{1}{2}$, totala impulsmomentet kan vara $J = 1\frac{1}{2}$ eller $J = \frac{1}{2}$



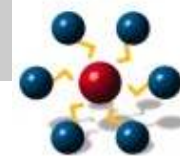
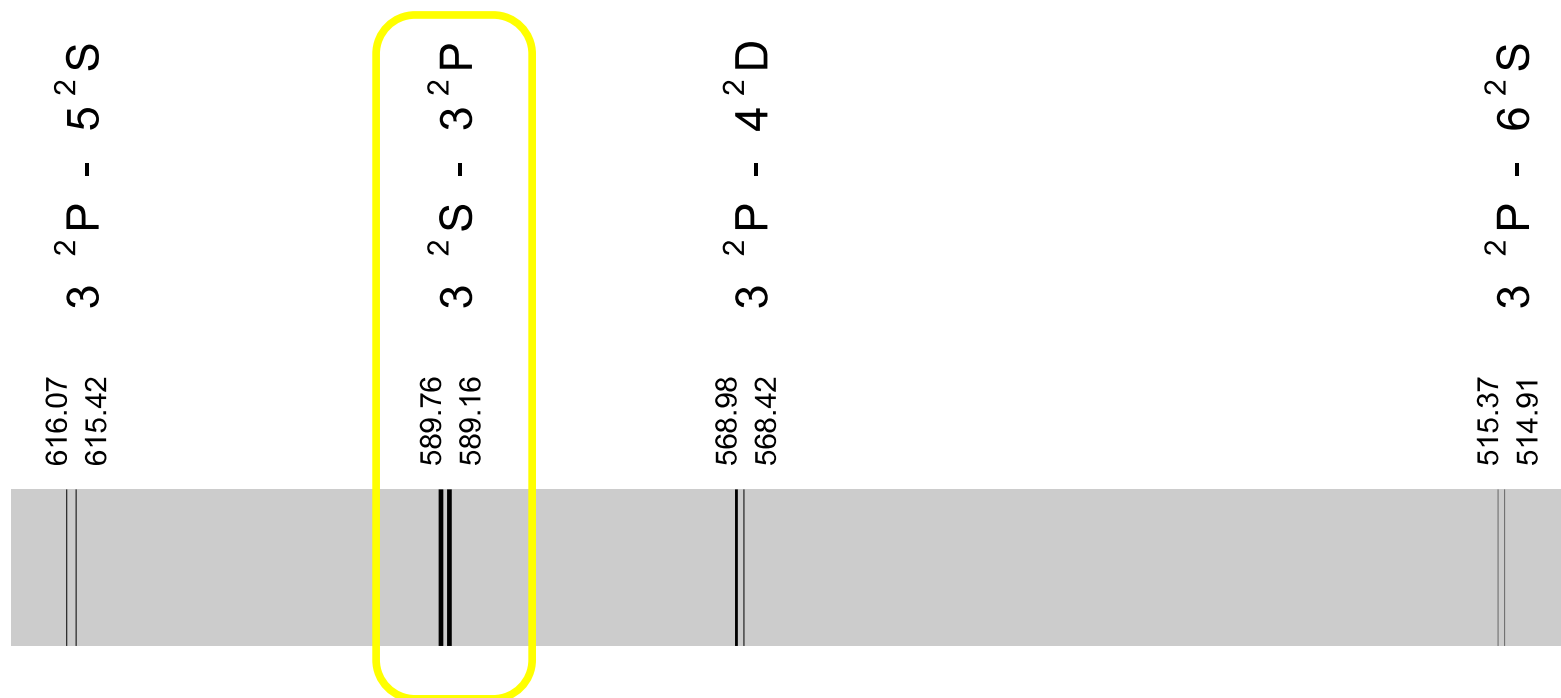
Natriums spektrum

⇒ De relativistiska effekterna separerar 3p nivåerna, som borde vara lika



Natriums spektrum

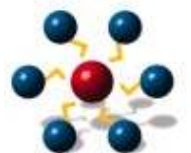
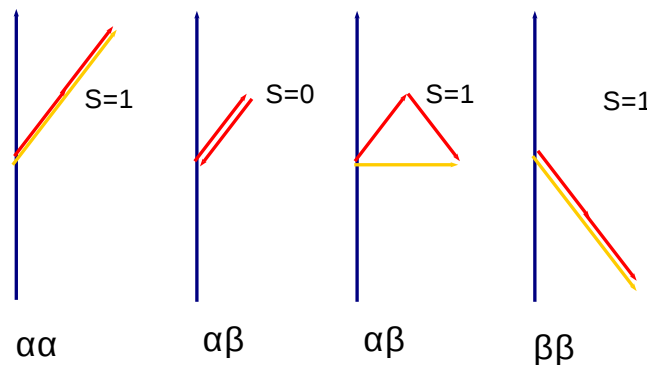
➡ Den gula emissionslinjen är egentligen två linjer mycket nära varandra

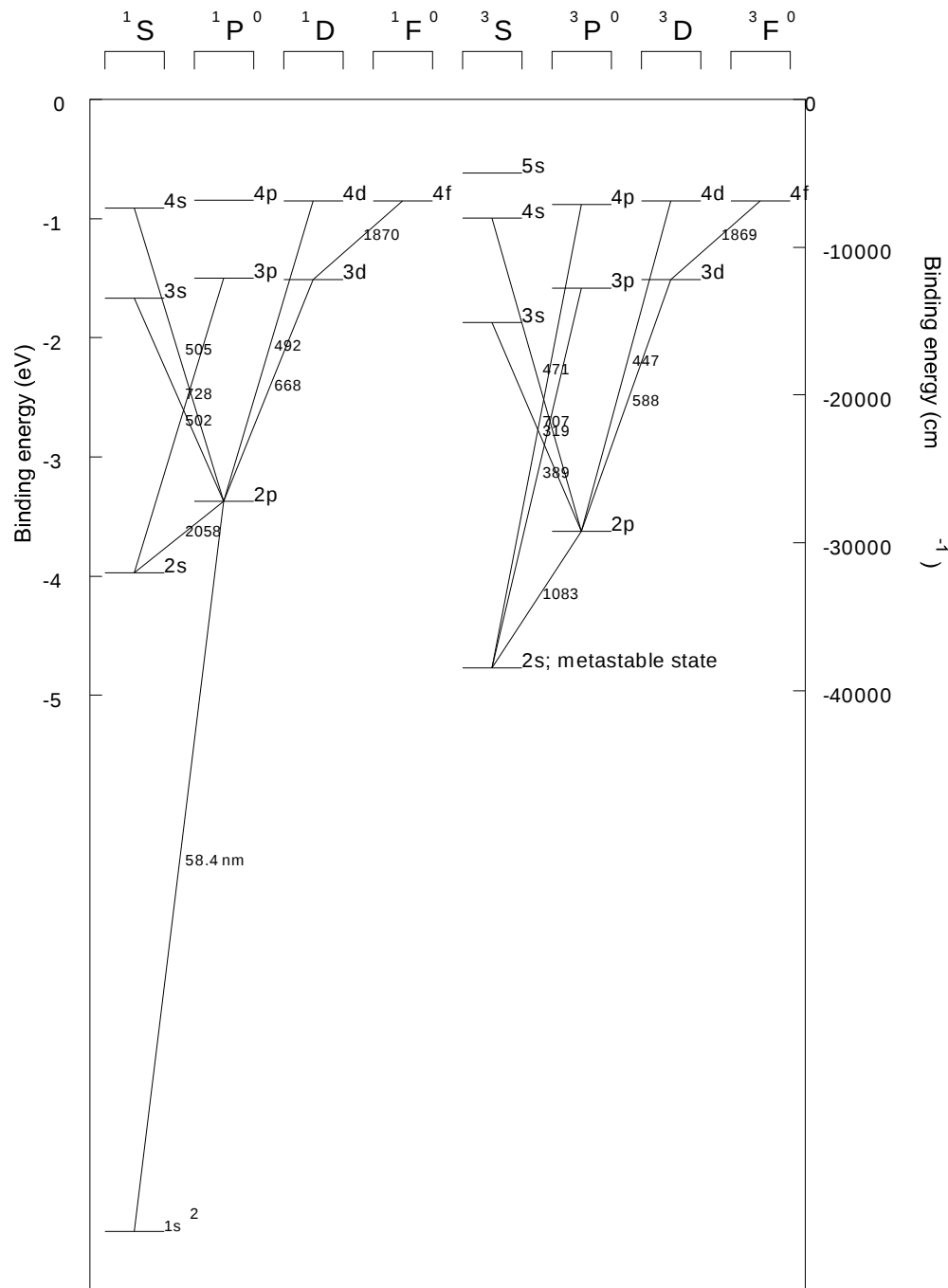


Flerelektronatomer

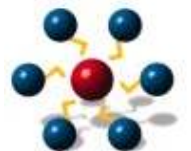
Helium

- ⇒ Totala elektronhöljet och inte enskilda elektroner betraktas
- ⇒ Urvalsregel: Totala elektronhöljets spinn kan inte ändras
- ⇒ Helium: två elektroner kan kopplas till totala spinnet $S = 1$ eller $S = 0$



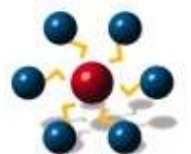
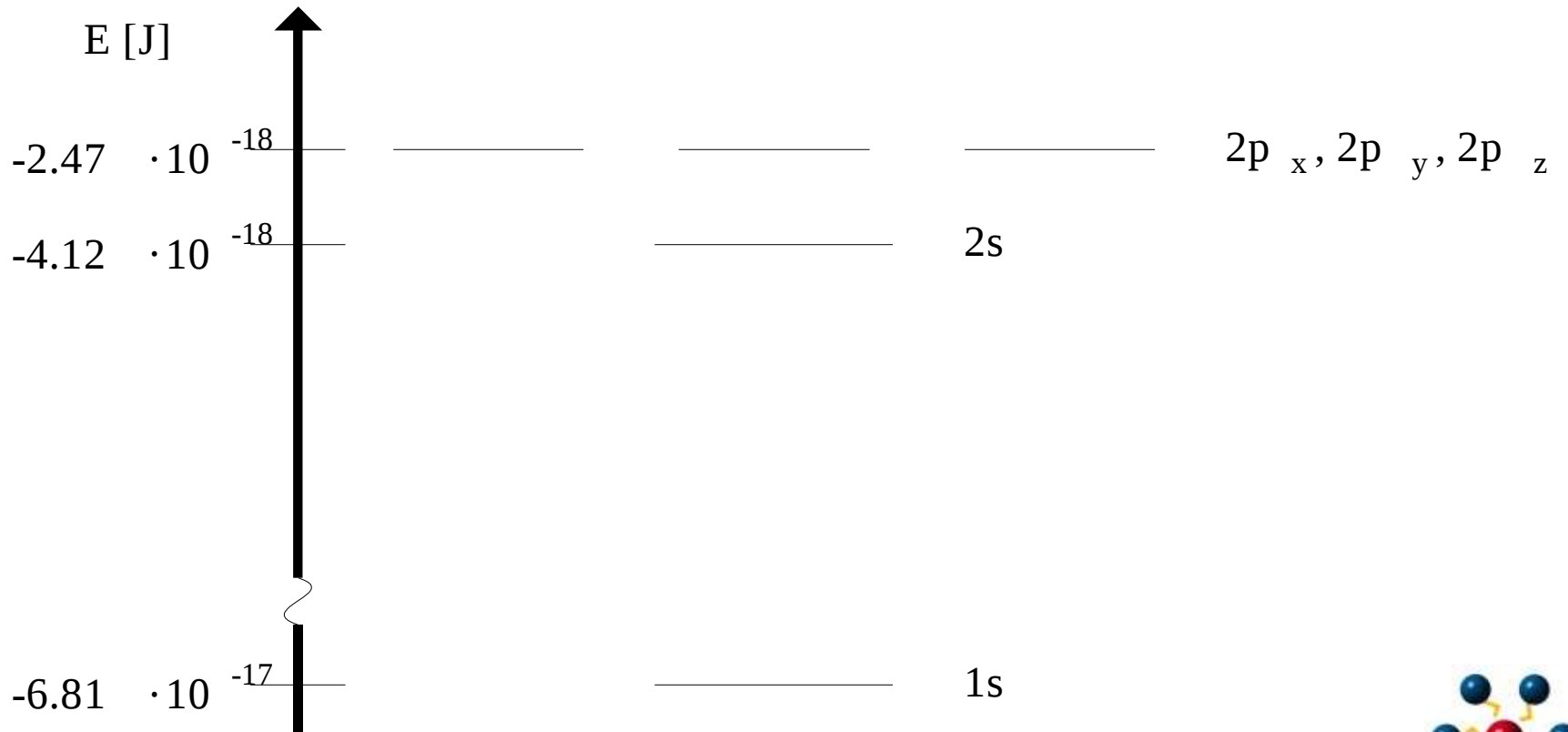


Helium: två helt separata mönster för singletter och tripletter



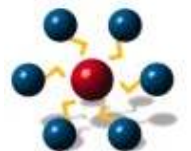
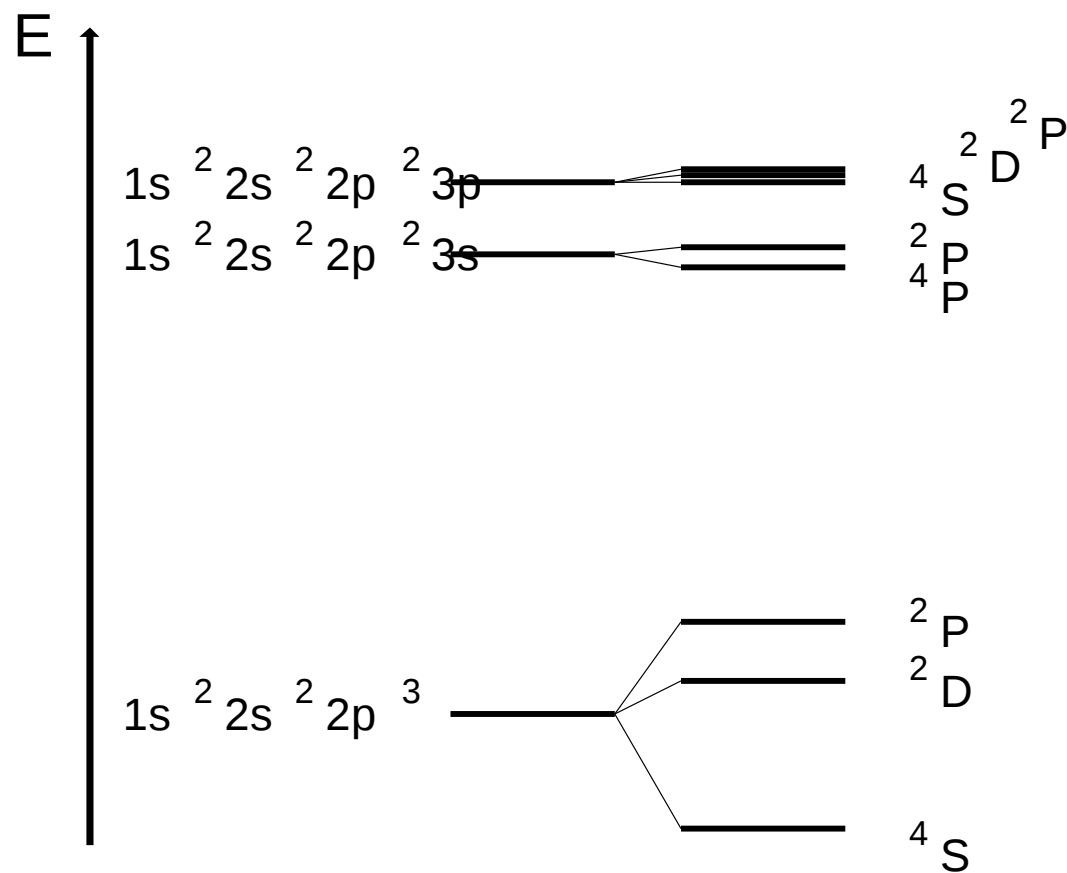
Flerelektronatomer

Kväveatomens orbitaler



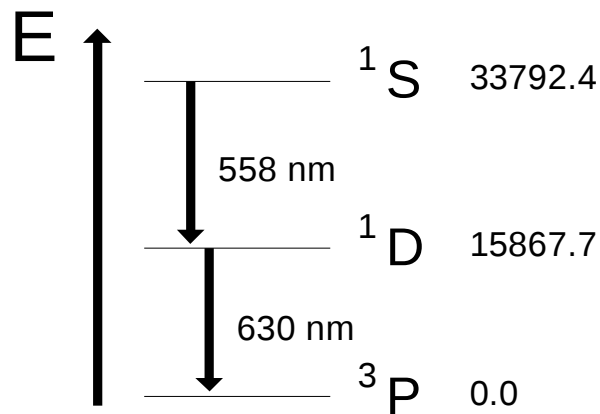
Flerelektronatomer

Kväveatomens tillstånd

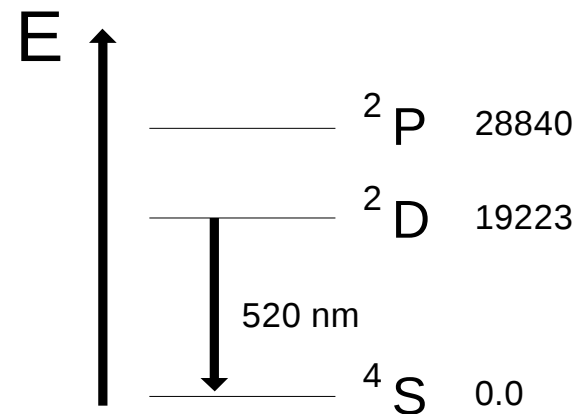


Tyngre atomer

- ⇒ Relativistiska effekter gör att totala spinnet kan ändras
- ⇒ Dylika spektrallinjer är dock mycket svaga



Oxygen



Nitrogen



