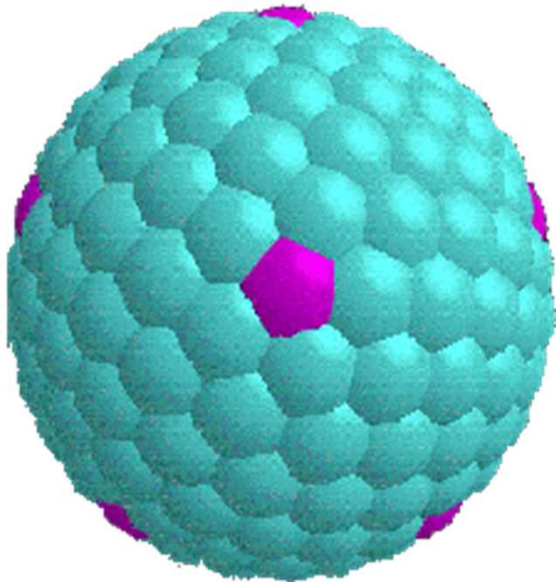


wykład V-VI

Podstawy Procesów
i Konstrukcji Inżynierskich

Atom wodoru

Model atomu Thompsona

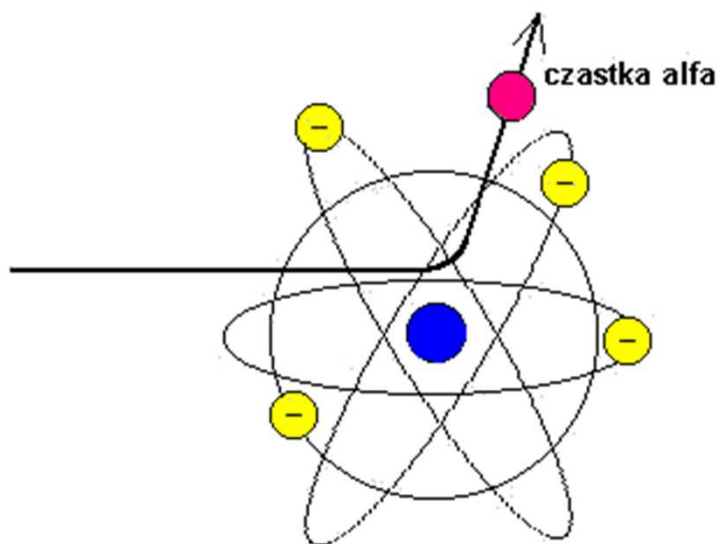


Model atomu typu „ciastka z rodzynekami”

- w 1903 J.J. Thompson zaproponował model budowy atomu, zgodnie z którym ujemnie naładowane elektrony znajdują się wewnątrz pewnego obszaru, w którym w sposób ciągły rozłożony jest ładunek dodatni
- w wyniku wzajemnego odpychania elektrony są jednorodnie rozmieszczone wewnątrz kuli utworzonej z ładunku dodatniego

▪ sumaryczny ładunek dodatni kuli równy jest sumarycznemu ładunkowi elektronów, tak więc atom jako całość jest obojętny elektrycznie.

Model atomu Rutherforda



Model Rutherforda

- E. Rutherford ze współpracownikami przeprowadził doświadczenie, które umożliwiło określenie rozkładu dodatnich i ujemnych ładunków we wnętrzu atomu
- w doświadczeniu użyto cząstek α ; obserwowano zmianę kierunku ich lotu (rozproszenie) przy przechodzeniu przez cienką warstwę materii. Okazało się, że pewna liczba cząstek α rozpraszana jest pod bardzo dużymi kątami (prawie 180°)

- Po przeanalizowaniu wyników Rutherford doszedł do wniosku, że tak silne odchylenie cząstek jest możliwe w przypadku, gdy wewnątrz atomu występuje silne pole elektryczne wytwarzane przez ładunek związany z dużą masą i skoncentrowany w bardzo małej objętości
- Rutherford w 1911 r. zaproponował jądrowy model atomu, który ma postać układu ładunków - w środku znajduje się ciężkie dodatnio naładowane jądro o ładunku Ze , a wokół jądra, w całej objętości zajmowanej przez atom, rozmieszczone jest Z elektronów. Prawie cała masa atomu skupiona jest w jądrze

Model Bohra atomu wodoru

- model Bohra atomu wodoru opisuje atom wodoru jako układ, w którym elektron krąży wokół jądra (protonu) po orbitach kołowych,
- dozwolone są tylko te orbity, na których elektron ma moment pędu o wartości będącej wielokrotnością stałej \hbar :



Niels **BOHR** (1885-1962),
fizyk duński

$$mr_n v_n = n\hbar$$

gdzie n jest liczbą naturalną określającą numer orbity.

n można utożsamiać z główną liczbą kwantową.

r_n promień dozwolonej orbity kołowej

v_n prędkość elektronu na n -tej orbicie

Model Bohra atomu wodoru

$$R_n = n^2 \frac{\hbar^2}{k_0 Z m e^2} \quad \text{promień } n\text{-tej orbity}$$

$$v^2 = \frac{k_0 Z e^2}{n \hbar} \quad \text{prędkość elektronu na } n\text{-tej orbicie}$$

$$E_n = -k_0^2 \frac{Z^2 m e^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13,6 \cdot \left(\frac{Z^2}{n^2} \right) \text{eV}$$

Model Bohra daje prawidłowe wartości energii i długości emitowanych fal, jednak nic nie mówi o innych liczbach kwantowych, od których zależy stan elektronu

Trójwymiarowe równanie Schrödingera

Atom wodoru jest trójwymiarowy dlatego należy rozważyć cząstkę znajdującą się w trójwymiarowym pudle potencjału

Funkcja falowa takiej cząstki ma postać:

$$\Psi = A \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z$$

Różniczkujemy dwukrotnie po x,y i z

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k_x^2 A \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z = -k_x^2 \Psi$$

W konsekwencji otrzymamy

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -k^2 \Psi$$

Trójwymiarowe równanie Schrödingera

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -k^2 \Psi$$

Korzystając z tego, że $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)$

Otrzymujemy niezależne od czasu równanie Schrödingera w trzech wymiarach

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi$$

Trójwymiarowe równanie Schrödingera

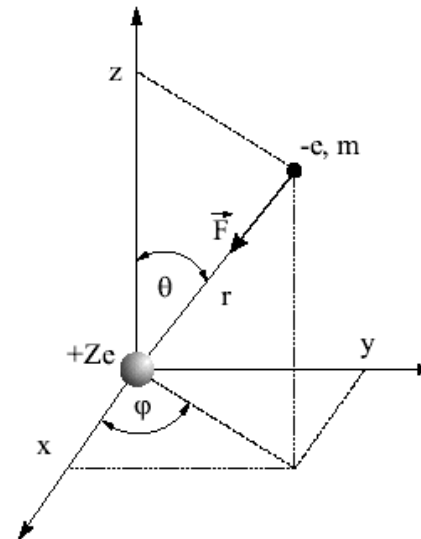
W przypadkach kiedy energia potencjalna zależy jedynie od odległości

$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ wygodnie jest zapisać równanie Schrödingera we współrzędnych kulistych

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

$$y = r \sin \theta \sin \Phi$$

$$z = r \cos \theta$$



$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \Phi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi$$

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru otrzymuje się wstawiając $U = -k_0 e^2 / r$; $\partial \Psi / \partial \theta = 0$ oraz $\partial \Psi / \partial \phi = 0$

Jako rozwiązanie przyjmujemy $\Psi = e^{-r/a}$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial (e^{-r/a})}{\partial r} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{k_0 e^2}{r} \right) e^{-r/a}$$

Po zróżniczkowaniu

$$\frac{1}{r^2} \left(\frac{r^2}{a^2} - \frac{2r}{a} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{k_0 e^2}{r} \right)$$

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru

$$\left[\frac{1}{a^2} \right] - \left(\frac{2}{a} \right) \frac{1}{r} = \left[-\frac{2mE}{\hbar^2} \right] - \left(\frac{2mk_0e^2}{\hbar^2} \right) \frac{1}{r}$$

Porównujemy współczynniki przy $1/r$ i wyrazy stałe

$$\left(\frac{2}{a} \right) = \left(\frac{2mk_0e^2}{\hbar^2} \right) \qquad \left[\frac{1}{a^2} \right] = \left[-\frac{2mE}{\hbar^2} \right]$$

$$a = \frac{\hbar^2}{k_0me^2} \qquad E = -k_0 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

$$E = -k_0^2 \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

$E = -13,6 \text{ eV}$ – jest to minimalna energia potrzebna do oderwania elektronu od atomu wodoru i jest nazywana **energiją wiązania**

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru

$$R = \frac{\hbar^2}{k_0 m e^2} = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad \text{promień atomu wodoru}$$

Funkcje falowe odpowiadające kolejnym poziomom energetycznym mają postać:

$$\Psi_2 = \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$$

$$\Psi_3 = \left(1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2r^2}{27a^2}\right) e^{-r/3a}$$

Spełniają one równanie Schrödingera pod warunkiem, że

$$E_2 = \frac{1}{4} E_1$$

$$E_3 = \frac{1}{9} E_1$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} k_0^2 \frac{m e^4}{2 \hbar^2}$$

poziomy energetyczne atomu wodoru
gdzie n , tzw. **główna liczba kwantowa**,
jest dowolną liczbą całkowitą

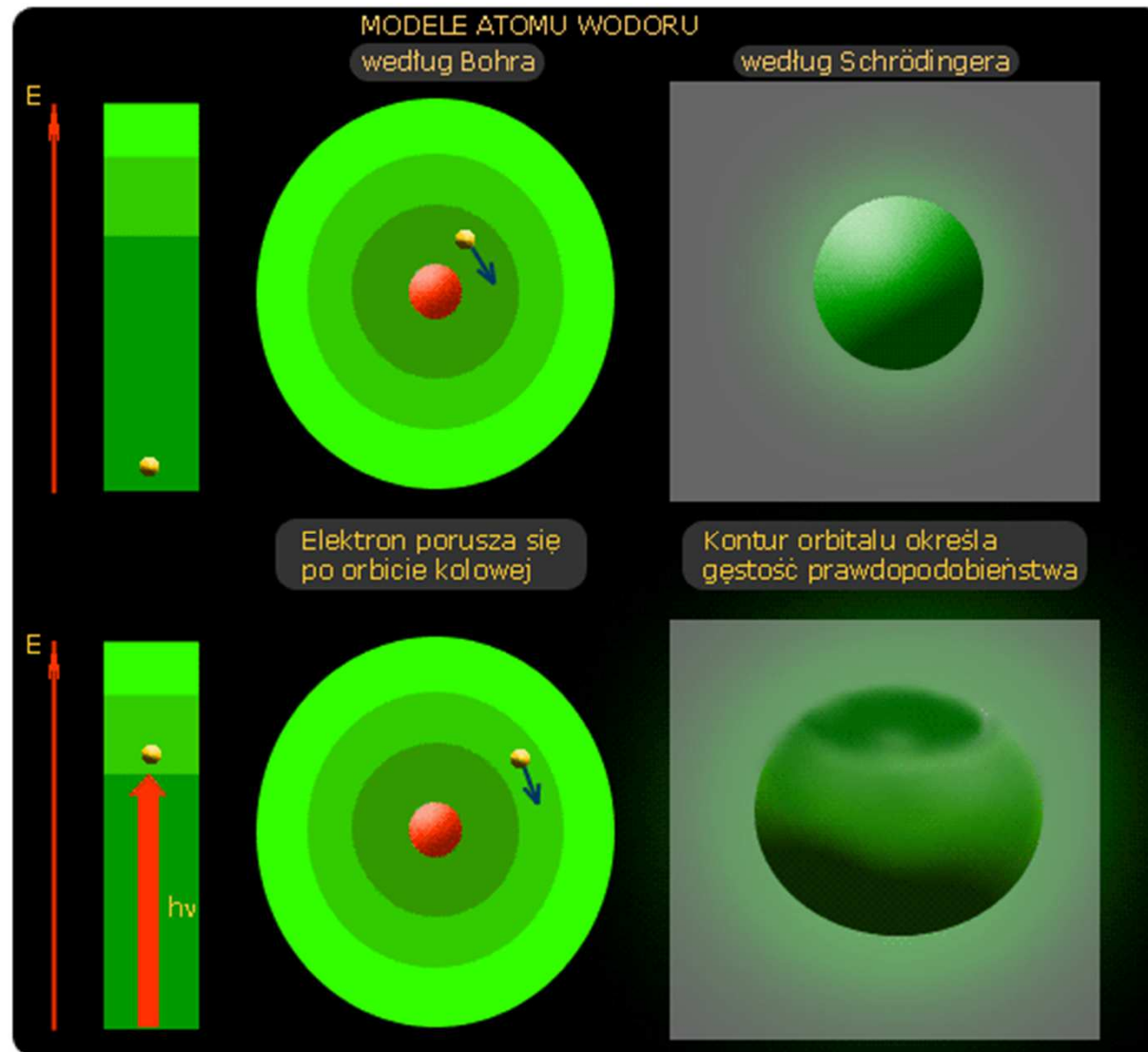
Porównanie Modelu Bohra i rozwiązania równania Schrödingera dla atomu wodoru

$$R_n = n^2 \frac{\hbar^2}{k_0 Z m e^2}$$

$$R = \frac{\hbar^2}{k_0 m e^2} = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

$$E_n = -k_0^2 \frac{Z^2 m e^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13,6 \cdot \left(\frac{Z^2}{n^2} \right) \text{ eV} \quad E_n = -\frac{1}{n^2} k_0^2 \frac{m e^4}{2\hbar^2}$$

Atom wodoru



Orbitalny moment pędu

Paczka fal o liczbie falowej k porusza się po okręgu o promieniu R

$$L_z = Rp = R(\hbar k) \quad \text{moment pędu paczki fal względem osi } z$$

$$s = R\Phi \quad s - \text{długość łuku}$$

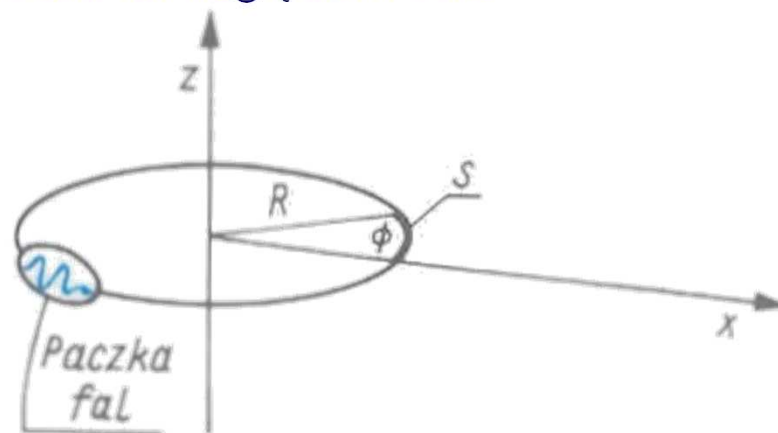
$$\Psi \approx e^{i(ks - \omega t)} = e^{i(kR\Phi - \omega t)}$$

Ponieważ $\Psi(\phi=0)$ oraz $\Psi(\phi=2\pi)$ odnoszą się do tego samego punktu przestrzeni więc

$$e^{ikR(0)} = e^{ikR(2\pi)} \rightarrow 1 = e^{i2\pi kR} \Leftrightarrow kR = m_l \quad \text{gdzie } m_l \text{ jest liczbą całkowitą}$$

$$\hbar kR = m_l \hbar$$

$$L_z = m_l \hbar$$



$$\exp(2\pi i k r) = \cos(2\pi k r) + i \sin(2\pi k r)$$

Orbitalny moment pędu

Liczba kwantowa l zwana *orbitalną liczbą kwantową* określa dozwolone wartości momentu pędu

$$L_l = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Liczba m , nazywana *magnetyczną liczbą kwantową*, określa z kolei dozwolone wartości rzutu wektora momentu pędu elektronu na kierunek osi z układu współrzędnych. Są one równe wielokrotności stałej Plancka

$$L_{z,lm} = m\hbar \quad m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$$

Orbitalny moment pędu

Moment pędu jest wielkością wektorową. W mechanice kwantowej możemy jednocześnie zmierzyć jego kwadrat długości L^2 i jedną ze składowych (rzut momentu pędu na wyróżnioną oś) L_z .

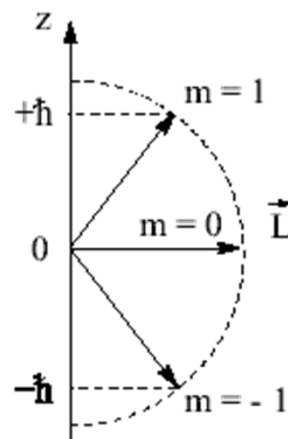
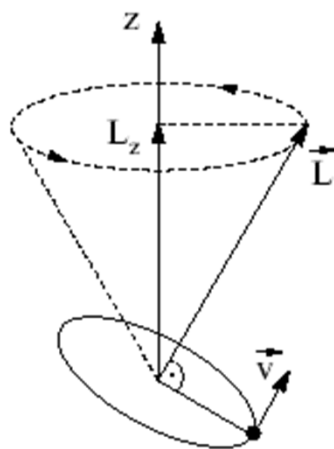
$$L^2 = l(l + 1)\hbar^2$$

$$L_z = m\hbar$$

Wektor orbitalnego momentu pędu jest opisywany przez podanie dwóch liczb kwantowych l i m

Orbitalny moment pędu

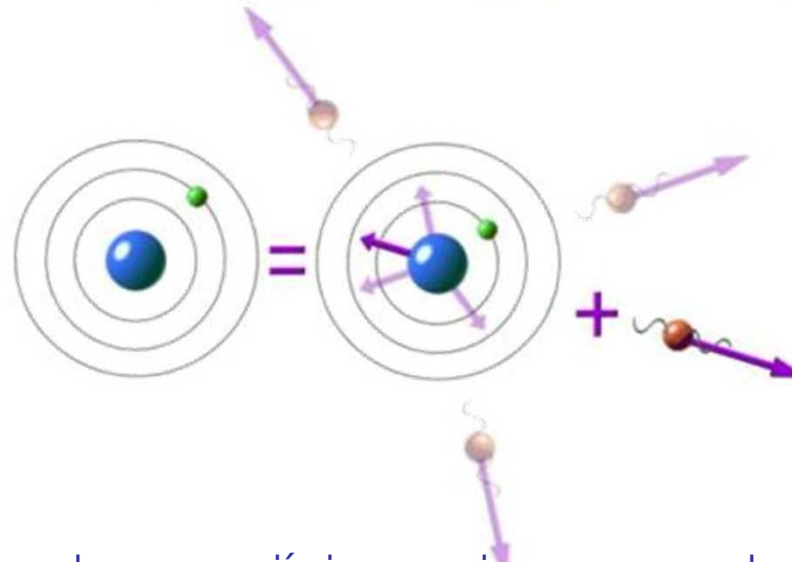
Wektor \mathbf{L}_l może być więc skierowany tylko pod określonymi kątami względem osi \mathbf{z} . Zjawisko to nazywamy **kwantowaniem przestrzennym** kierunku momentu pędu elektronu.



Ponieważ magnetyczna liczba kwantowa m może przybierać wszystkie całkowite wartości od $-l$ do l tj. $2l+1$ różnych wartości, wektor \mathbf{L}_l może być skierowany pod $2l+1$ kątami względem os z , czyli dla elektronu, dla którego $l=1$, możliwe są trzy ustawienia wektora \mathbf{L}_l .

Emisja fotonu

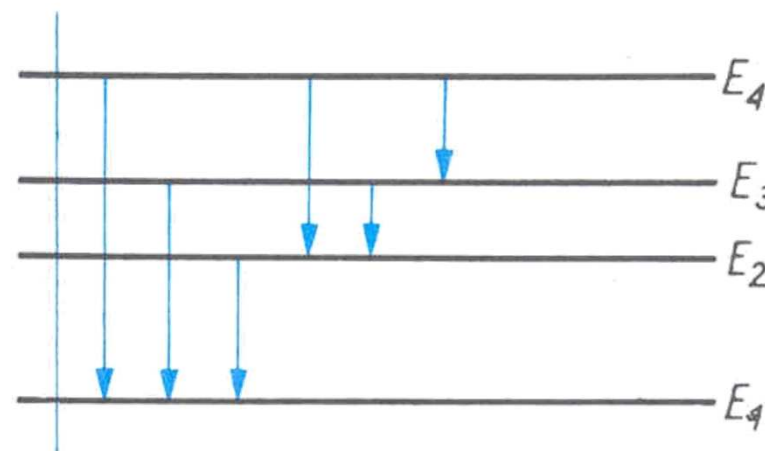
- w teorii kwantowej istnieje prawdopodobieństwo tego, że elektron, znajdujący się w stanie energetycznym wyższym niż podstawowy, przejdzie do stanu podstawowego jednocześnie emitując foton
- zjawisko emisji fotonu nazywane jest *emisją spontaniczną*



- foton emitowany podczas przejścia z poziomu energetycznego E_m na poziom E_n posiada energię $hf = E_m - E_n$
zaś częstotliwość takiego fotonu wynosi $f = (E_m - E_n)/h$

Emisja fotonu

W atomie posiadającym cztery różne poziomy energetyczne jest możliwe sześć różnych przejść z wyższych poziomów na niższe. Emitowane przez taki atom promieniowanie powinno zawierać sześć częstotliwości.



Normalnie atomy znajdują się w stanie podstawowym i nie emitują światła. Jeżeli jednak do atomu dostarczymy energii z zewnątrz np.: na skutek zderzenia z innym atomem lub na skutek absorpcji kwantu światła, to elektron ze stanu podstawowego przejdzie na wyższy poziom energetyczny – atom zostanie wzbudzony.

Widmo wodoru

Korzystając ze wzoru na poziomy energetyczne wodoru, można obliczyć całe widmo atomowe wodoru.

$$E_m = -k_0^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{m^2}$$

$$E_n = -k_0^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

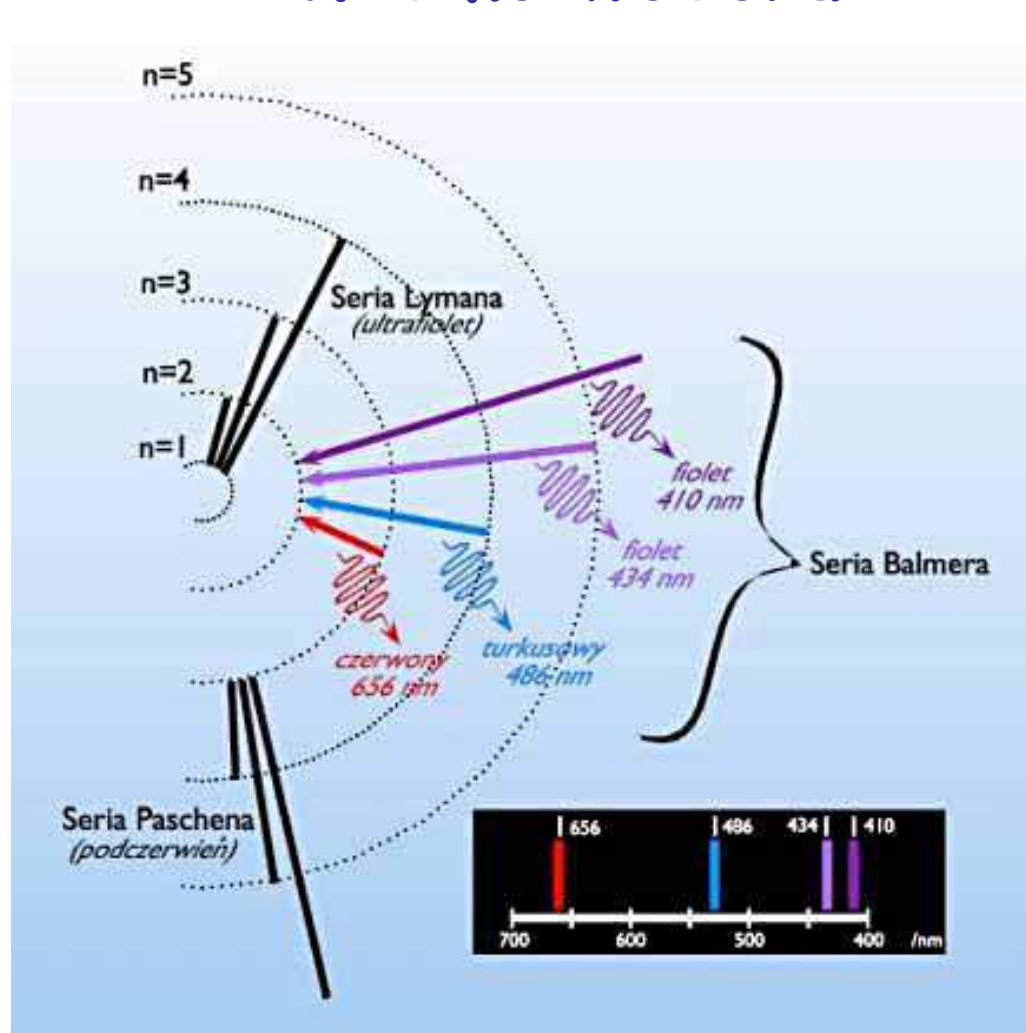
E_m oznacza poziomy wzbudzone

E_n oznacza poziomy niższe

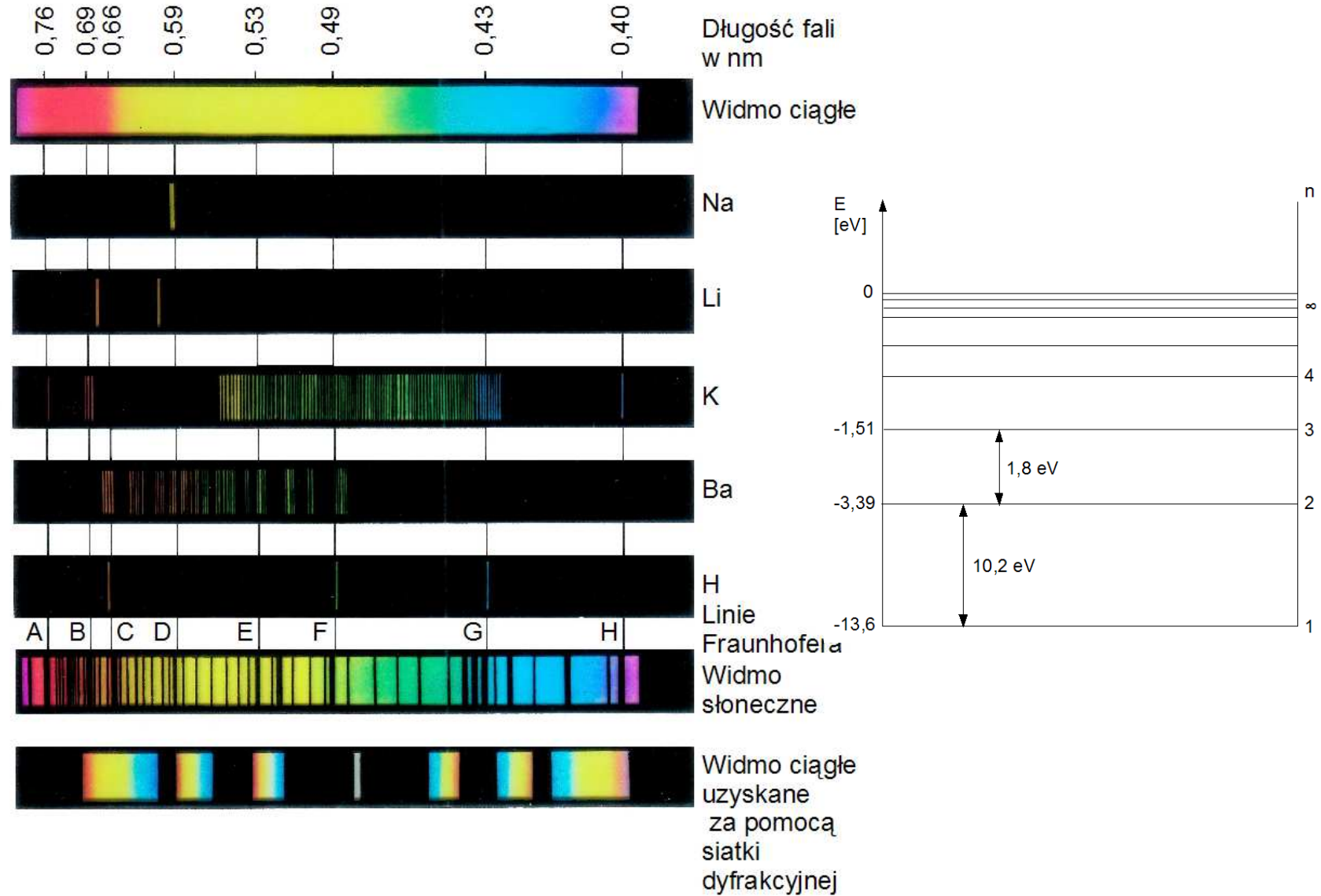
Częstotliwości linii widmowych będą równe:

$$f = k_0^2 \frac{me^4}{4\hbar^3 \pi} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Widmo wodoru

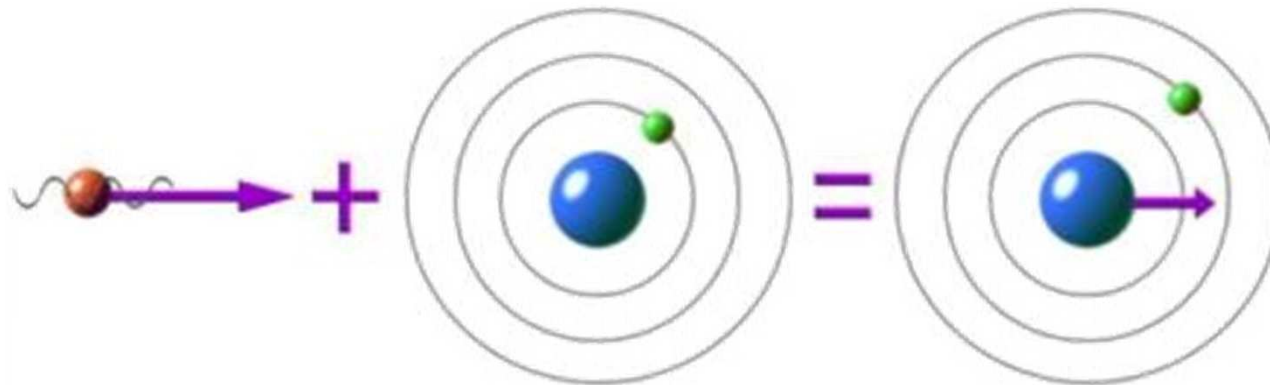


Atom wodoru



Absorpcja fotonu

- światło o widmie ciągłym przechodząc przez chłodny gaz powoduje wzbudzanie atomów gazu,
- pochłaniane są te fotony, których energia dokładnie odpowiada różnicy pomiędzy poziomami energetycznymi
- światło po przejściu przez gaz jest pozbawione fotonów o energiach $(E_2 - E_1)$, $(E_3 - E_1)$, $(E_4 - E_1)$ itd.



Proces wzbudzania atomów na wyższe poziomy energetyczne przez ich oświetlanie nosi nazwę ***pompowania optycznego***

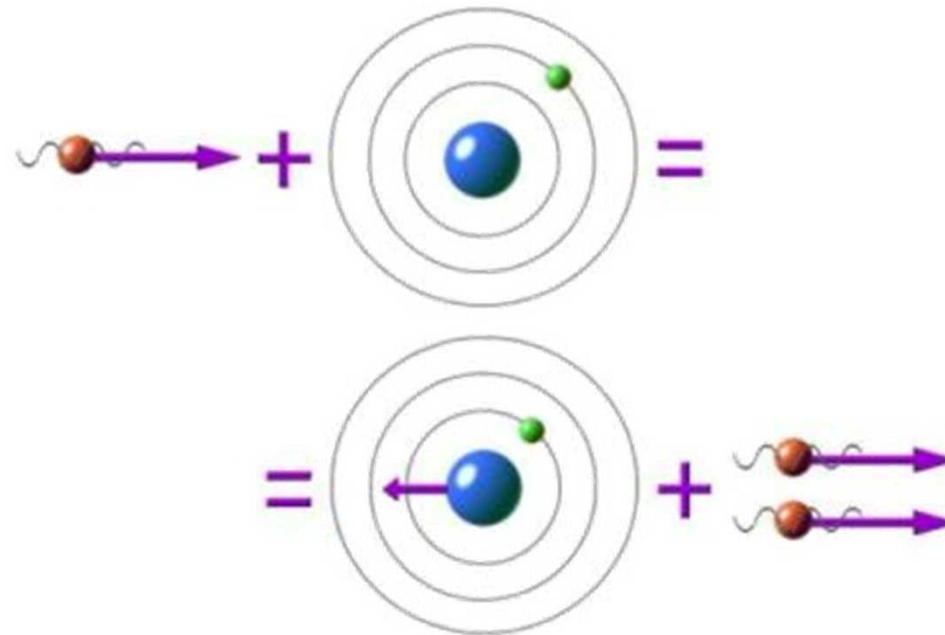
Emisja wymuszona

Zjawisko polegające na przyspieszeniu przejść atomowych wskutek oświetlenia wzbudzonych atomów „światłem” nazywa się **emisją wymuszoną**

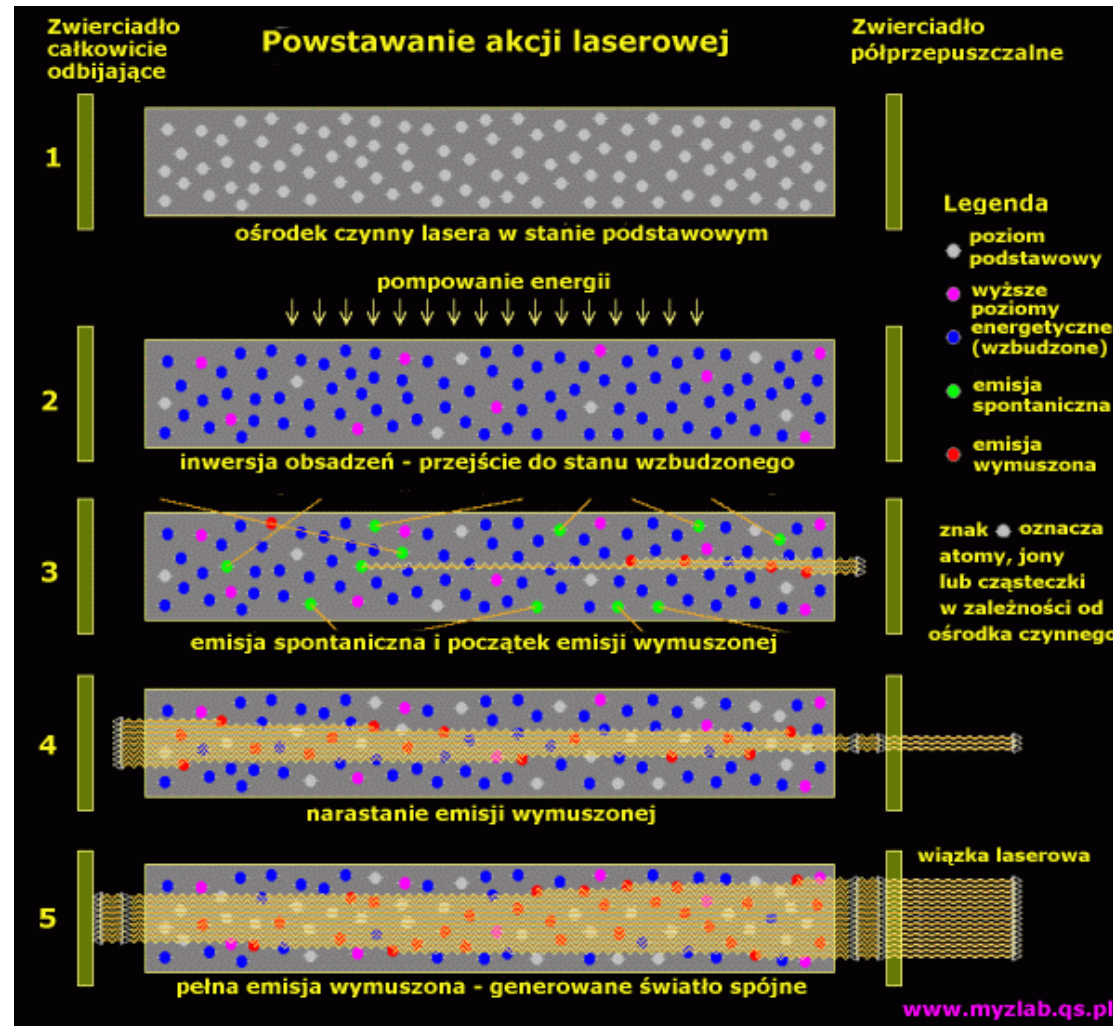
Foton wysyłany podczas emisji wymuszonej będzie miał taką samą fazę oraz taki sam kierunek jak foton wymuszający.

Emisja wymuszona

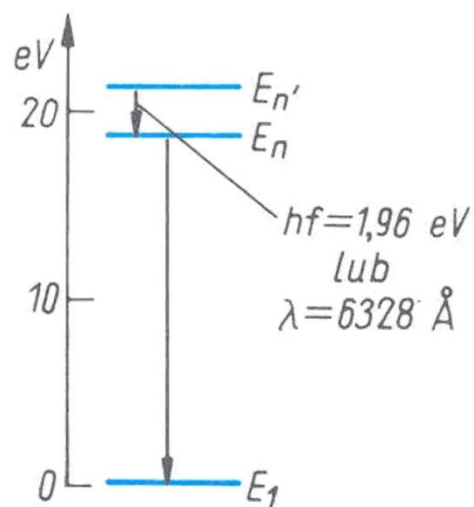
Jeśli atom znajduje się w stanie wzbudzonym E_m to może emitować foton o energii $(E_m - E_n)$. Umieszczając taki atom w polu promieniowania zewnętrznego, które zawiera fotony o energii równej $(E_m - E_n)$, zwiększymy prawdopodobieństwo wypromieniowania fotonu przez ten atom.



Laser



Laser



W laserze helowo-neonowym atomy neonu są wzbudzane na poziom $E_{n'}$ w trakcie zderzeń ze wzbudzonymi atomami helu. Przejście na poziom E_n zachodzi wskutek emisji wymuszonej. Następnie atomy neonu szybko przechodzą do stanu podstawowego oddając energię w zderzeniach ze ścianami

- ośrodkami czynnymi w laserach mogą być gazy, ciała stałe i ciecze
- zakres promieniowania emitowanego przez lasery jest bardzo szeroki, od podczerwieni, przez obszar widzialny aż do nadfioletu

Atom wodoru

