

Materiens Struktur I

Atomers och molekylers struktur

Kursen ger en introduktion till kvantmekaniken med vilken fenomen i mikrokosmos behandlas. Med den klassiska teoribildningen kunde man inte förklara den nya information, som man fick om materialets minsta beståndsdelar i början av 1900-talet. I kursen behandlas först detta brytningskede mellan den klassiska och moderna teoribildningen. Sedan introduceras Schrödingerekvationen och kvantmekaniken. Kvantmekaniken användes för att förklara atomens och molekylernas struktur och excitationsmönster. Kursen har en fortsättning i kursen Materiens struktur II, som behandlar det fasta tillståndets fysik samt kärn- och partikelfysik.

Kursen bygger på material från böckerna

[BM] John J. Brehm & William J. Mullin: *Introduction to the Structure of Matter* (John Wiley & Sons)

[AP] Peter W. Atkins & Julio de Paula: *Physical Chemistry, Part 2: Structure* (7th ed., Oxford University Press)

Det nuvarande materialets historia:

Björn Fant (bjorn.fant@helsinki.fi)

- ursprungliga föreläsningsteckningar från 2000 och före

Krister Henriksson (krister.henriksson@helsinki.fi)

- elektroniska anteckningar, renskrivning, kompletteringar, år 2000

Miklos Långvik (miklos.langvik@helsinki.fi)

- elektroniska anteckningar, renskrivning, år 2004 och 2006

Krister Henriksson (krister.henriksson@helsinki.fi)

- uppdateringar och kompletteringar, år 2013

I. Inledning

Kursen behandlar atomernas och molekylernas struktur. Materien består av atomer och molekyler, som i sin tur är uppbyggda av mindre partiklar. Vi har skaffat oss information om materien via hypoteser och experiment.

Via ett kretslopp av experiment \Rightarrow hypotes \Rightarrow nytt experiment o.s.v. når man slutligen en fungerande modell som beskriver fenomenen. I sin enklaste form beskriver en modell hur nånting påverkar nånting annat, och kallas då närmast en **lag**, för att den "bokför" en observerad lagbundenhet.

Om en lag, modell, fungerande hypotes, etc kan förklaras mera fundamentalt kallas den ofta för en **teori**. För teorier kräver man dock för det mesta att de kan göra förutsägelser som kan verifieras eller falsifieras. Ofta minimerar man de antaganden (axiom) som man måste förlita sig på för att kunna bygga upp teorin.

Enligt den klassiska mekaniken, som utvecklades av Isaac Newton i slutet av 1600-talet, råder en strikt kausalitet: partiklars rörelse kan exakt förutses. Under 1920-talet började man ifrågasätta denna princip för de minsta partiklarna. Man hade upptäckt att partikelstrålar kunde uppfattas som

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◇ ▶▶▶▶ × 3

vågor i vissa sammanhang och man kom till uppfattningen att en observation av partiklarna påverkar dessa. Redan tidigare hade man fått indikation om att energin är kvantiserad. På den här kursen introduceras kvantmekaniken, som är den allmänna teorin, med vilken vi beskriver mikrokosmos.

För makrokosmos använder man för det mesta Einsteins allmänna och speciella teori för att förklara universum i stort. I den vardagliga världen räcker Newtons mekanik och speciell relativitet för att förklara det mesta. För mikrokosmos måste man använda kvantfysik och speciell relativitet för att få en sannare bild av materien.

Några historiska återblickar

Redan de gamla grekerna funderade på materien. Demokritos fastslog år 420 fKr att materiens minsta beståndsdel är atomen (atomos). Aristoteles ansåg att materiens beståndsdelar är jord, vatten, luft och eld. Den naturvetenskapliga metoden som bygger på planerade experiment startade med Galileo Galileis experiment i början av 1600-talet. De grundläggande mekaniklagarna publicerades av Isaac Newton i Principia Mathematica år 1687. Newton kunde i sin härledning av gravitationslagen även utnyttja Keplers lagar, som Johannes Kepler härledde i början av 1600-talet. Robert Boyles gaslag (pV = konstant) är även från medlet av 1600-talet. En kombination av denna med Gay-Lussac's lag (V/T = konstant) ledde sedan fram till den ideala gaslagen. Under 1700-talet studerades de kemiska reaktionerna t. ex. av A. Lavoisier (materien är oförstörbar) och J. Dalton (masslagen).

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◇ ▶▶▶▶ × 4

År 1808 lanserade Dalton sin atomteori: materien består av atomer. A. Avogadro kom underfund med att gasformiga grundämnen upptar samma volym under identiska förhållandet. Detta ledde sedan fram till Avogadros tal, som anger hur många molekyler per mol ett ämne innehåller. D. Mendelejev och L. Meyer gjorde oberoende av varandra upp det periodiska systemet år 1869. Enligt detta kan grundämnena tillföras vissa grupper enligt sina kemiska egenskaper.

År 1897 upptäckte Thomson elektronen och något år senare kunde Millikan noggrant bestämma förhållandet mellan elektronens laddning och massa. År 1900 kunde Max Planck ge en korrekt beskrivning av svartkroppsstrålningens spektrum bl.a. med antagandet att strålningens energi är kvantiserad. Planck förstod dock inte till fullo vidden av sitt antagande. Albert Einstein kunde senare ge en utförligare förklaring av energins kvantisering, då ha år 1905 förklarade den fotoelektriska effekten. Andra viktiga upptäckter från denna tid är Röntgens upptäckt av röntgenstrålningen år 1895 samt upptäckten av den radioaktiva strålningen α , β och γ av Becquerel och Curie ett par år senare. Einsteins relativitetsteori är från år 1905.

År 1910 inledde Ernest Rutherford en serie experiment som ledde fram till upptäckten av atomkärnan och år 1911 presenterade han sin atommodell enligt vilken elektronerna kretsar kring en positivt laddad kärna. Dansken Niels Bohr kunde sedan år 1913 presentera en modell för atomer, enligt vilken energitillstånden i en-elektronsatomer kan beräknas. Bohr utnyttjade antagandet om energins

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◇ ▶▶▶▶ X 5

kvantisering och kombinerade detta med information om atomernas spektra, som är linjespektra. T.ex. Balmerseriens linjer kan beräknas med Bohrs atommodell.

År 1932 upptäckte J. Chadwick neutronen och senare under 1930-talet upptäcktes andra kärmpartiklar. I takt med att acceleratoreterna har utvecklats har man hittat nya partiklar och en ny gren av fysiken, nämligen partikelfysiken, började utvecklas. Den centrala delen av denna kurs behandlar uppkomsten av kvantmekaniken, som är den teori med vilken vi kan beskriva alla dessa partiklar och de system som de bygger upp.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◇ ▶▶▶▶ X 6