

ELEKTRONSKA STRUKTURA ATOMA

EMISIJA I APSORPCIJA SVIJETLOSTI

Zašto užarene tvari emitiraju svjetlost?

- električna žarulja
- neonka
- svijeća
- užareno željezo
- vatromet
- sunce
- ...



Ultraljubičaste zrake



Vidljive zrake



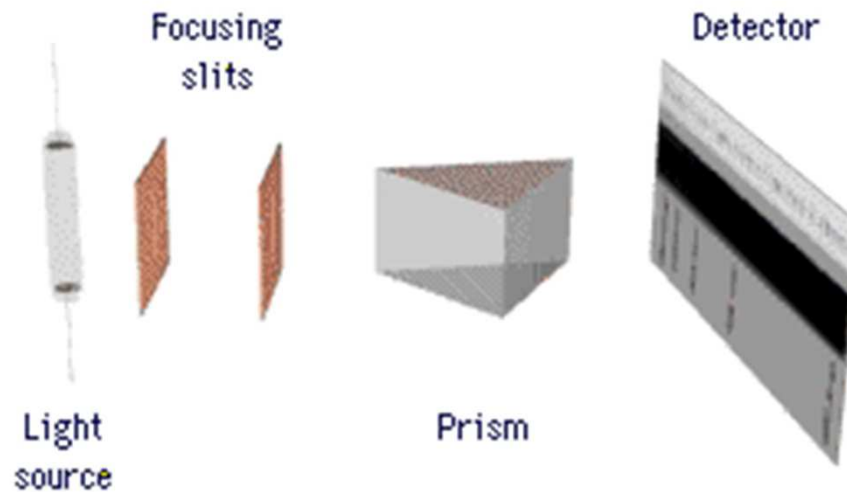
Infracrvene zrake

- ***Klasična (Newtonova) fizika:***
 - predviđa trajektoriju čestica, s precizno određenim lokacijama i momentom
 - dopušta da translaciju, rotaciju i vibraciju (kretanje) pobuđuje bilo koja energija, jednostavno kontroliranjem sile koju primjenjujemo

- Krajem devetnaestog stoljeća eksperimentalne činjenice se nisu mogle objasniti važećom teorijom.
- Primjena klasične mehanike na čestice vrlo male mase kao i na prijenos vrlo malih količina energije davala je rezultate koji nisu bili u skladu s eksperimentalnim činjenicama

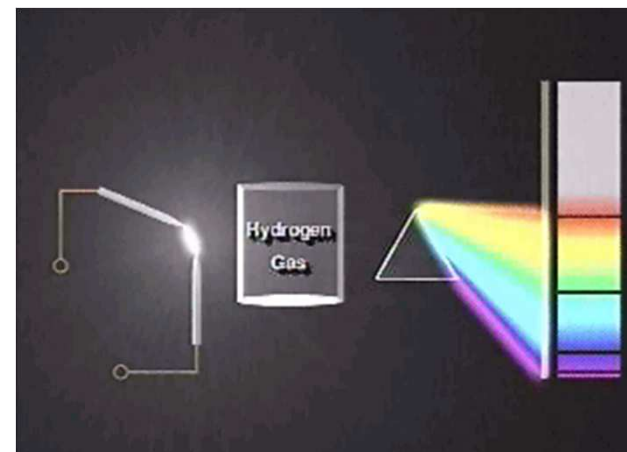
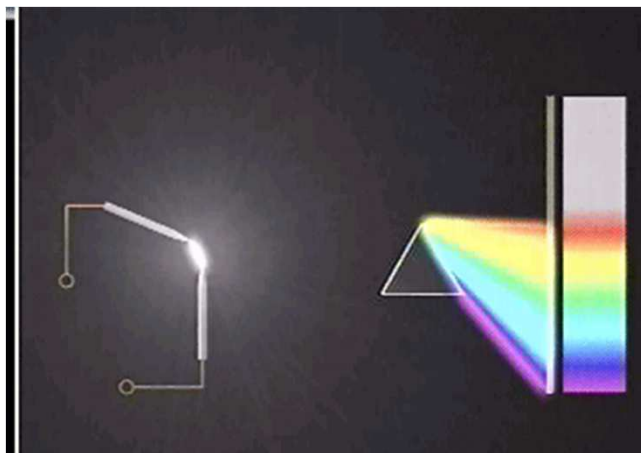
Emisijski spektar

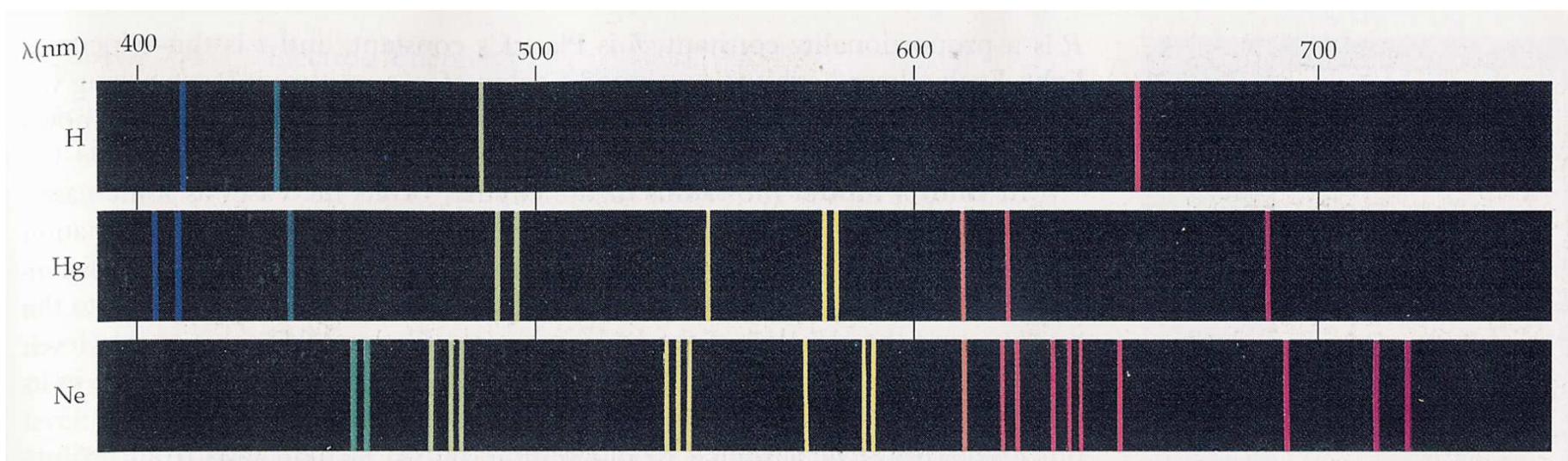
- kontinuirani spektar emitiraju užarene krute tvari (tj. zrake svih mogućih valnih duljina)
- linijski spektar emitiraju atomi tvari u plinovitom stanju



Apsorpcijski spektar

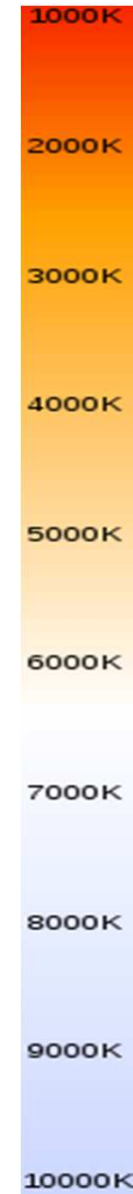
- Tvari apsorbiraju (ugase) zrake točno određene valne duljine
- Plinovi apsorbiraju zrake iste valne duljine koje i emitiraju





Planckova jednađžba

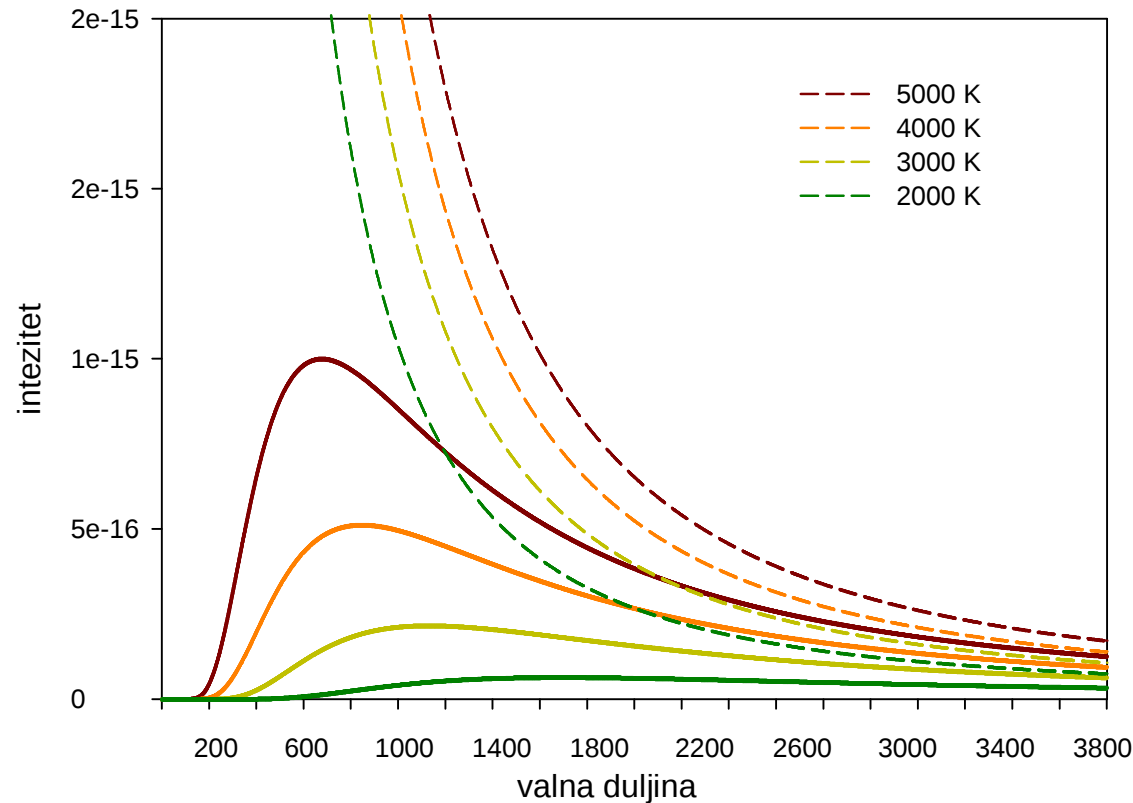
- Čvrsta tvar koja se grije, užari se i emitira energiju u obliku kontinuiranog spektra
- Klasična fizika je pretpostavljala da atomi i molekule mogu emitirati ili apsorbirati bilo koju količinu energije





<http://phet.colorado.edu/en/simulation/blackbody-spectrum>

ULTRALJUBIČASTA KATASTROFA



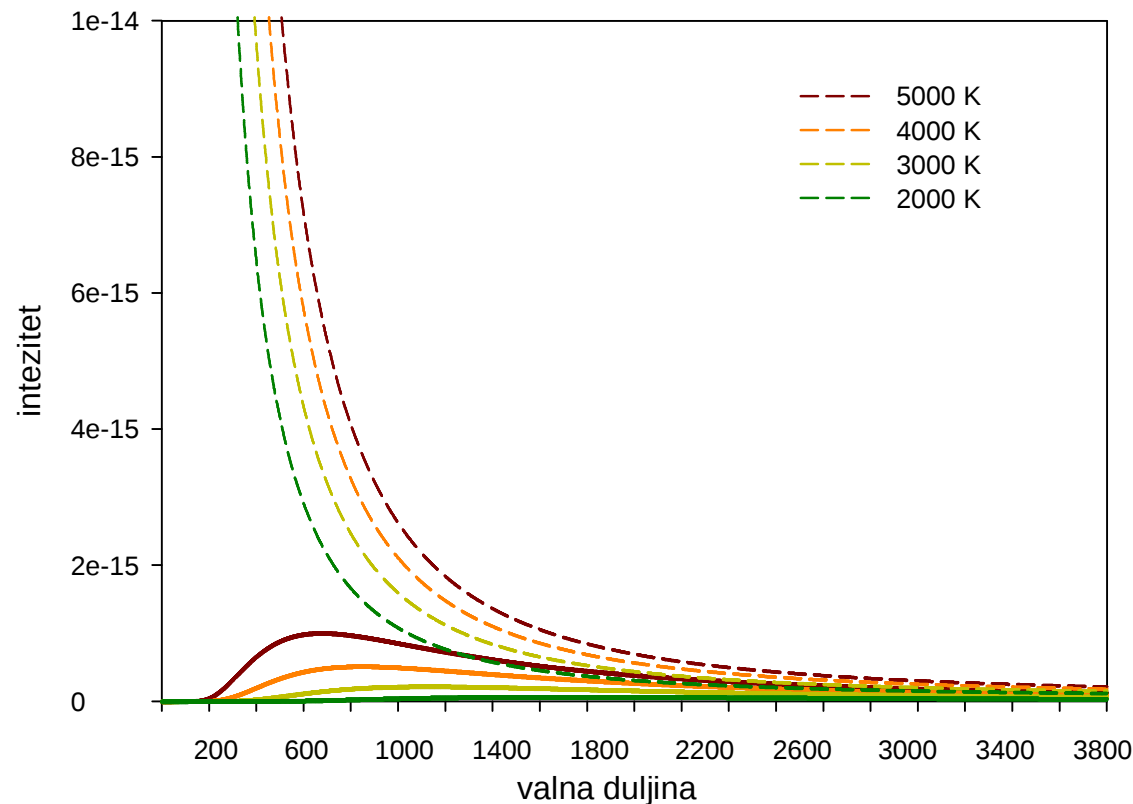
eksperimentalni podaci puna crta

klasična teorija isprekidana crta

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2ckT}{\lambda^4},$$

intenzitet UV (ultraljubičastog) zračenja (λ od 10-400 nm) oko 40-80 puta je veći od intenziteta vidljive svjetlosti
posljedica bi bila da užareno željezo isijava smrtonosnu količinu UV zračenja - što naravno nije istina

ULTRALJUBIČASTA KATASTROFA



eksperimentalni podaci

klasična teorija isprekidana crta

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2ckT}{\lambda^4},$$

intenzitet UV (ultraljubičastog) zračenja (λ od 10-400 nm) oko 40-80 puta je veći od intenziteta vidljive svjetlosti

posljedica bi bila da užareno željezo isijava smrtonosnu količinu UV zračenja - što naravno nije istina

- Količina energije ovisna je o valnoj duljini, tj. intenzitet svih boja u kontinuiranom emisijskom spektru nije isti
- Intenzitet određene boje ovisi o temperaturi
- Zagrijavanjem prvo imamo tamno crveno, pa žuto crveno, pa žuto i bijelo usijanje

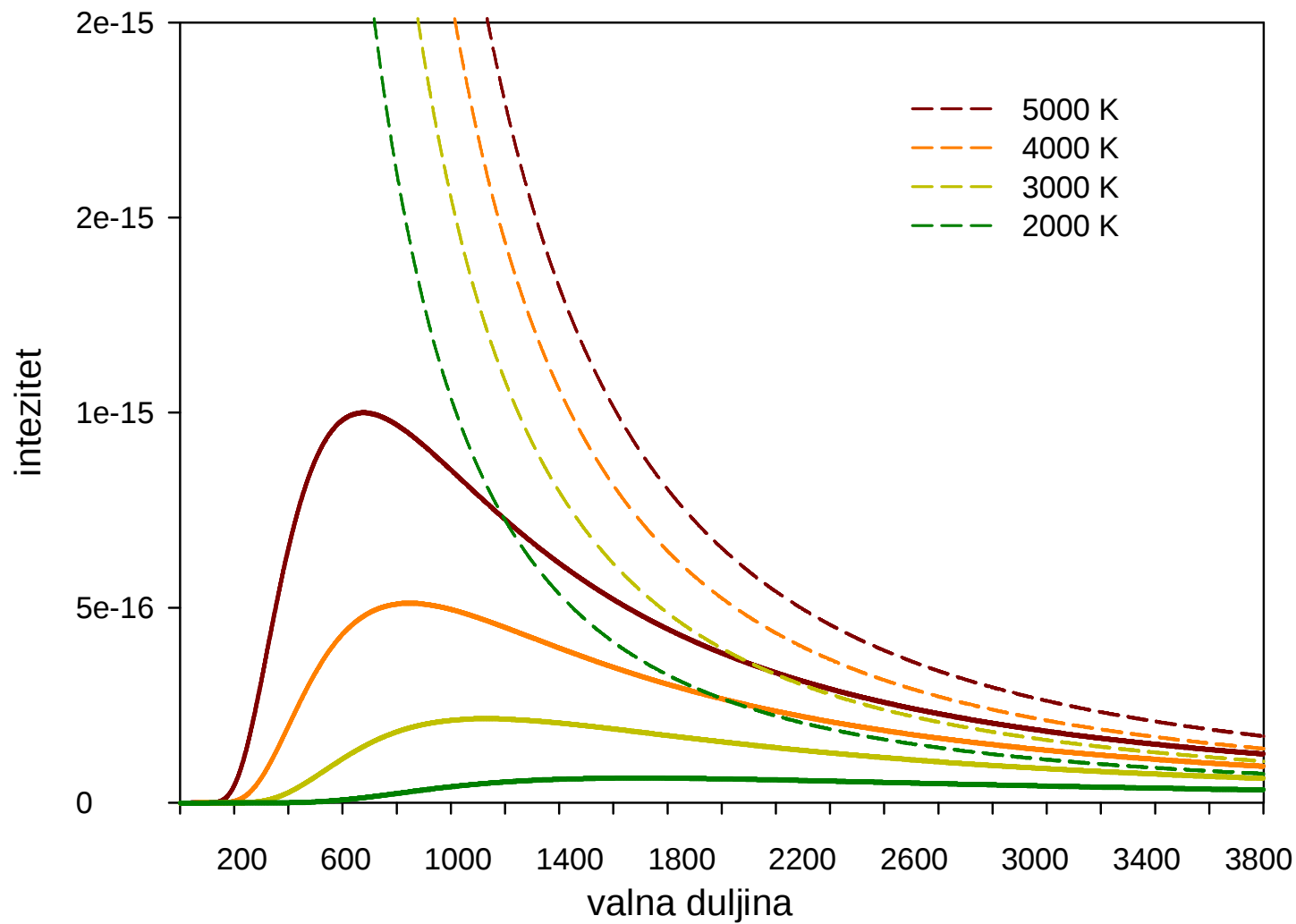


- Planck odbacuje pretpostavku da atom može apsorbirati i emitirati bilo koju količinu energije
- uvodi pojam ***kvanta energije***, odnosno pretpostavku o diskontinuiranosti energije
- energija elektromagnetskih oscilatora (atoma i molekula) može se mijenjati samo za određeni iznos, kojeg zovemo **kvant (porcija) energije**
- Energija koju oscilatori mogu emitirati ili apsorbirati može biti samo višekratnik jednog kvanta energije zračenja

$$E_{\text{kvanta}} = h \times f_{\text{zračenja}} \qquad E = n \times E_{\text{kvanta}} = n \times h \times f_{\text{zračenja}}$$

• h - Planckova konstanta (kvant djelovanja) = $6,626 \times 10^{-34}$ Js

• n - cijeli broj, tj. broj atoma ili molekula koji osciliraju, tzv. oscilatora



eksperimentalni podaci i Plankova jednađba puna
crta

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2c^2}{\lambda^5} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1},$$

klasična teorija isprekidana crta

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2ckT}{\lambda^4},$$

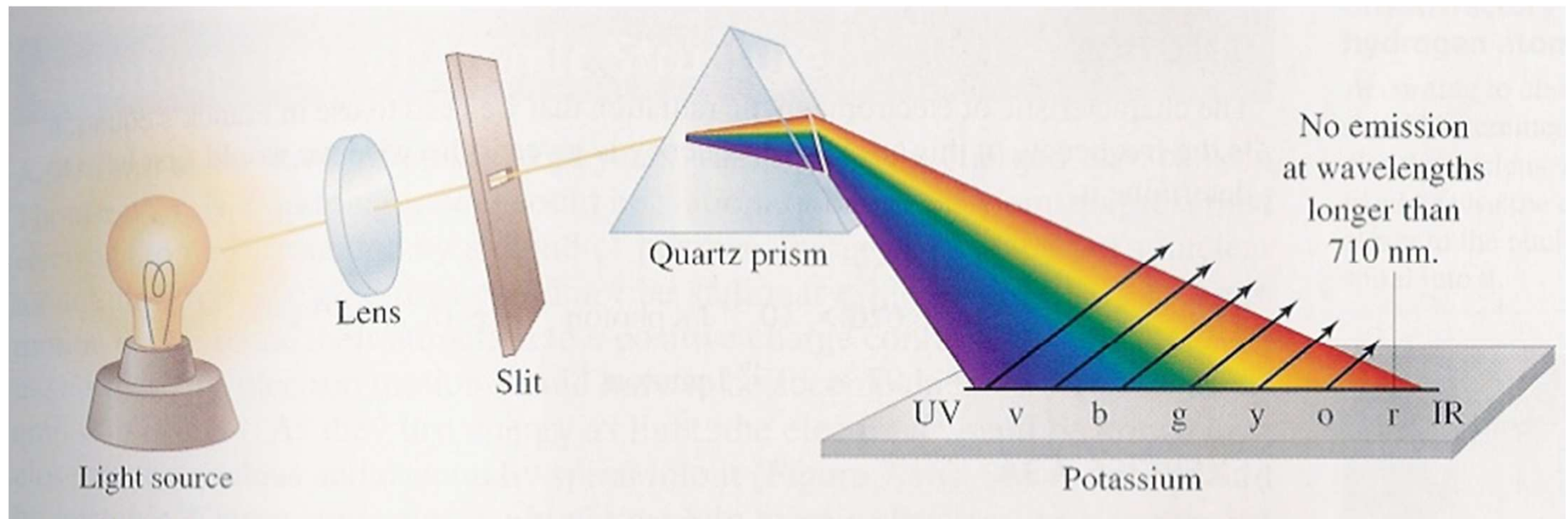
- Kratkovalno zračenje se sastoji od velikih kvanta energije, a dugovalna zračenja se sastoje malih kvanta energije
- $E = n \times E_{\text{kvanta}} = n \times hf = n \times hc/\lambda$

$$\begin{aligned}
 (3 \times 10^8 \times 10^9 \text{ nm s}^{-1} \times 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}) / 400 \text{ nm} &= 19.86 \times 10^{-17} / 400 \text{ J plava} = 4.965 \times 10^{-19} \text{ J kratkovalno} \\
 (3 \times 10^8 \times 10^9 \text{ nm s}^{-1} \times 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}) / 600 \text{ nm} &= 19.86 \times 10^{-17} / 600 \text{ J žuta} = 3.310 \times 10^{-19} \text{ J} \\
 (3 \times 10^8 \times 10^9 \text{ nm s}^{-1} \times 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}) / 800 \text{ nm} &= 19.86 \times 10^{-17} / 800 \text{ J crvena} = 2.483 \times 10^{-19} \text{ J dugovalno}
 \end{aligned}$$

isti broj atoma emitira različitu energiju u ovisnosti od valne duljine svjetlosti koju zrače.

Fotoelektrični efekt

- emitiranje elektrona s površine metala pod utjecajem svjetla



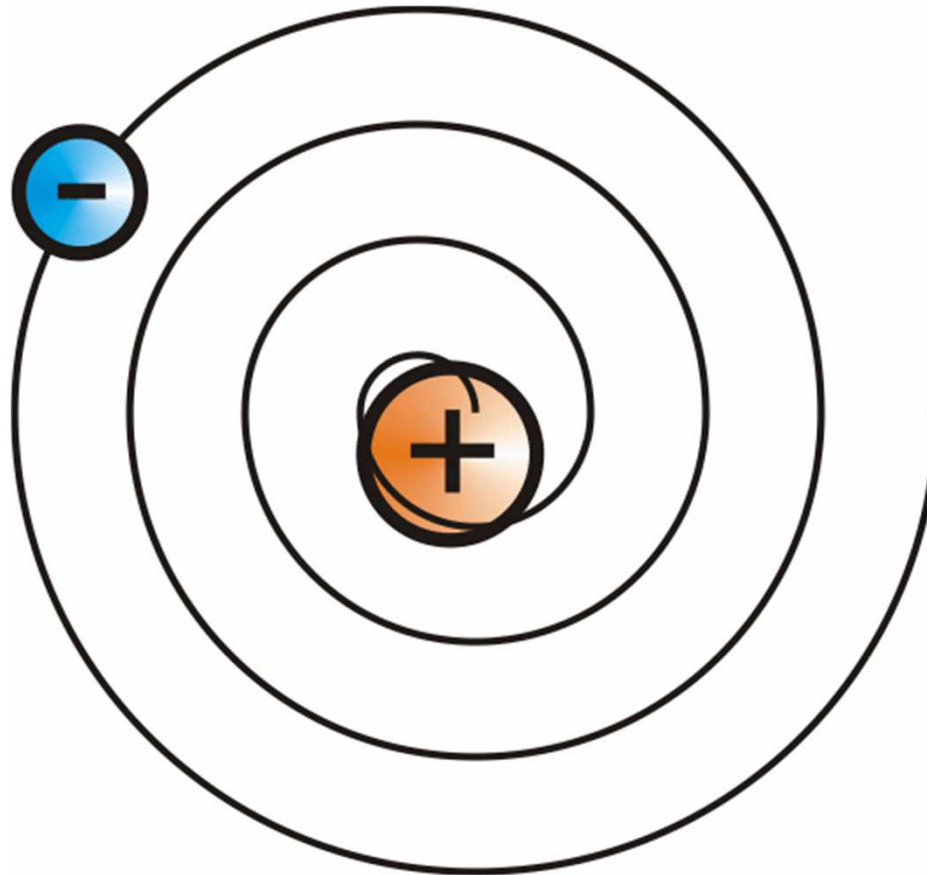
Fotoelektrični efekt

- A. Einstein - svijetlost koja pada na metal sastoji se od kvanta svijetlosti energije hf
- Fotoelektrična jednačina
$$hf = E_i + mv^2/2$$

Energija fotona (hf) jednaka je zbroju energije izlaženja elektrona (E_i) i kinetičke energije
- maksimalna duljina vala koja još izaziva fotoelektrični efekt je ***fotoelektrični prag***

Bohrov model atoma

- prema Rutherfordovom modelu kada atom zrači energiju elektron bi morao uskoro pasti u jezgru - uništenje atoma



"smrt" elektrona

- Rutherfordov model atoma ne može objasniti linijske spektre
- Bohr rješava problem linijskih spektara, odnosno elektronske strukture atoma
 - primijenio je Planckov pristup

$$E_{\text{kvanta}} = h \times f_{\text{zračenja}}$$

Bohrovi postulati:

(1) vodikov atom može postojati u stanjima u kojima ne emitira energiju

stacionarna stanja - elektron se može okretati oko jezgre samo po dopuštenim kružnim putanjama

To znači da ne postoji kontinuirani mogući razmak između jezgre i staze, nego su mogući samo neki razmaci. Ti razmaci i njima odgovarajuće energije ovise o konkretnom atomu koga promatramo. Time Bohr pretpostavlja da se kvantizira gibanje unutar atoma, jer ako se elektroni mogu gibati samo po određenim stazama, onda se mogu gibati samo određenim brzinama, imati samo određene vrijednosti energije, i uopće, sve fizičke veličine vezane za procese u atomu mogu imati samo određene - kvantne - vrijednosti

osnovno ili normalno stanje - elektron se giba po najmanjoj putanji – atom ima najmanju moguću energiju

(2) samo prilikom skoka elektrona s jedne dopuštene putanje na drugu atom ***apsorbira*** ili ***emitira energiju*** (ΔE) ***kao kvant energije*** zračenja (foton) frekvencije

$$hf = E_2 - E_1 = \Delta E$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = hf$$

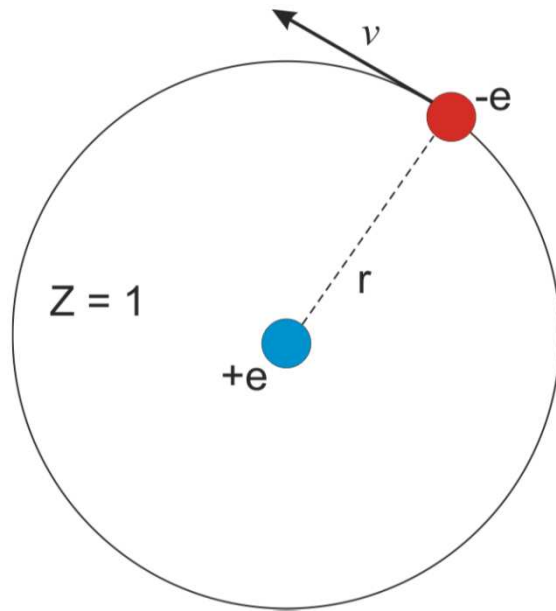
E_1 - energija elektrona kada kruži po putanji 1

E_2 - energija elektrona kada kruži po putanji 2

(3) mogući su elektronski skokovi s bilo koje u bilo koju putanju

centripetalna sila privlačenja = Coulombova sila

$$-mv^2/r = -kZe^2/r^2$$



$$E_{\text{kin}} = mv^2 = \frac{Ze^2k}{2r}$$

r - radijus putanje elek.

v - brzina elektrona

Z - atomski broj

e - naboj elektrona

k - konstanta

n - cijeli broj

E_{kin} - kinetička energija elektrona

E_{pot} - potencijalna energija elektrona

Bohrov kvantni uvjet:

umnožak impulsa elektrona (mv) i opsega kružne putanje je cjelobrojni višekratnik Plankove konstante

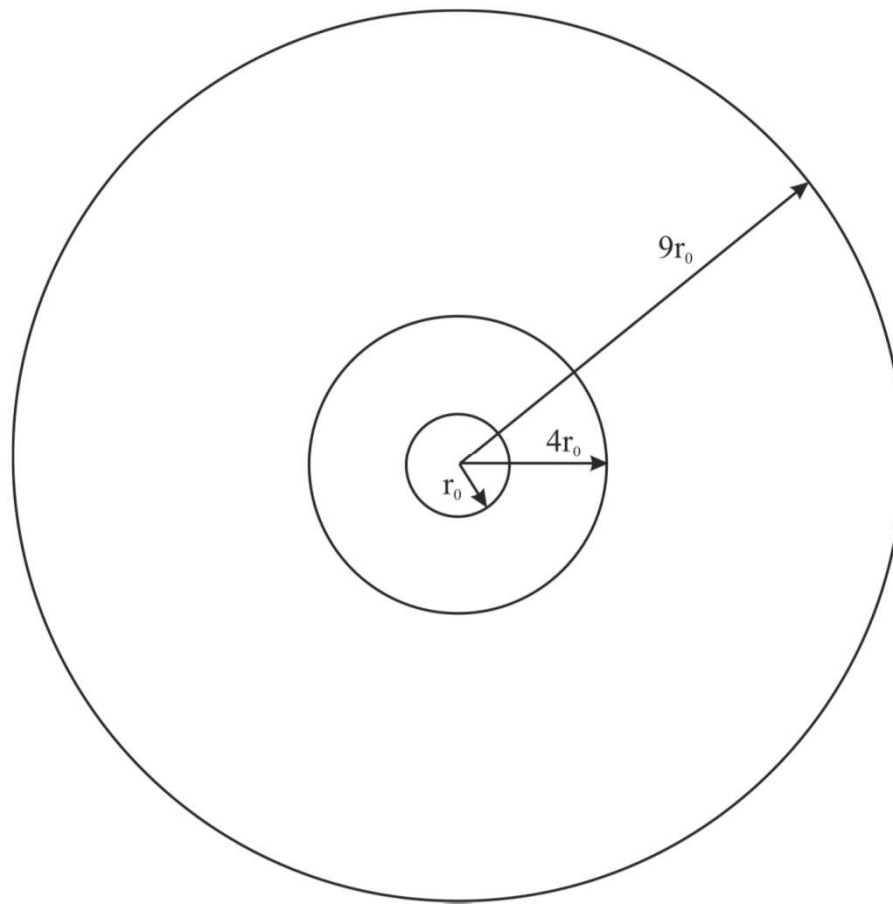
$$mv \times 2\pi r = nh$$

$$r = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m Z e^2 k}$$

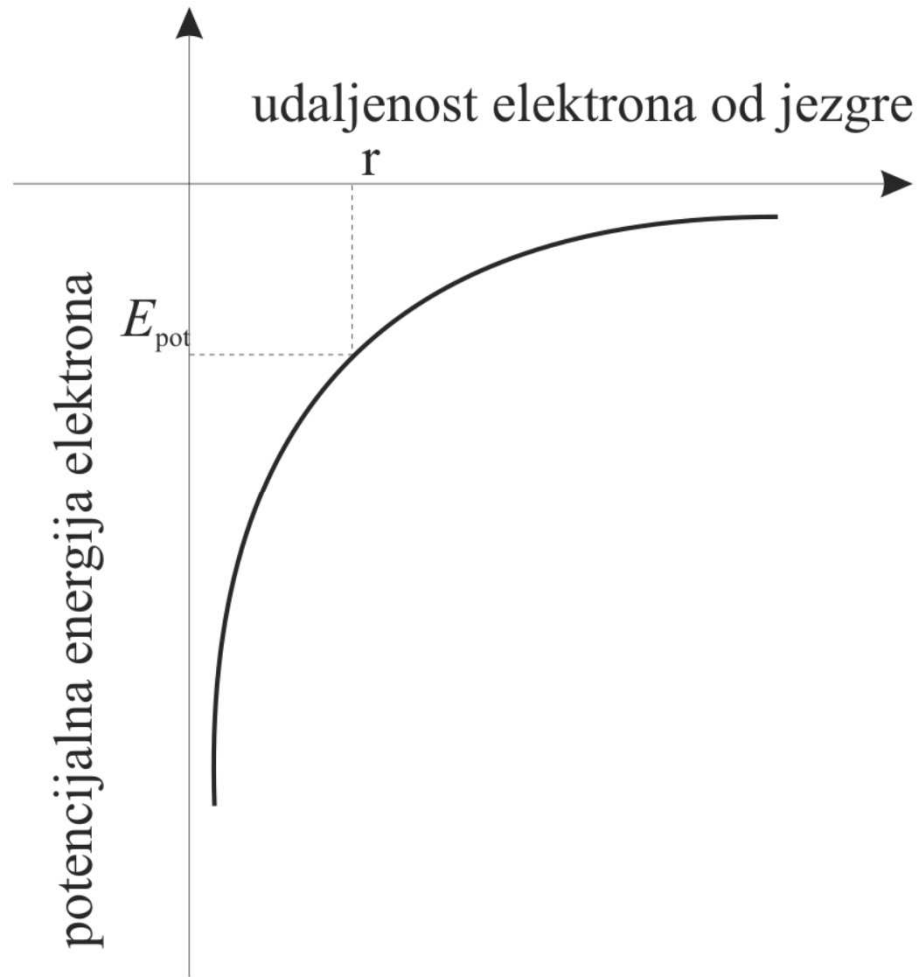
za vodikov atom vrijedi

$$r_n = n^2 \times 52.9167 \text{ pm}$$

$$r_0; 4r_0; 9r_0; 16r_0$$



$$E_{pot} = -\frac{Ze^2k}{r}$$



- kada je elektron beskonačno udaljen od jezgre njegova potencijalna energija jednaka je 0
- na udaljenosti r od jezgre potencijalna energija elektrona jednaka je radu koju treba obaviti da se elektron beskonačno udalji, tj. sasvim odvoji od jezgre pa su energije svih stacionarnih stanja manje od 0 (negativne)
- što je elektron bliže jezgri to je njegova potencijalna energija manja

$$E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2} \left(\frac{Ze^2k}{r} \right)$$

$$E_{\text{pot}} = -\frac{Ze^2k}{r}$$

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$$

$$E = \frac{Ze^2k}{2r} + \left(-\frac{Ze^2k}{r} \right)$$

$$E = -\frac{Ze^2k}{2r}$$

$$r = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 mZe^2k}$$

$$E_n = -\frac{2\pi^2 mZ^2 e^4 k^2}{n^2 h^2}$$

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m Z^2 e^4 k^2}{n^2 h^2}$$

za vodik $Z = 1$

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m e^4 k^2}{n^2 h^2} = -\frac{Rhc}{n^2}$$

$$R = -\frac{2\pi^2 m e^4 k^2}{h^3 c}$$

R - Rydbergova konstanta za vodik $1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

za $n = 1$

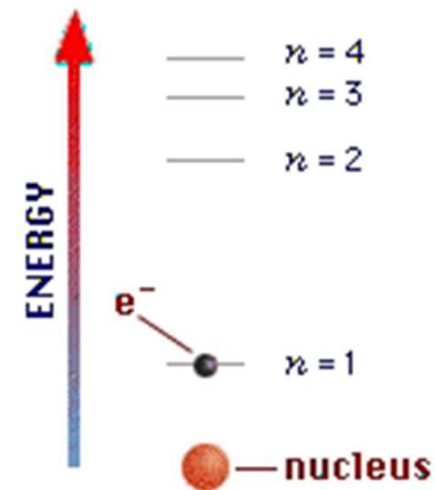
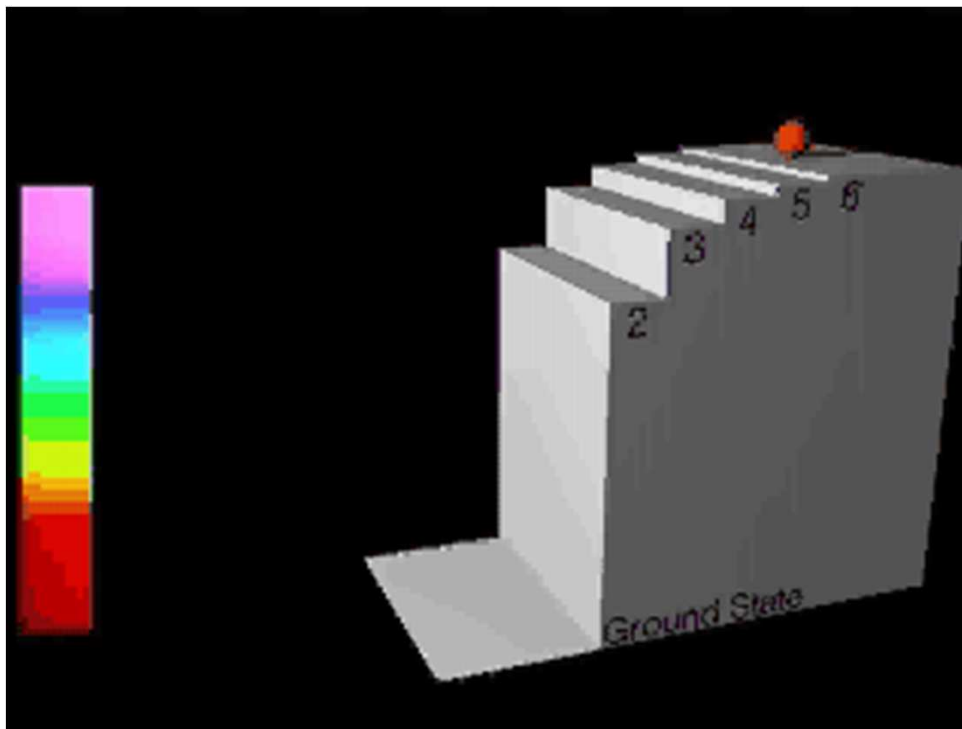
$$E_1 = -2.18 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Izmjerena energija ionizacije iznosi 13.6 eV,
odnosno

$$13.6 \text{ eV} \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J/eV} = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$\Delta E = E_k - E_p = -\frac{Rhc}{n_k^2} - \left(-\frac{Rhc}{n_p^2} \right)$$

$$\Delta E = Rhc \left(\frac{1}{n_p^2} - \frac{1}{n_k^2} \right)$$

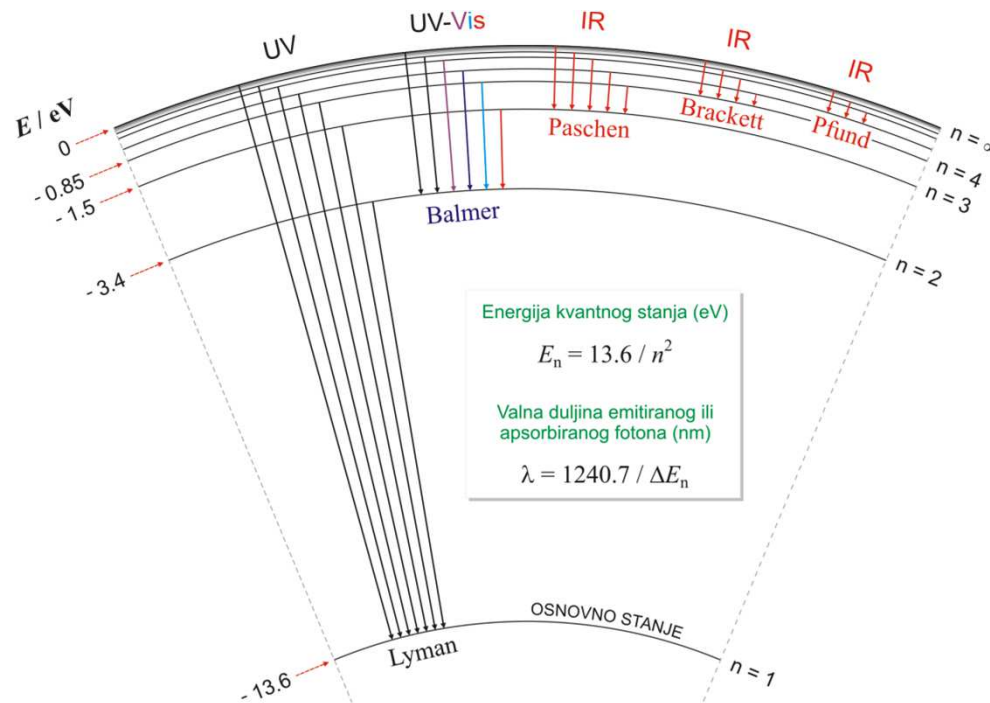


$$\Delta E = h \times f$$

$$c = \lambda \times f$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{hc}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_p^2} - \frac{1}{n_k^2} \right)$$



$1/\lambda = R (1/9 - 1/n_p^2)$ u infracrvenom području

$1/\lambda = R (1/4 - 1/n_p^2)$ u vidljivom spektru:

n_p	$1/\lambda$
3	656.3 nm
4	486.1 nm
5	434.1 nm
6	410.2 nm

$1/\lambda = R (1 - 1/n_p^2)$ u ultraljubičastom području

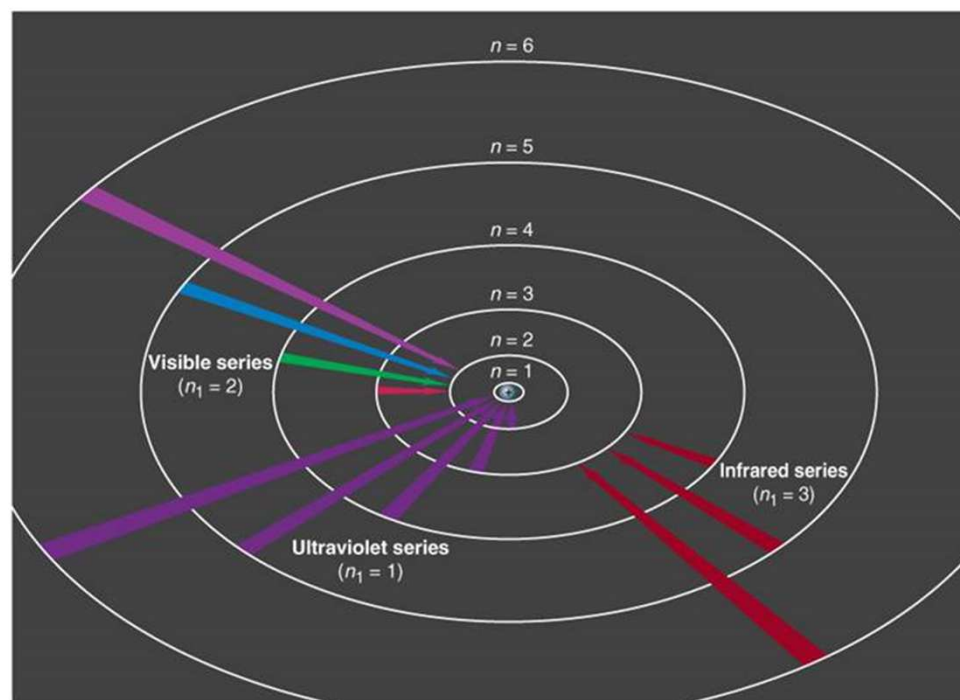
vodikov linijski spektar

656.3 nm

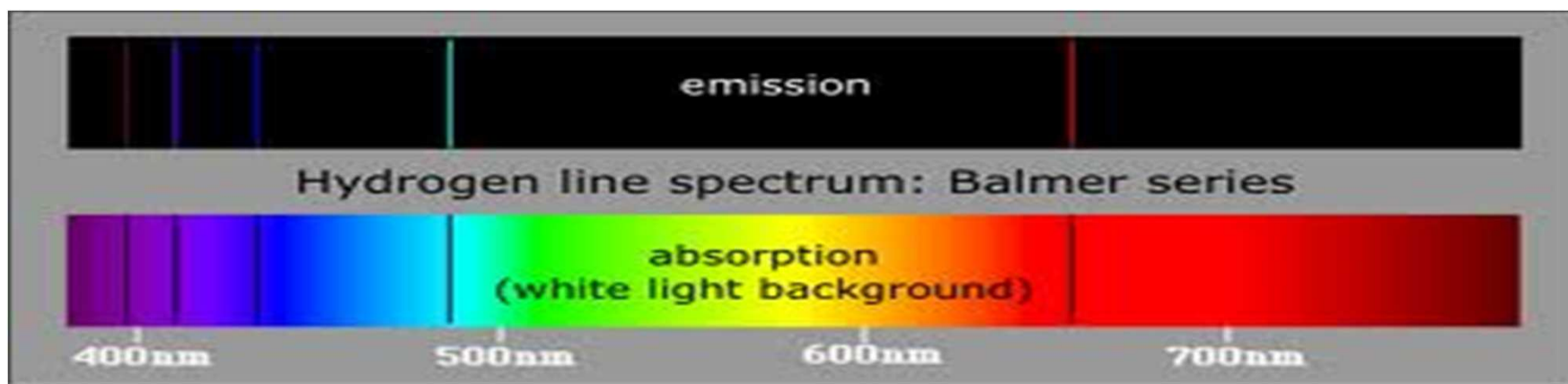
486.1 nm

434.1 nm

410.2 nm



A

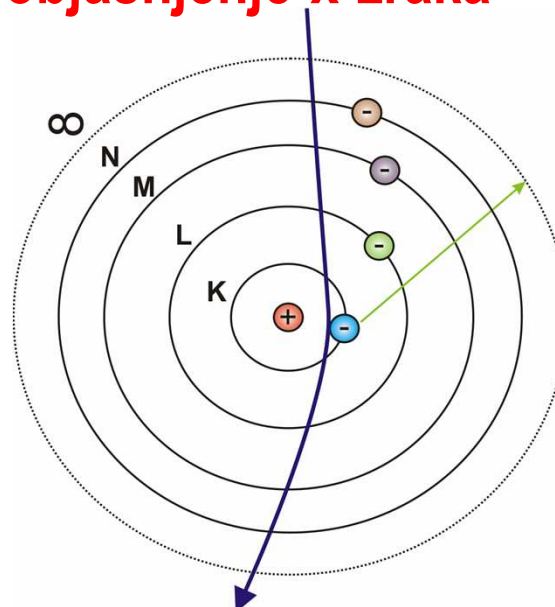


8.8 Bohrov model atoma-objašnjenje x-zraka

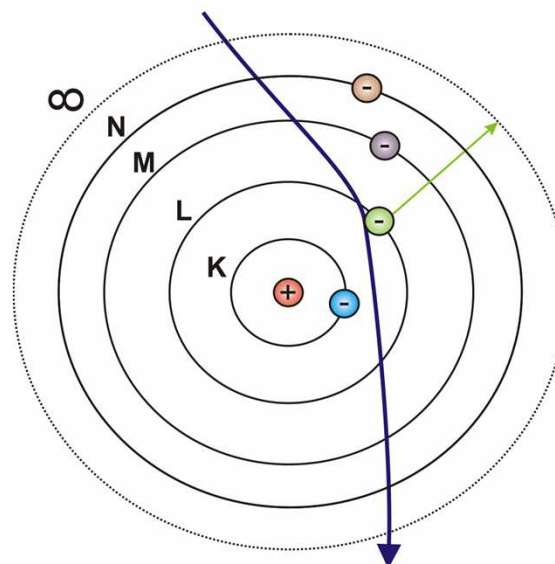
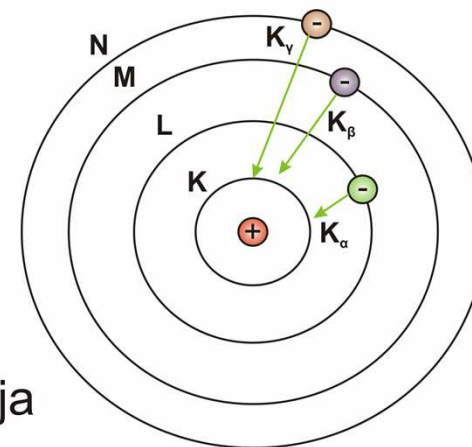
za K zraku za $Z > 10$ nađeno
je da vrijedi:

$$\frac{1}{\lambda} = R(Z - 1)^2 \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_p^2} \right)$$

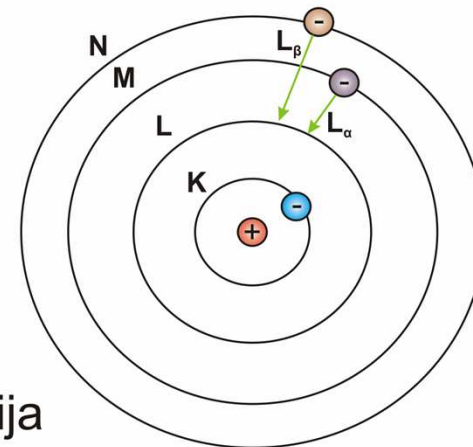
kada umjesto vodika
imamo atome metala
uslijed njihovog velikog naboja
jezgre nastaju zrake preko
1000 puta manje valne duljine
- rendgenske zrake



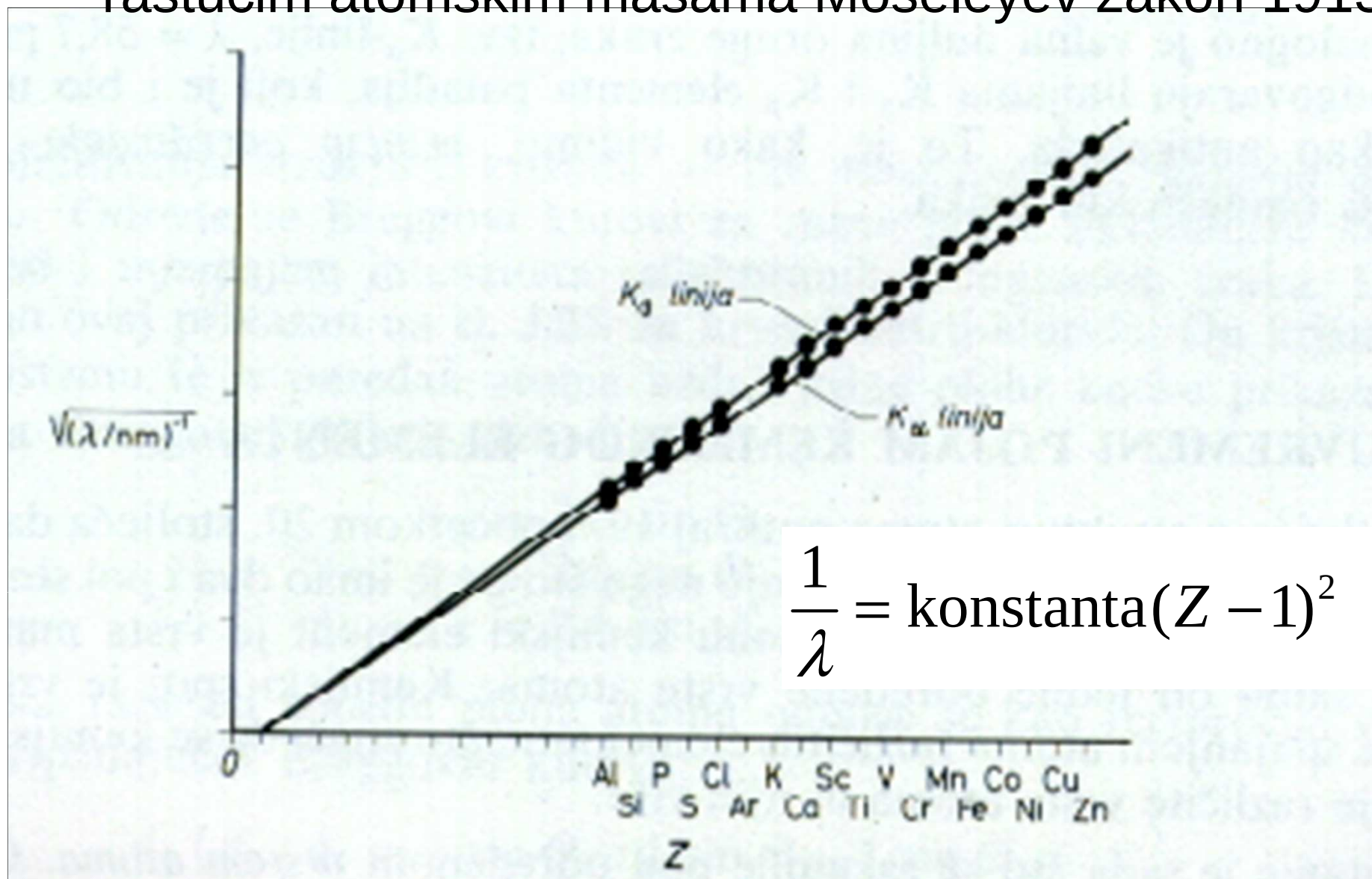
K-serija



L-serija



Valne duljine rendgenskih zraka pravilno se mijenjaju s rastućim atomskim masama Moseleyev zakon 1913.

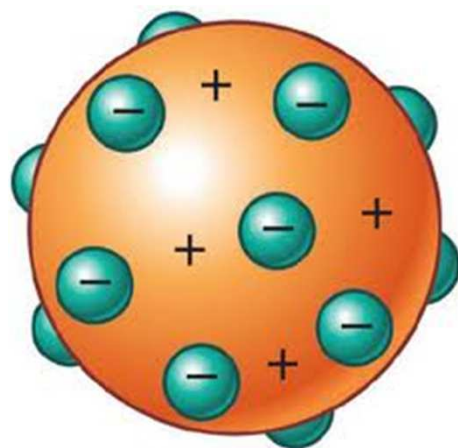


$$\frac{1}{\lambda} = \text{konstanta}(Z - 1)^2$$

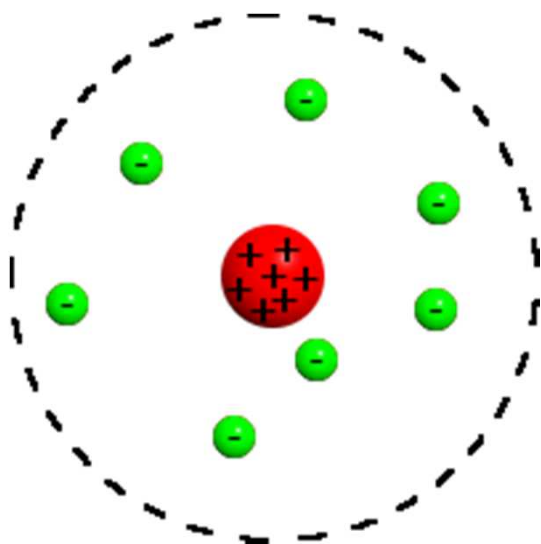
$$\frac{1}{\lambda} = \text{konstanta}(Z - 1)^2$$

- **$1/\lambda = R(Z-1)^2 (1/n_p^2 - 1/n_k^2)$**
- za K_α zraku $n_k = 1$; $n_p = 2$
- za K_β zraku $n_k = 1$; $n_p = 3$
- Rentgenski spektri i energije ionizacije nedvosmisleno pokazuju da su elektroni u atomu raspoređeni u određene energetske nivoe koje nazivamo ljuske.

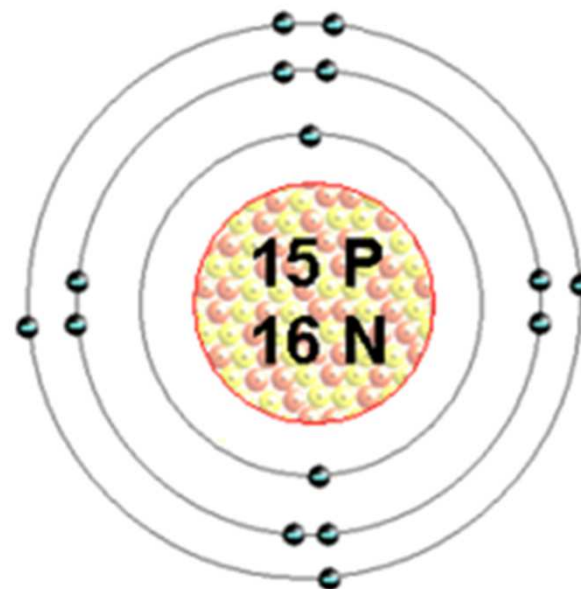
MODELI ATOMA



Thompsonov model

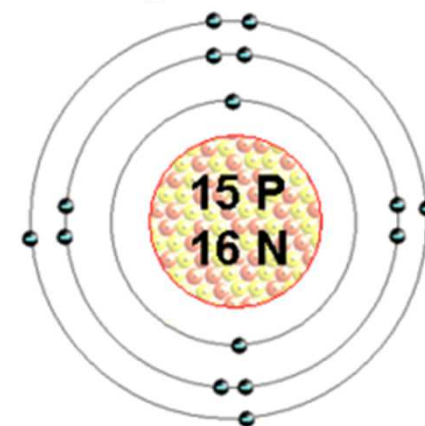


Rutherfordov model

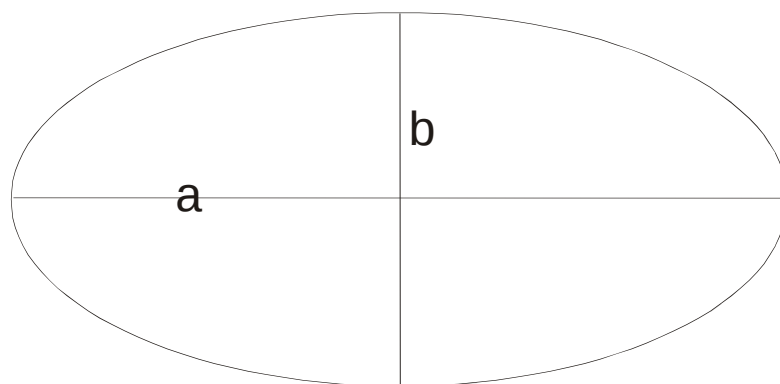


Bohrov model

Sommerfeldovo poopćenie Bohrove teorije



- rasipanje spektralne linije vodikovog spektra u više vrlo bliskih tankih linija fine strukture Bohrova teorija ne može objasniti
- u jednom te istom kvantnom stanju (n) postoji više vrlo bliskih energetske stanja elektrona
- Sommerfeld primjenjuje kvantnu teoriju na eliptične putanje
- putanja elektrona određena je velikom (a) i malom (b) poluosi elipse



$$\frac{a}{b} = \frac{n}{l+1}$$

a - velika poluos

b - mala poluos

n - glavni kvantni broj

l - azimutski ili sporedni kvantni broj

$l = 0 \dots (n-1)$

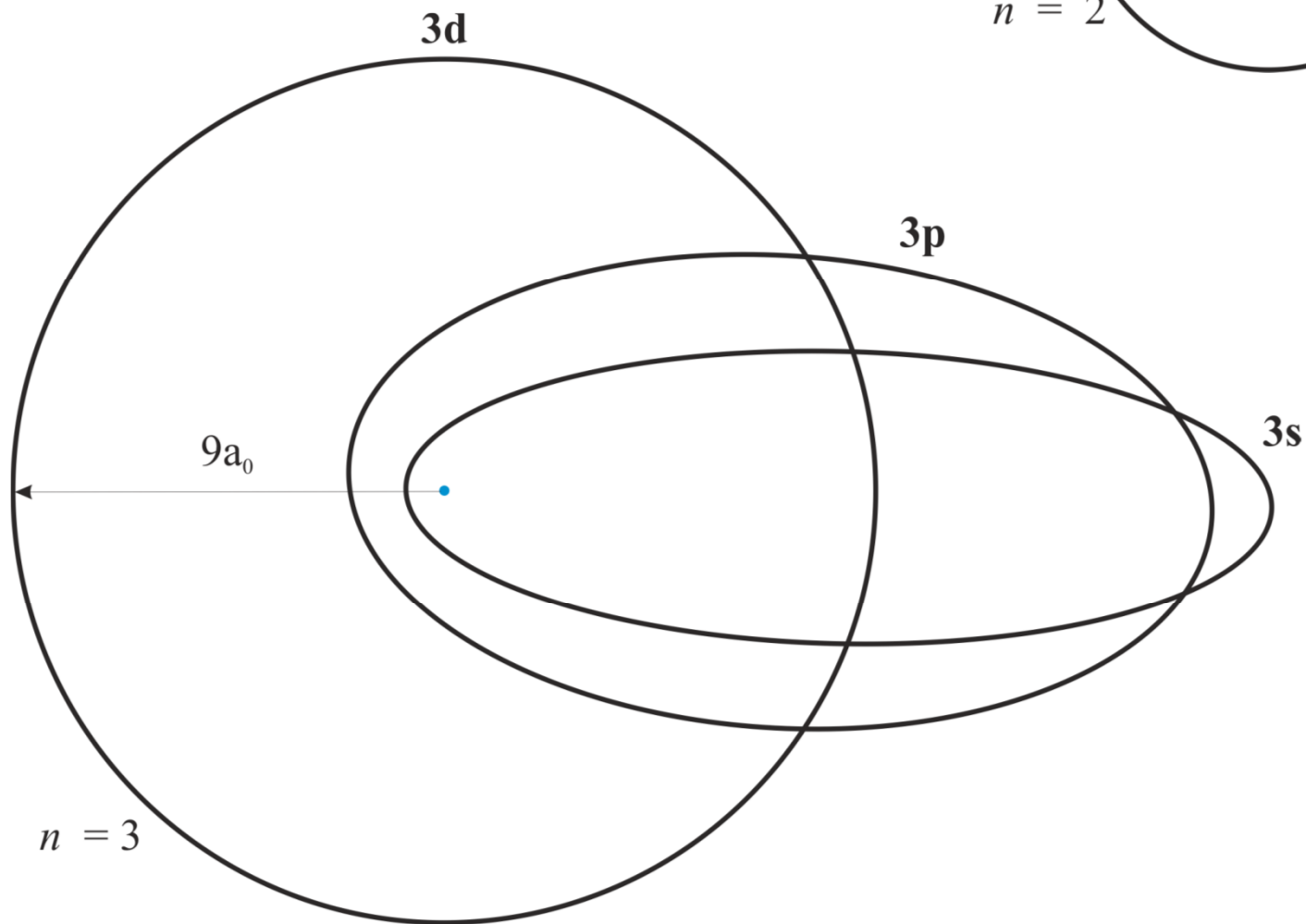
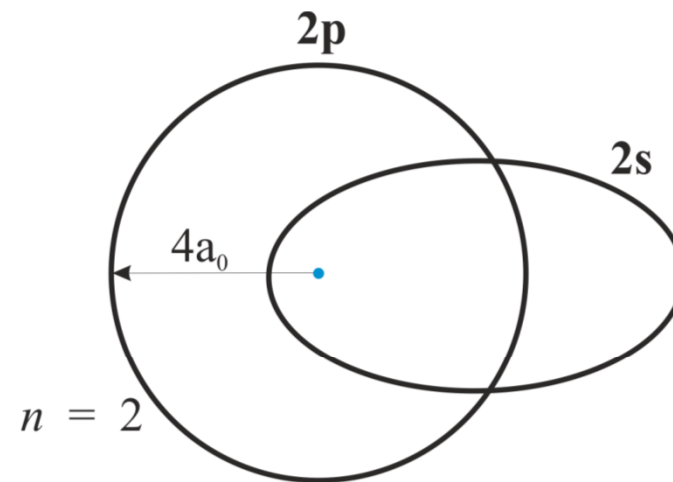
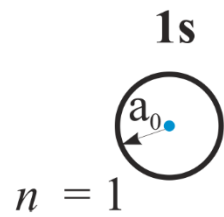
$n = 1; l = 0$ s

$n = 2; l = 0, 1$ s, p

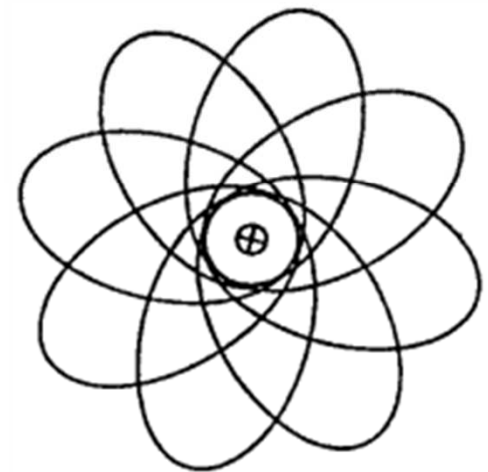
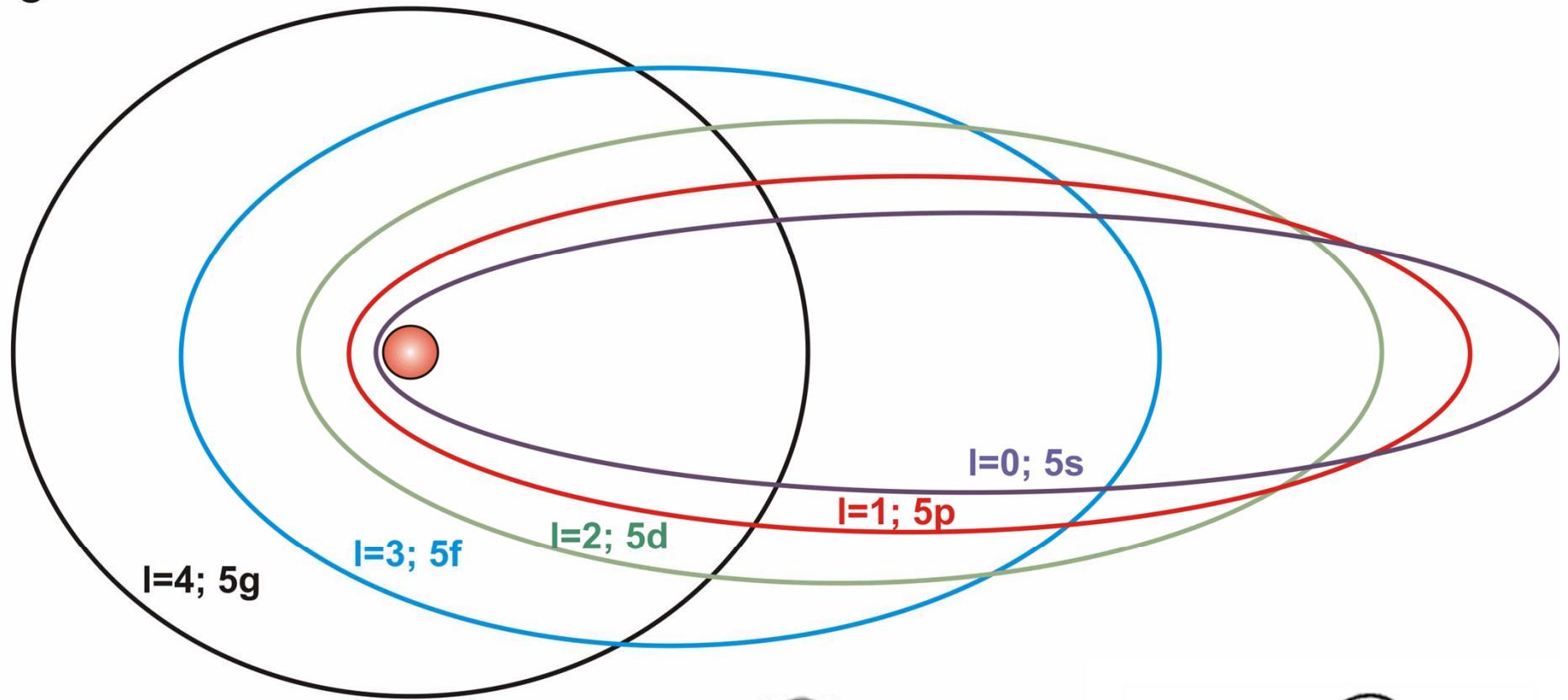
$n = 3; l = 0, 1, 2$ s, p i d

$n = 4; l = 0, 1, 2, 3$ s, p, d i f

Unutar energetske ljuske određenih glavnim kvantnim brojem n postoje energetske podljuske - orbite), a njihov oblik određen je odnosom glavnog i sporednog kvantnog broja

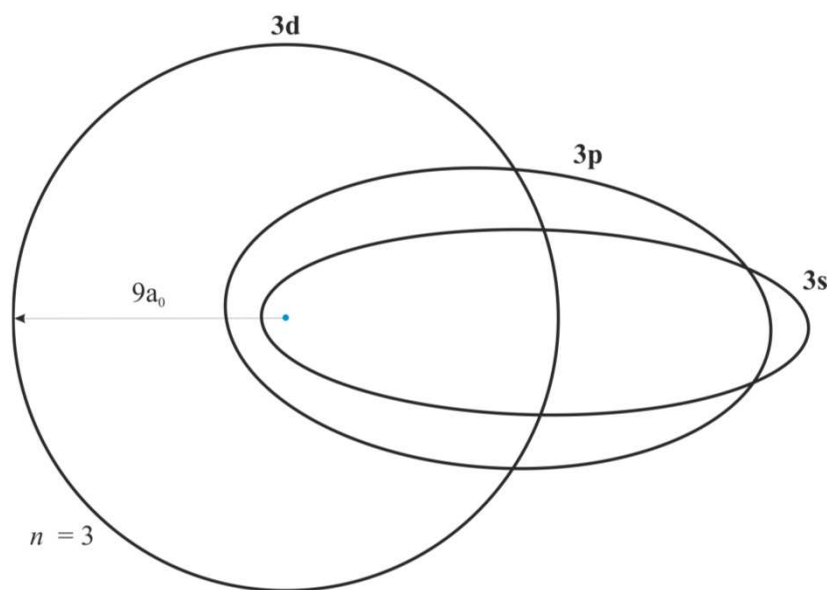


$n=5$



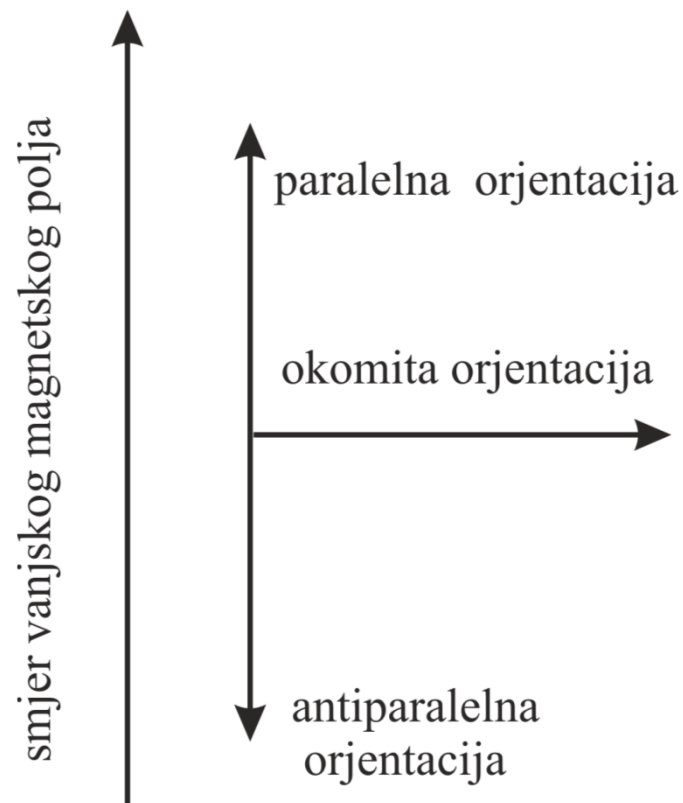
Kvantni brojevi

- **glavni kvantni broj** (n) određuje energetska ljusku
- **azimutski (sporedni) kvantni broj** ($l = 0, 1, \dots, n-1$) određuje vrstu podljuske

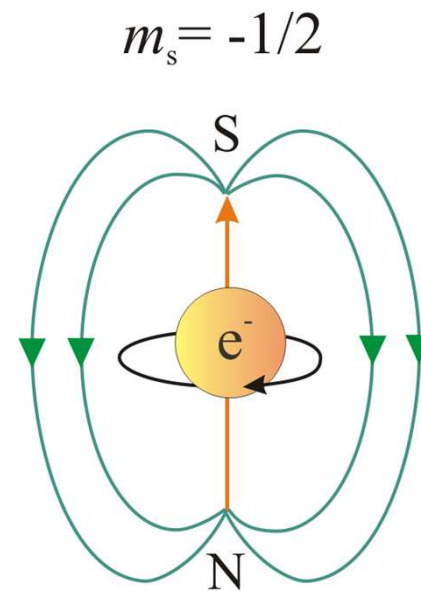
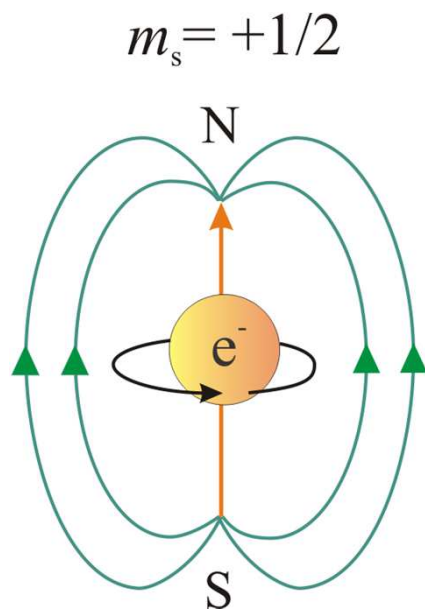


Kvantni brojevi

- **magnetski kvantni broj** ($m_l = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, +l$)
određuje broj orbita u pojedinoj podljusci koje se u prisustvu magnetskog polja međusobno razlikuju u energiji

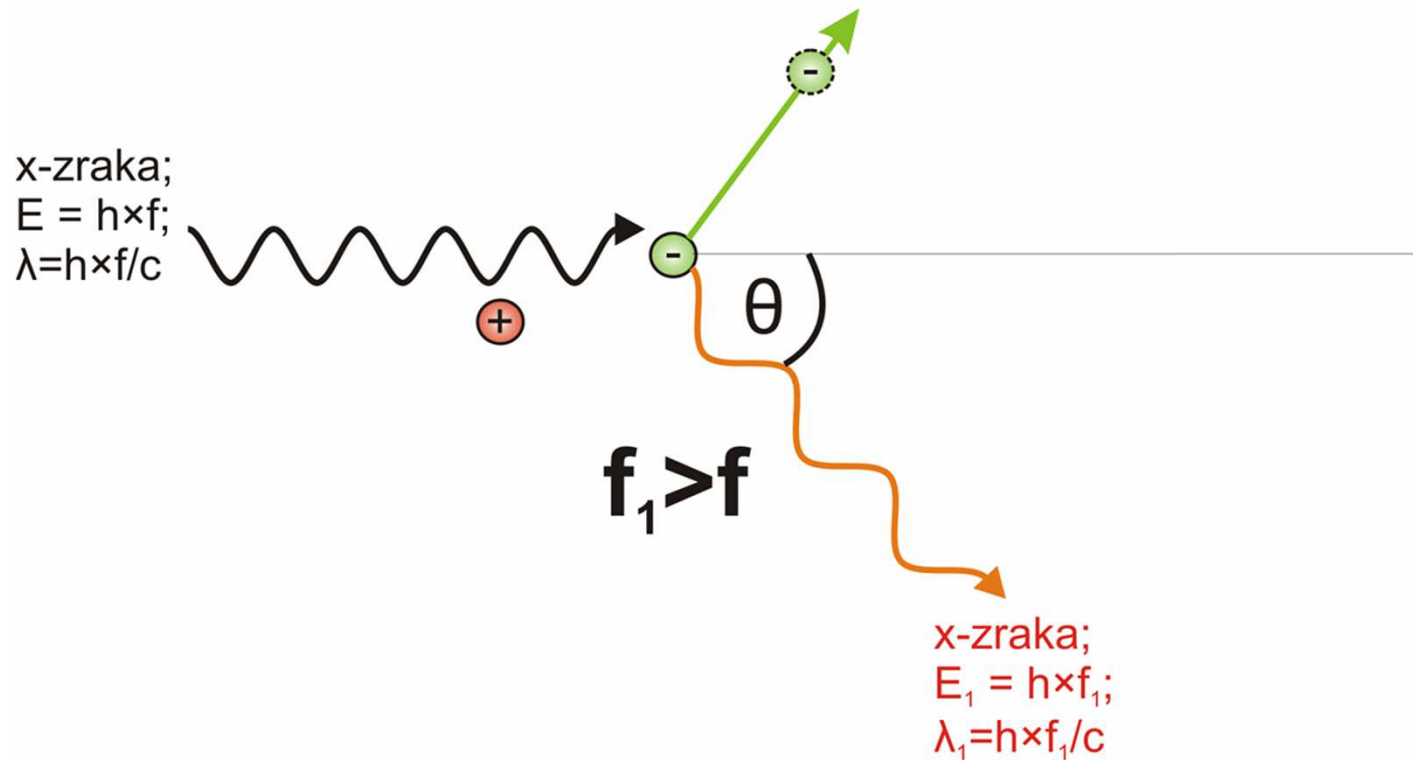


- ***kvantni broj spina*** ($m_s = \pm 1/2$) pretstavlja vrtnju elektrona oko vlastite osi (spin),



De Broglieva jednađba dvojne prirode materije

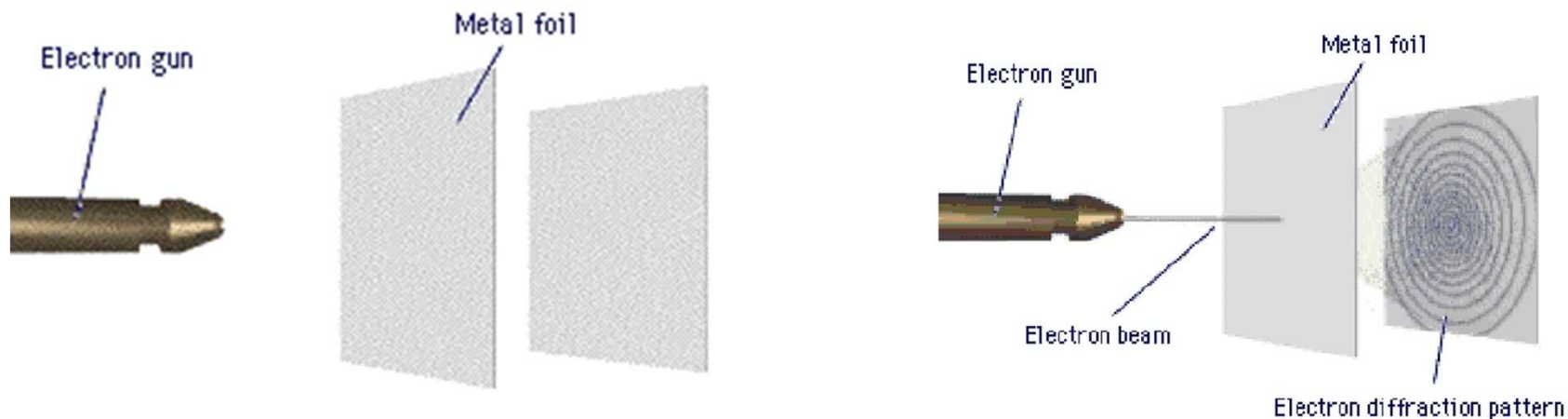
Comptonov efekt - odklon fotona pri sudaru s elektronom u atomu i povećanje valne duljine rasipne rendgenske zrake



dokaz korpuskularne prirode svijetla => ***foton je i val i čestica***

De Broglieva enačba dvojne prirode materije

- ***Difrakcija elektrona*** - rasipanje elektrona na metalnoj foliji (Davisson, Germer i G.P.Thomson 1927)



dokaz valne prirode elektrona

=> ***elektron je i val i čestica***

De Broglie primjenjuje dvojnu prirodu svjetlosti na elektron, odnosno materiju

- energija vala

$$E = h \times f$$

energija čestice

$$E = m \times c^2$$

De Broglieva jednačba:

za foton

$$\lambda = h / (m_{\text{fot}} \times c)$$

za elektron (ili bilo koju česticu)

$$\lambda = h / (m_{\text{el}} \times v_{\text{el}})$$

valovi materije nisu elektromagnetni valovi, nikad se ne odvajaju od čestice, brzina im je manja od brzine svjetlosti i nije stalna

- De Broglieva hipoteza je početak valne, odnosno kvantne mehanike, razvijane od Heisenberga (1925), Schrodingera (1926) i Diraca (1928)

Izračunajte valnu duljinu “čestice” u slijedeća dva slućaja: a) najbrži servis u tenisu iznosi oko 160 milja na sat, ili 62 m/s. Izračunajte valnu duljinu pridruženu teniskoj loptici mase 6×10^{-2} kg se kreće tom brzinom b) izračunajte valnu duljinu pridruženu elektronu koji se kreće istom tom brzinom.

a)

$$\lambda = h / (m \times v) = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s} / (6 \times 10^{-2} \text{ kg} \times 62 \text{ m/s}) = 10^{-34} \text{ m}$$

b)

$$\lambda = h / (m \times v) = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s} / (9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 62 \text{ m/s}) = 1.2 \times 10^{-5} \text{ m}$$

Heisenbergov princip neodređenosti

Problem sa valnom prirodom materije – val se prostire kroz prostor i njegova lokacija nije točno definirana

Ako elektronu pridružimo val-možemo li precizno odrediti njegov položaj?

- Nemoguće je točno ustanoviti brzinu, odnosno impuls (mv) elektrona i njegov položaj u prostoru

$$\Delta x \times \Delta(mv) > h$$

Δx - odstupanje od točnog položaja

$\Delta(mv)$ - odstupanje od točnog impulsa

ako $\Delta(mv) \rightarrow 0$ onda $\Delta x \rightarrow \infty$

Promatranjem elektrona (i svake druge elementarne čestice) remetimo sustav u kojem se on nalazi! **Zašto?**

Upotrebom γ -zraka možemo točno odrediti položaj elektrona u trenutku sudara s fotonom
posljedica - jako se mijenja impuls elektrona

ŠTO JE MANJA VALNA DULJINA FOTONA MOŽEMO DOBITI TOČNIJI POLOŽAJ ELEKTRONA ALI MU PRI TOM SVE VIŠE MIJENJAMO IMPULS, ODNOSNO BRZINU

Izračunajmo netočnost položaja elektrona ($m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$) koji se kreće brzinom od $1.2 \times 10^8 \text{ m/s}$ uz netočnost 0.001 %. Usporedite netočnost u položaju elektrona s onom auta mase 1000 kg i brzine $26.7 \pm 0.045 \text{ m/s}$.

$$\Delta x > \frac{h}{\Delta(mv)}$$

elektron

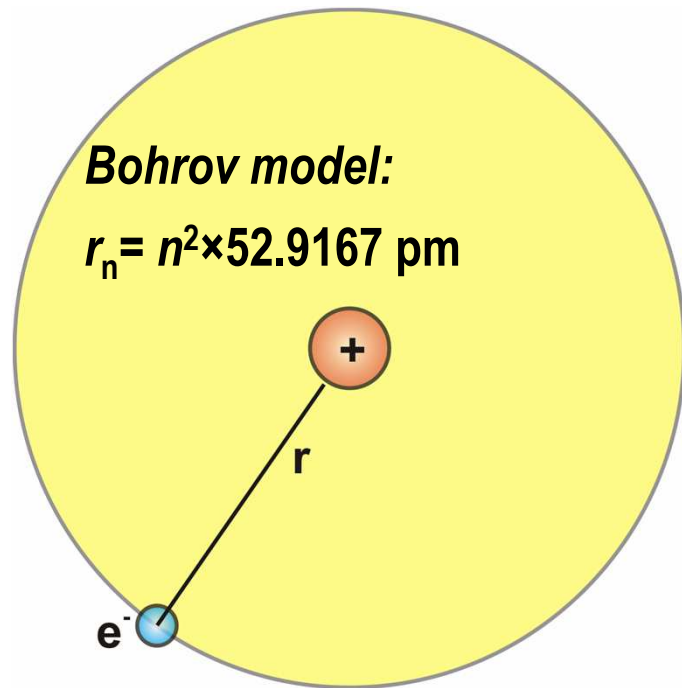
$$\Delta x > \frac{(6.626 \times 10^{-34} \text{ kg}^2 \text{ m}^2 / \text{s})}{(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}) \times (1.2 \times 10^8 \text{ m/s}) \times (0.001)} > 6.06 \times 10^{-9} \text{ m}$$

auto

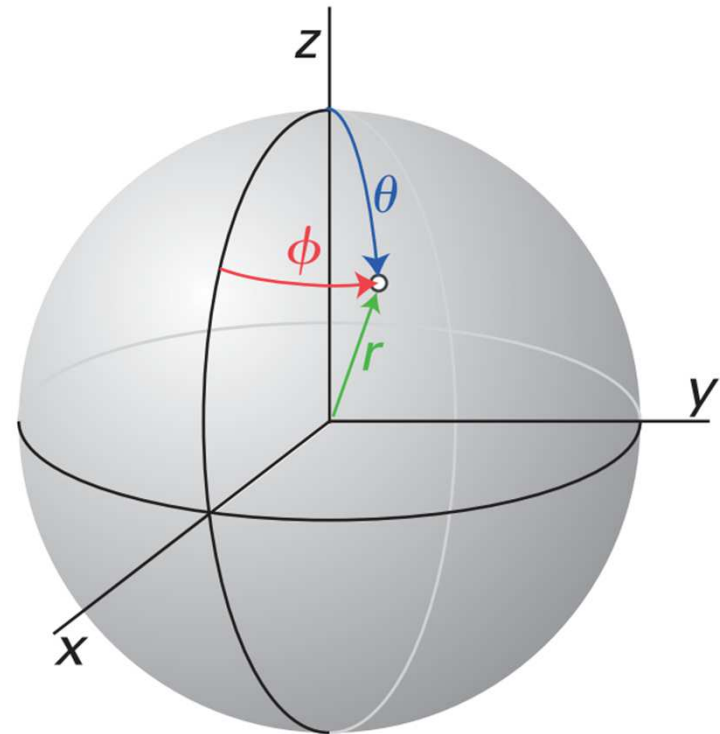
$$\Delta x > \frac{(6.626 \times 10^{-34} \text{ kg}^2 \text{ m}^2 / \text{s})}{(10^3 \text{ kg}) \times (0.0450 \text{ m/s})} > 1.47 \times 10^{-35} \text{ m}$$

Heisenbergov princip neodređenosti-posljedice

- elektron nema određene orbite (pad Bohr-Sommerfeldove teorije)
- postoji samo vjerojatnost nalaženja elektrona u prostoru oko jezgre
- veća vjerojatnost-veća gustoća naboja



$$r = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m Z e^2 k}$$



- postoji vjerojatnost nalaženja elektrona između jezgre i beskonačnosti u prostoru

Zaključci znanstvenika

- elektroni imaju osobine valova
- elektroni ne kruže oko jezgre u određenim putanjama
- nemoguće je istovremeno odrediti položaj i brzinu elektrona

Schrödingerova valna jednadžba

- objedinjuje valna i korpuskularna svojstva

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

m - masa elektrona

E - ukupna energija elektrona

h - Planckova konstanta

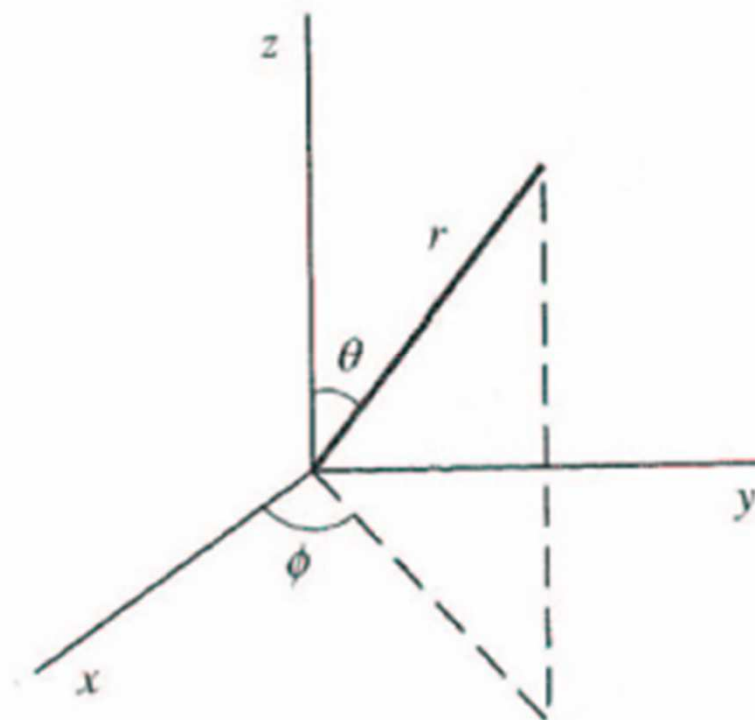
V - potencijalna energija ($V = kze^2/r$)

Ψ - amplituda vala

Schrödingerova valna jednačina

- Rješenje jednačine su tačno određene valne funkcije (Ψ) za svaku kombinaciju tri kvantna broja i svakoj od njih odgovara tačno određena količina energije
- Jednačinu je moguće egzaktno riješiti samo za jednoelektronske atome (npr. He^+ , H)
- Rješenja su valne funkcije koje se zovu atomske orbitale (stojni val određene valne dužine)

- rješenje Schrodingerove jednačbe uključuje ovisnost amplitude valne funkcije o **udaljenosti od jezgre r** i **kutne varijable**



$$\psi = \underset{\text{radijalni dio}}{f(r)} \times \underset{\text{kutni (angularni) dio}}{f(\theta, \phi)}$$

Rješenje **Schrödingerove valna jednažbe** za vodikov atom za kvantne brojeve $n = 1$, $l = 0$ i $m = 0$ je Ψ_{100} (ili Ψ_{1s})

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-r/a_0}$$

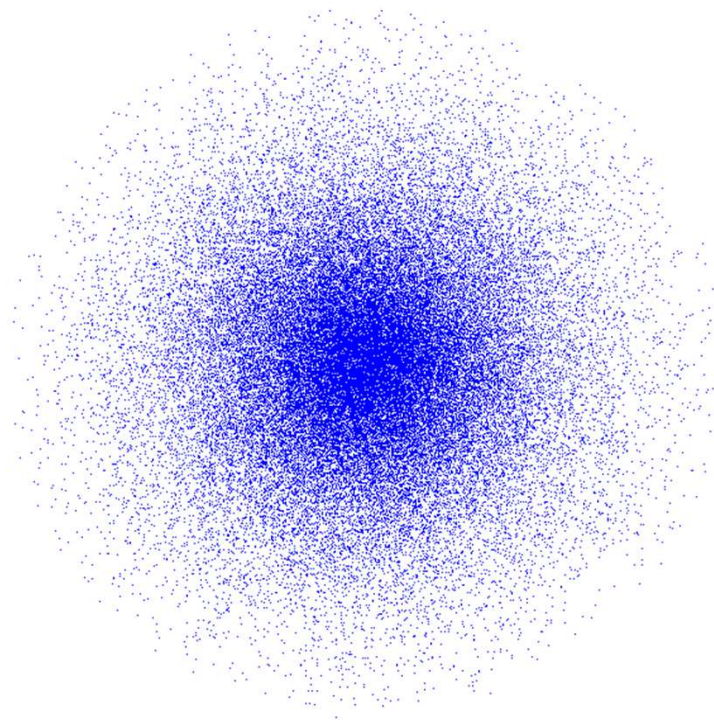
a_0 - Bohrov radijus, 5.3×10^{-11} m

r - udaljenost od jezgre

1s- oznaka orbitale (1 glavni kvantni broj)

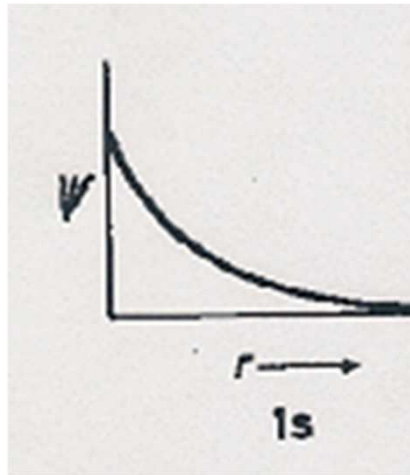
- Ψ_{1s} orbitala ima najnižu energiju
- Ψ_{1s} orbitala je sferno simetrična, odnosno nije orijentirana u prostoru jer ne ovisi o kutnoj varijabli

Kvantnomehanički pristup odbacuje određene putanje elektrona i zamjenjuje ih prostorom vjerojatnosti nalaženja elektrona oko atomske jezgre koji se predočava kao elektronski oblak različite gustoće



1s orbitala

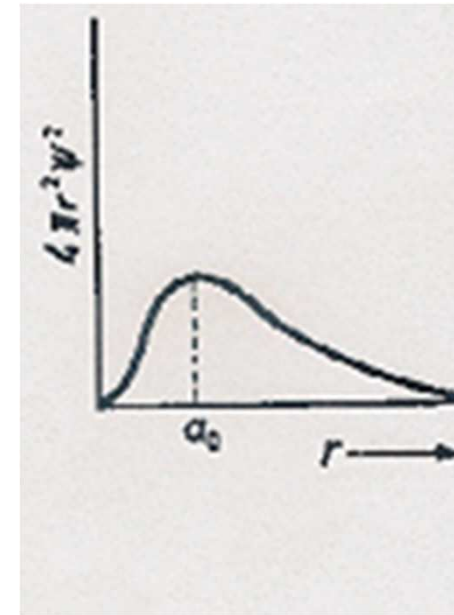
1s orbitala



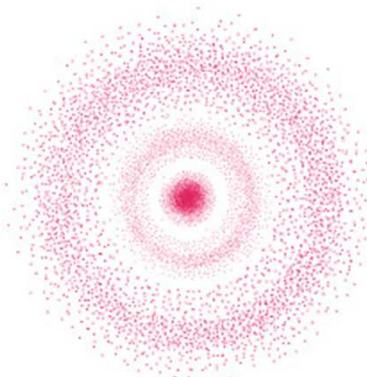
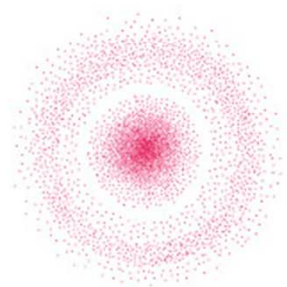
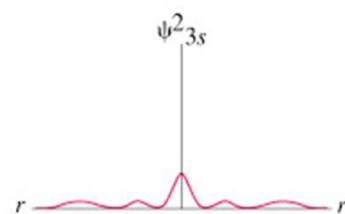
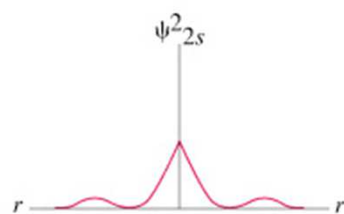
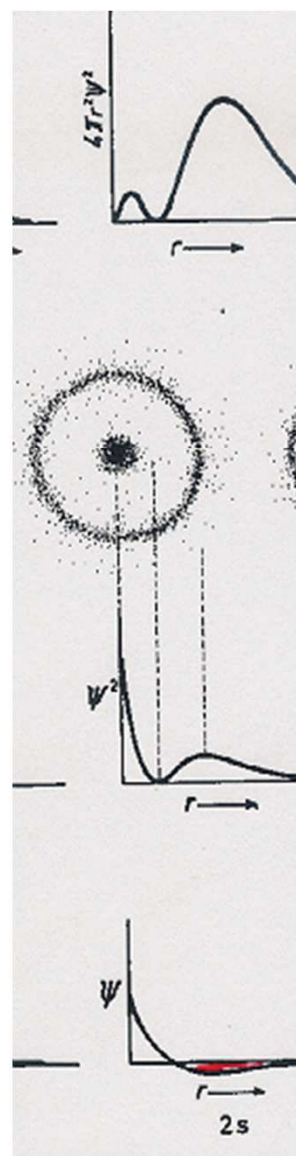
$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-r/a_0}$$



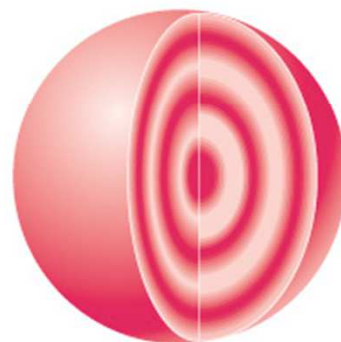
ψ^2 odgovara vjerojatnosti nalaženja elektrona s istom energijom u datom dijelu prostora, a slikovito se prikazuje gustoćom elektronskog oblaka



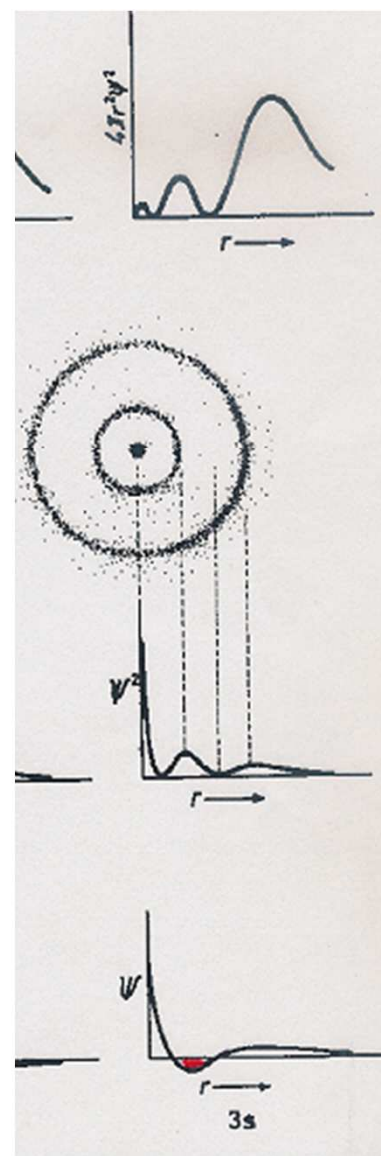
Radijalna vjerojatnost gustoće elektrona



(b) 2s

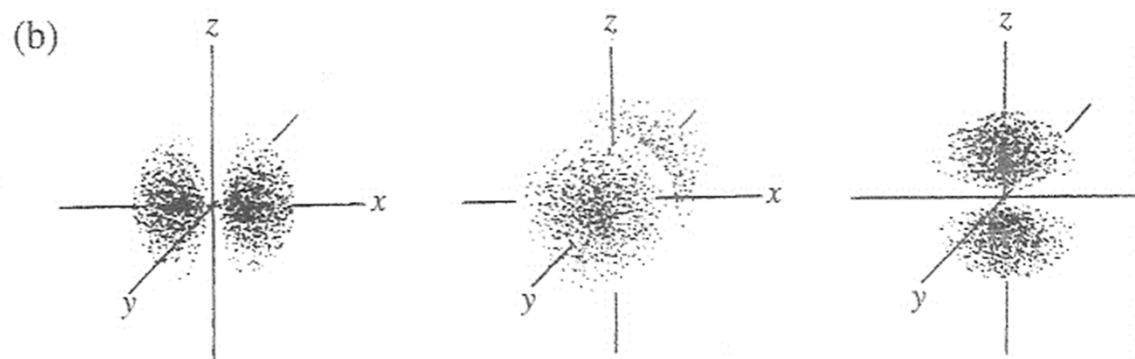
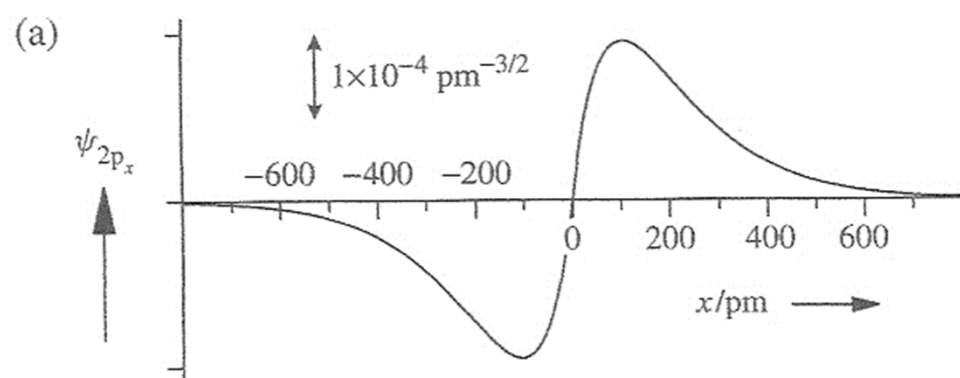


(c) 3s



$$\psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) \cdot e^{-r/(2a_0)}$$

$$\psi_{3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi a_0^3}} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2} \right) \cdot e^{-r/(3a_0)}$$



$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \cdot \frac{x}{a_0} \cdot e^{-r/(2a_0)}$$

$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \cdot \frac{y}{a_0} \cdot e^{-r/(2a_0)}$$

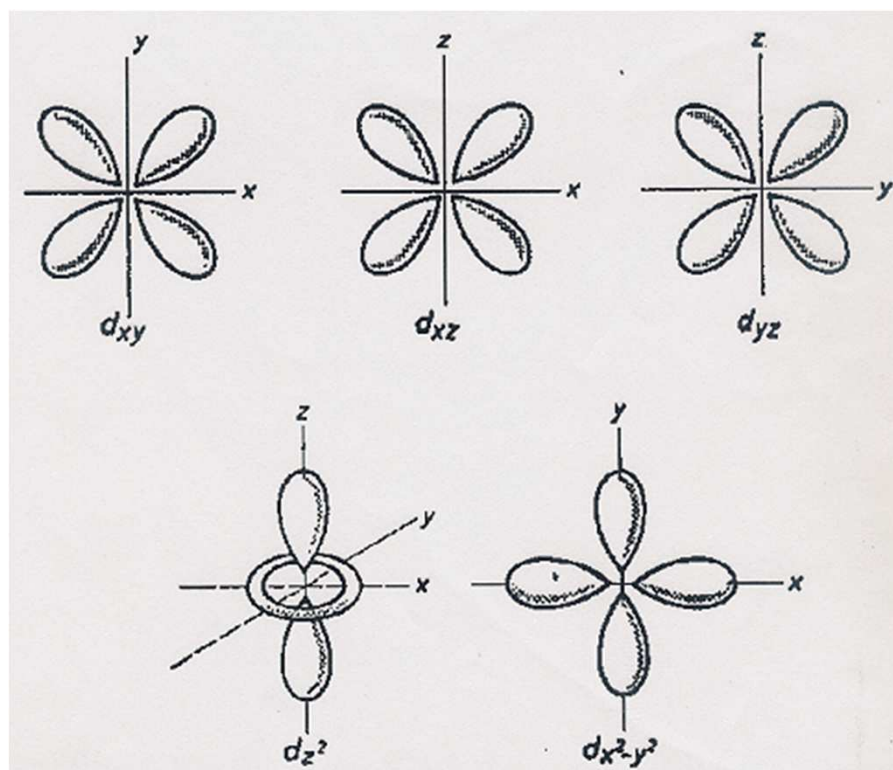
$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \cdot \frac{z}{a_0} \cdot e^{-r/(2a_0)}$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\begin{aligned}
 3d_{xy} \quad \psi_{3d_{xy}} &= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot \frac{x}{a_0} \cdot \frac{y}{a_0} \cdot e^{-r/(3a_0)} \\
 3d_{yz} \quad \psi_{3d_{yz}} &= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot \frac{y}{a_0} \cdot \frac{z}{a_0} \cdot e^{-r/(3a_0)} \\
 3d_{xz} \quad \psi_{3d_{xz}} &= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot \frac{x}{a_0} \cdot \frac{z}{a_0} \cdot e^{-r/(3a_0)} \\
 3d_{x^2-y^2} \quad \psi_{3d_{x^2-y^2}} &= \frac{1}{81\sqrt{2\pi a_0^3}} \left[\left(\frac{x}{a_0} \right)^2 - \left(\frac{y}{a_0} \right)^2 \right] \cdot e^{-r/(3a_0)} \\
 3d_{z^2} \quad \psi_{3d_{z^2}} &= \frac{1}{81\sqrt{6\pi a_0^3}} \left[3 \left(\frac{z}{a_0} \right)^2 - \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 \right] \cdot e^{-r/(3a_0)}
 \end{aligned}$$



ELEKTRONSKA KONFIGURACIJA ATOMA

- *Paulijev princip zabrane*
- *“ $n+l$ ” pravilo*
- *Hundovo pravilo*

- **Paulijev princip zabrane:** u atomu ne mogu imati dva elektrona iste vrijednosti sva četiri kvantna broja

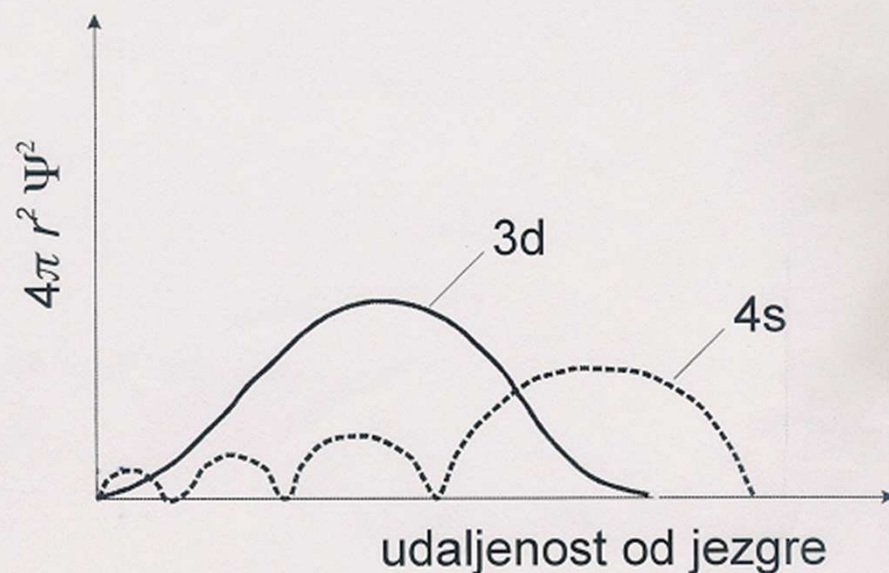
K-ljuska ima jednu *orbitalu* $n = 1, l = 0, m_l = 0$, u kojoj mogu biti samo dva elektrona s $m_s = +1/2$ i $-1/2$

n	l	m_l	m_s
1	0	0	+1/2
1	0	0	-1/2

elektronska konfiguracija K-ljuske je $1s^2$

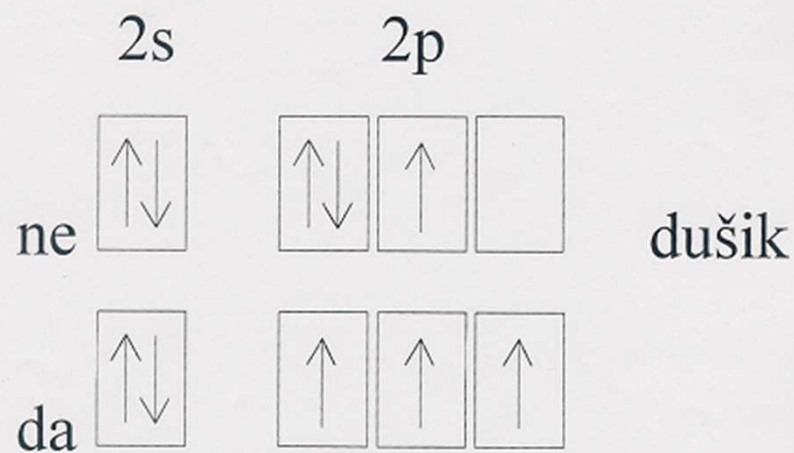
“ $n+l$ ” pravilo: elektroni popunjavaju podljuske takvim redosljedom da se povećava zbroj $n+l$, a ako je zbroj isti, popunjava se podljuska s manjim n .

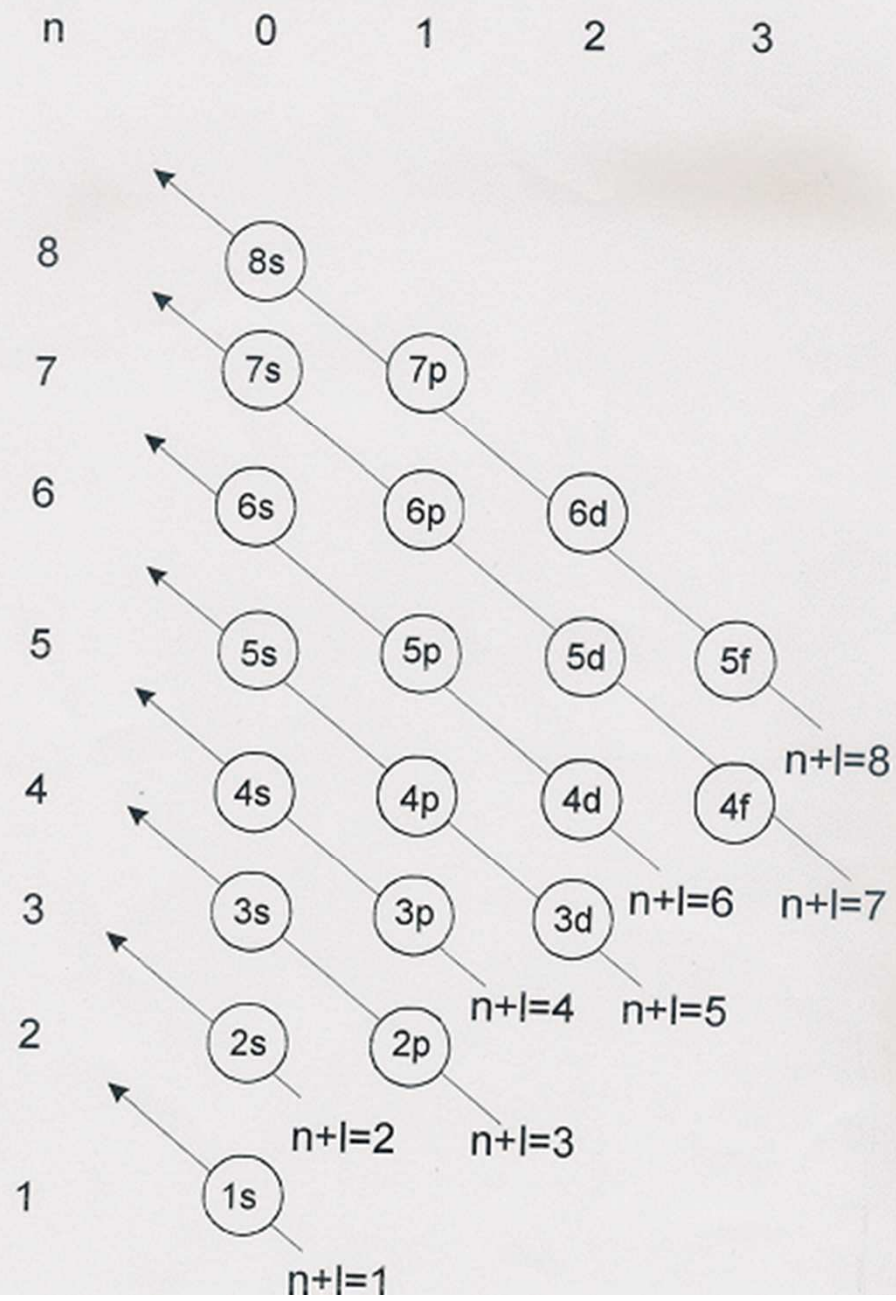
posljedica je efekta prodiranja – popunjava se ona orbitala koja ima veću radijalnu gustoću u blizini jezgre

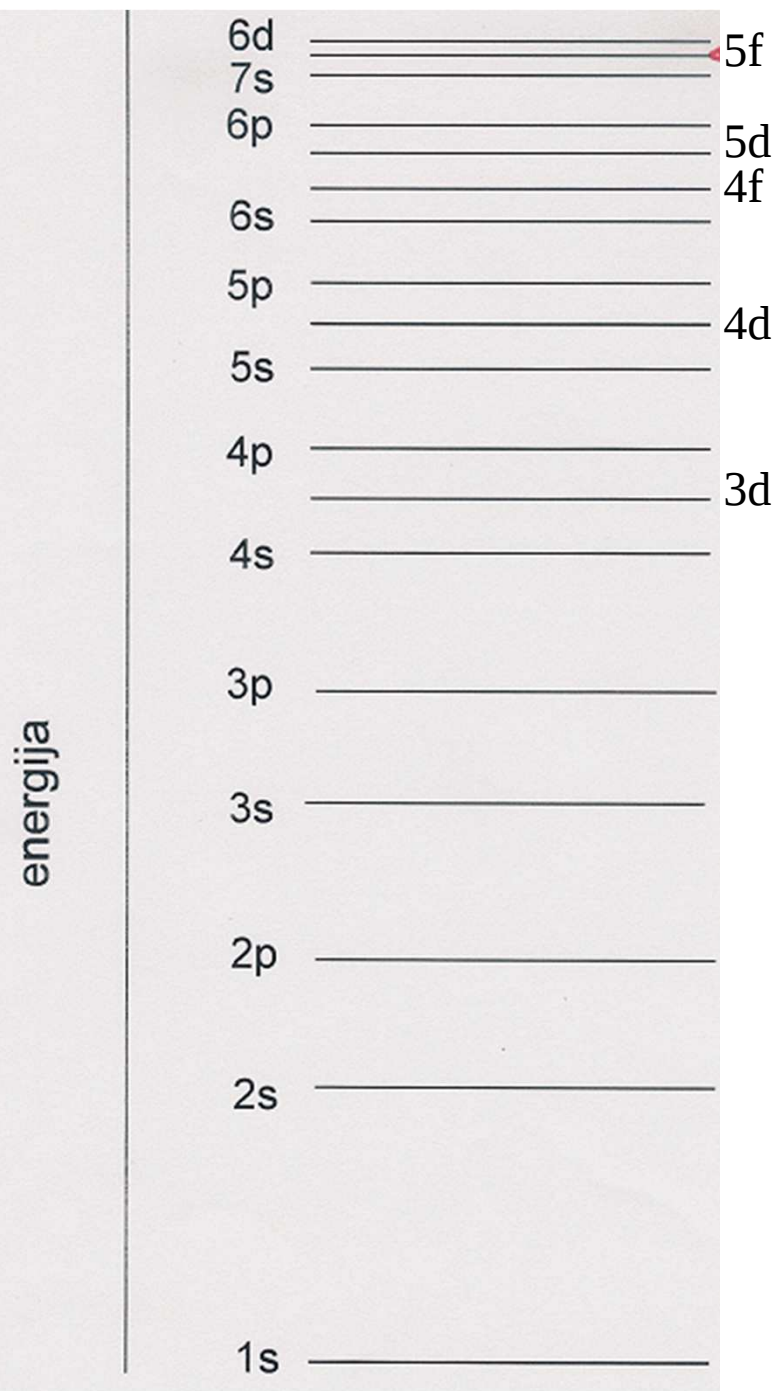


Prvo se elektronima popunjava 4s orbitala, ali se i lakše gube elektroni iz 4s orbitale nego iz 4d orbitale, jer elektron u 4s orbitali boravi duže vremena udaljenije od jezgre nego elektron u 3d orbitali

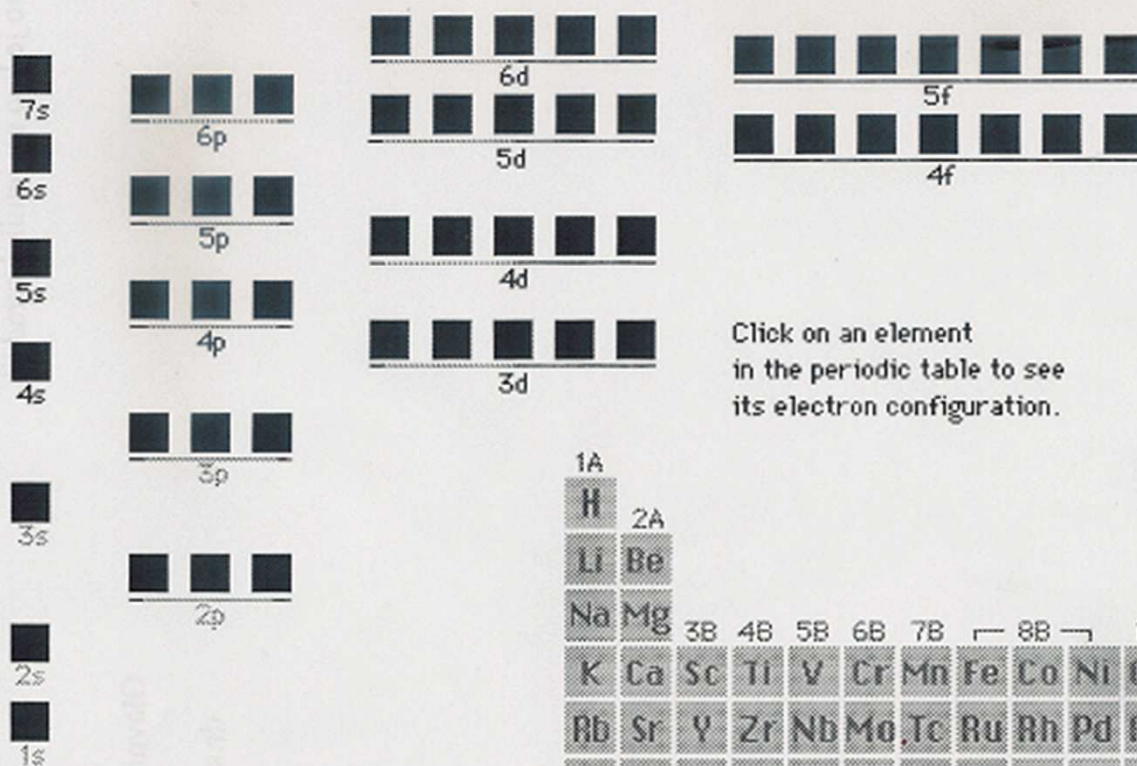
- *Hundovo pravilo*: elektroni se razmještaju unutar istovrsnih degeneriranih orbitala tako da broj nesparenih elektrona s paralelnim spinovima bude maksimalan (posljedica međusobnog odbijanja elektrona pa svaki nastoji ući u svoju orbitalu)







Order of Filling



Click on an element in the periodic table to see its electron configuration.

[illegible]