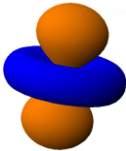


S 2016/20174. Aatomid 1



Aatomid

Keemia alused
Toomas Tamm

YKI0020 Keemia alusedToomas Tamm 2016

S 2016/20174. Aatomid 2

Ülevaade

(Õpik ptk 1, esimene pool)

- Kaasaegne aatomimudel
- Elektromagnetkiirgus
- Aatomispektrid
- Kvantteooria: kiirgus, kvandid ja fotonid
- Duaalsus
- Määramatuse printsiip

YKI0020 Keemia alusedToomas Tamm 2016

S 2016/20174. Aatomid 3

Kaasaegne aatomimudel

- Väikeste osakeste (molekulide, aatomite ja nende koostisosade) käitumist kirjeldab **kvantmehaanika**.
- Kvantmehaanika on matemaatiline teooria, mis võimaldab ennustada mikroosakestega toimuvate protsesside tulemusi.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(r) - \frac{\alpha}{r} \psi(r) &= E \psi(r) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(r') - \frac{\alpha}{r'} \psi(r') &= E' \psi(r') \\ -A \frac{1}{(2A/B)^3} \left(\nabla^2 \psi(r') \right) - \frac{B}{(2A/B)^2 r'} \psi(r') &= E' \left(\frac{B^3}{2A} \right) \psi(r') \\ -\frac{1}{2} \left(\nabla^2 \psi(r') \right) - \frac{1}{r'} \psi(r') &= E' \psi(r') \end{aligned}$$

- Paljud kvantnähtused erinevad igapäevaelust tuttavatest nähtustest, mistõttu analoogiad kehtivad vaid piiratud ja osaliselt.

Joonis: physics.csbjtu.edu/QMToomas Tamm 2016

S 2016/2017

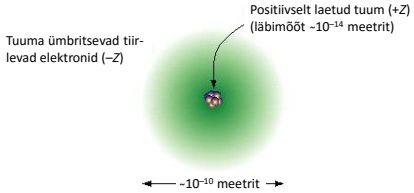
4. Aatomid 4

Kaasaegne aatomimudel

Tuuma ümbritsevad tiirlevad elektronid (−*e*)

Positiivselt laetud tuum (+*z*) (läbimõõt ~10^{−14} meetrit)

~10^{−10} meetrit



Joonis: universe-review.ru
Toomas Tamm 2016

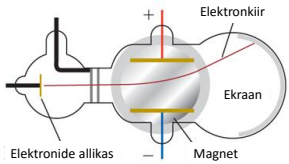
YKI0020 Keemia alused

S 2016/2017

4. Aatomid 5

Aatomimudeli ajalugu

- Elektroni avastamine: J. J. Thomson 1897



Joonis: © W.H. Freeman & Co
Toomas Tamm 2016

YKI0020 Keemia alused

S 2016/2017

4. Aatomid 6

Aatomimudeli ajalugu

- Elektroni laengu kindlaksmääramine: R. Millikan 1909
- Tulemused (tänapäevased):
laeng $-e = 1,602 \cdot 10^{-19}$ C
mass $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}$ kg



Joonis: © W.H. Freeman & Co
Toomas Tamm 2016

YKI0020 Keemia alused

5.2016/2017

4. Aatomid 7

Aatomimudeli ajalugu

- Tuuma olemasolu ja ligikaudsete mõõtmete kindlakstegemine: Rutherford, Geiger, Marsden 1908–1913

YKI0020 Keemia alused

Joonis: © W.H. Freeman & Co
Toomas Tamm 2016

5.2016/2017

4. Aatomid 8

Aatomimudeli ajalugu

- Tuuma olemasolu ja ligikaudsete mõõtmete kindlakstegemine: Rutherford, Geiger, Marsden 1908–1913

YKI0020 Keemia alused

Joonis: © W.H. Freeman & Co
Toomas Tamm 2016

5.2016/2017

4. Aatomid 9

Elektromagnetkiirgus

Wavelength (m)	Electromagnetic Radiation Type
10^{-12}	gamma-kirgus
10^{-10}	röntgen
10^{-8}	ultra-violet
10^{-6}	infra-punane
10^{-4}	mikro-lained
10^{-2}	raadiolained
1	FM
10^2	AM
10^4	

Visible light spectrum (nähtav valgus) details:

Wavelength (nm)	Color
400	Violet
500	Green
600	Orange
700	Red

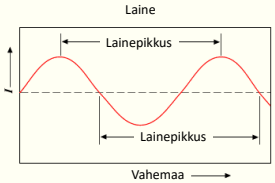
YKI0020 Keemia alused

Toomas Tamm 2016

5.2016/2017 4. Aatomid 10

Elektromagnetkiirgus

- Liigub ruumis (vaakumis) kiirusega $c \approx 3,00 \cdot 10^8 \text{ m/s}$



- Lainepikkus λ (lambda)
- Sagedus ν (nüü), ühik: $1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$.

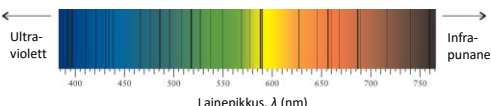
$$\lambda \nu = c$$

Joonis: Wikipedia
Toomas Tamm 2016

5.2016/2017 4. Aatomid 11

Aatomispektrid

- Kui juhtida valgust läbi aine (näit. gaasi), siis osad lainepikkused neelduvad: saame vastava aine (joon)spektri.



- Iga spektrijoon vastab aatomis elektronide üleminekule kahe *energia*nivoo vahel. Näiteks vesiniku aatomi (ainult üks elektron) korral

$$\nu = R \left\{ \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right\} \quad n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots, n_1 \neq n_2$$

kus R on katseliselt määratud *Rydbergi konstant*, $3,29 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$

Joonis: © W.H. Freeman & Co
Toomas Tamm 2016

5.2016/2017 4. Aatomid 12

Kvantteooria

- Kuumutatud kehad kiirgavad, sõltuvalt temperatuurist, infrapunast, nähtavat või ultraviolettkiirgust.
- Klassikaline mehaanika ennustab, et sellised kehad peaksid kiirgama röntgen- ja gammakiiri.
- Max Planck, 1900: energia kiirgub *kvantide* kaupa, aineosake saab energiat kiirata või neelata vaid kindla suurusega portsjonitena (kvantidena).

$$E = h\nu$$

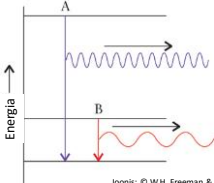
- E on kvandi energia; h on *Plancki konstant*, $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$.

YKI0020 Keemia alused
Toomas Tamm 2016

5 2016/20174. Aatomid 13

Footonid

- Ühekorraga kiirguv valguseosake ehk kvant on *footon*. Footoni energia on seotud tema sagedusega:
$$E = h\nu$$
- Spektrijoonele vastava footoni sagedus on seotud vastavate energianivoodega:
$$h\nu = E_{\text{kõrgem}} - E_{\text{madalam}}$$

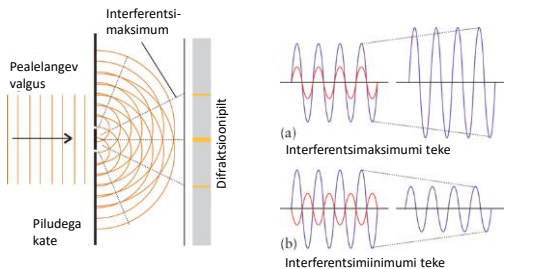


YKI0020 Keemia alusedJoonis: © W.H. Freeman & CoToomas Tamm 2016

5 2016/20174. Aatomid 14

Interferents

- Sünkroonsed lained, näiteks kahe pilu läbimisel saadavad, *interfereeruvad* ehk tekitavad iseloomuliku mustri.

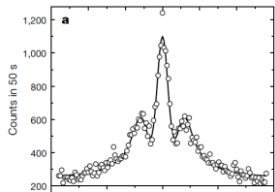
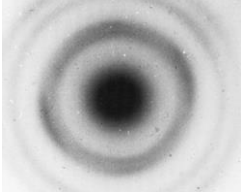


YKI0020 Keemia alusedJoonis: © W.H. Freeman & CoToomas Tamm 2016

5 2016/20174. Aatomid 15

Duaalsus

- Mikroosakestel on üheaegselt lainete ja osakeste omadused. Eri omadused avalduvad erinevates situatsioonides (katsetes).



Elektronide difraktsioonipilt pärast väga õhukese kullalehe läbimist (Davisson ja Germer, 1925).

Fullereeni (C₆₀) molekulide difraktsioonipilt pärast 100 nm difraktsioonivõre läbimist (Arndt et al, 1999)

YKI0020 Keemia alusedJoonis: © W.H. Freeman & CoNature, 401, 680 (1999)Toomas Tamm 2016

5.2016/2017 4. Aatomid 16

Duaalsus

- de Broglie (1925) tõi välja seose osakese (keha) massi ja kiiruse ning tema lainepikkuse vahel:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

- Aatomis liikuva elektroni lainepikkus on võrreldav aatomi mõõtmetega (alla 0,1 nm).
- Makroskoopiliste kehade lainepikkused jäävad alla detekteerimispiiri (10^{-30} m ja lühemad).

YKI0020 Keemia alused Toomas Tamm 2016

5.2016/2017 4. Aatomid 17

Määramatuse printsiip

- Klassikalises mehaanikas kehal on kindel trajektoor (asukoht, kiirus igal ajahetkel).
- Laine asukohta pole võimalik üheselt määrata, lainel on „loomulikud mõõtmised“.
- Heisenbergi **määramatuse printsiip** (1927): Teatavad füüsikalised suurused, näiteks osakese asukoht ja kiirus, moodustavad *komplementaarse* paari. Komplementaarseid omadusi ei ole võimalik üheaegselt täpselt mõõta.

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$$

$$p = mv; \quad \hbar = h / 2\pi$$

YKI0020 Keemia alused Toomas Tamm 2016

5.2016/2017 4. Aatomid 18

Järgmiseks korraks

- Lugeda õpikust **peatükk 1 „Aatomid: kvantmaailm“**.
 - Peatükkides 1.7 – 1.9 leiduvad matemaatilised võrrandid ja tuletuskäigud võib vahele jätta.

YKI0020 Keemia alused Toomas Tamm 2016
