

Wykład 7.12.2016

# Budowa atomu 2

# O atomach...cd

Model Bohra – podsumowanie

Serie widmowe

O czym nie mówi model Bohra

Wzbudzenie, emisja, absorpcja

O liniach widmowych

Kwantowomechaniczny model atomu –

sformułowanie problemu

Studnia potencjału

# Model Bohra atomu wodoru - podsumowanie

# Zapamiętaj

Im **większa częstotliwość** promieniowania, tym **mniejsza długość** jego fali -długość fali jest odwrotnie proporcjonalna do częstotliwości promieniowania

Częstotliwość

$$f = c/\lambda$$

Energia fotonu jest proporcjonalna do częstotliwości promieniowania

$$E = hf = hc/\lambda$$

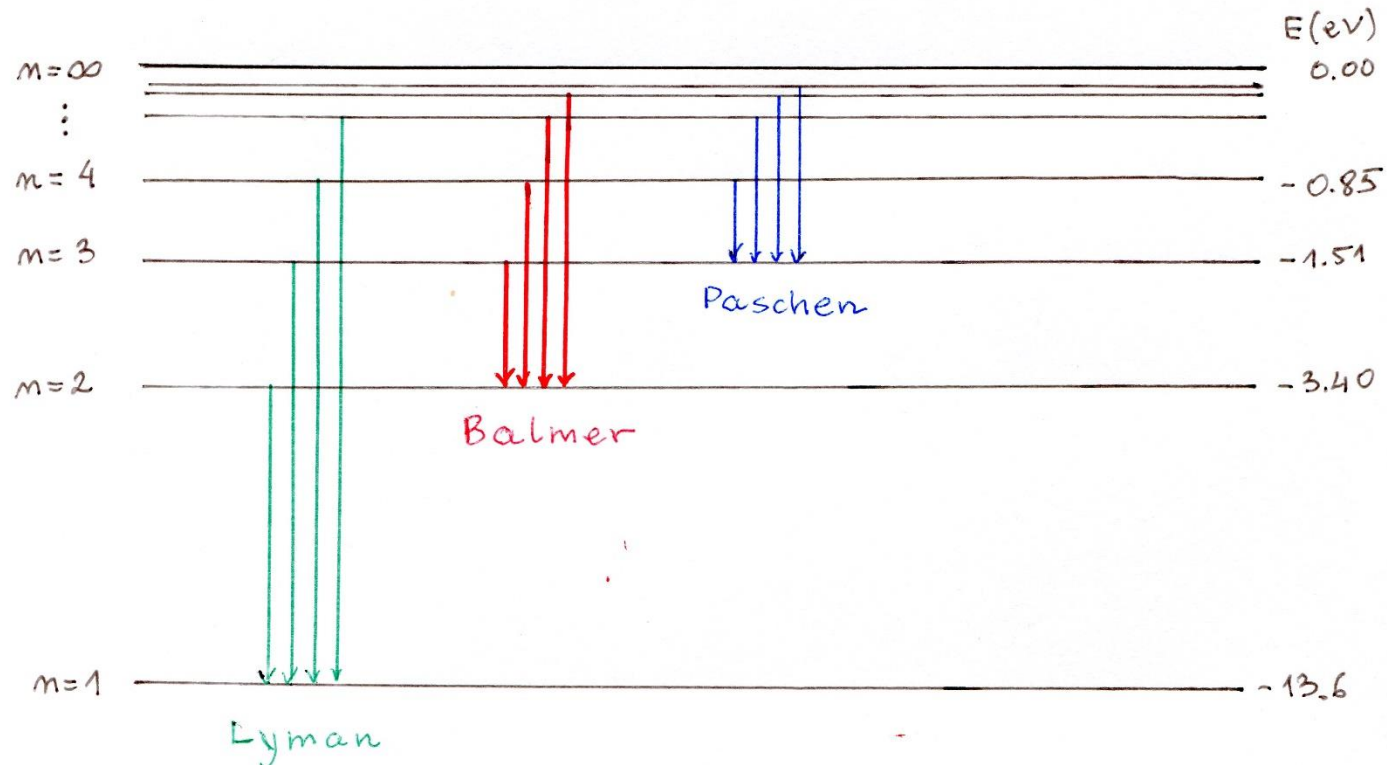
**Dłuższa fala ↔ mniejsza energia fotonu**

Częstotliwość  $f$  wysyłanego promieniowania jest związana z różnicą energii zaangażowanych stanów stacjonarnych według relacji:

$$hf = E_f - E_i$$

linia widmowa

# Poziomy energetyczne i linie widmowe wodoru



Każdą z serii widmowych charakteryzuje **wspólna** liczba kwantowa poziomu, na który następują przeskoki elektronu z różnych innych poziomów o wyższych energiach.

# Serie widmowe i formuła Rydberga

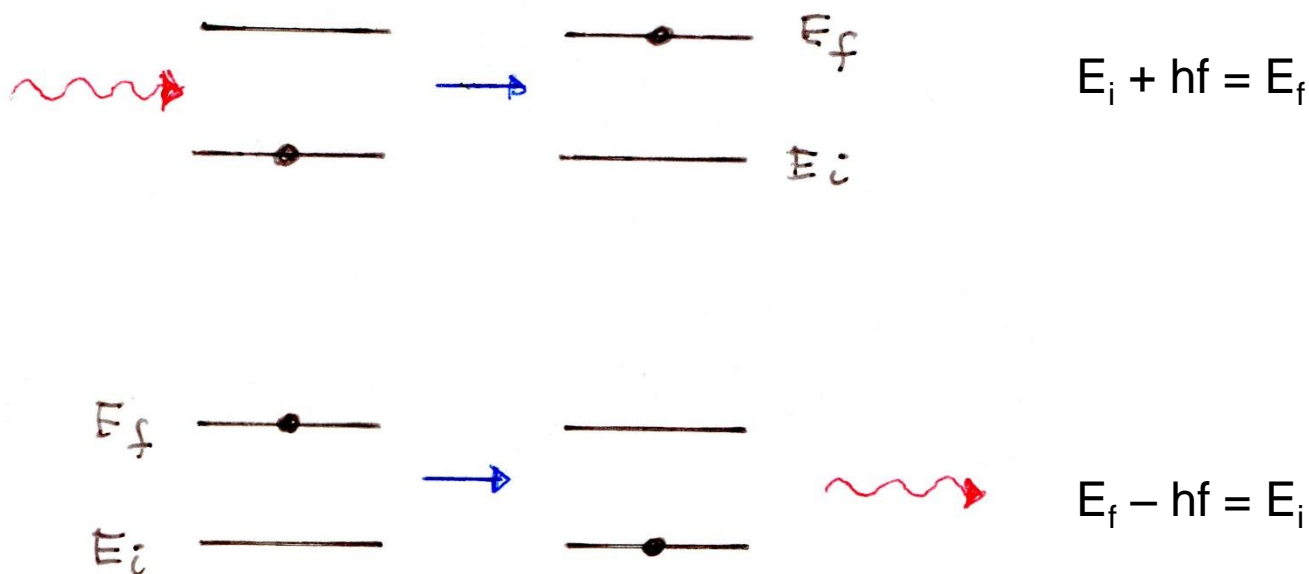
Długości fal w kolejnych **seriach widmowych**

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$R_H = 1.097 \times 10^{-7} m^{-1}$       stała Rydberga

Seria Lymana	$n_f = 1$	$n_i = 2, 3, 4, \dots$
Seria Balmera	$n_f = 2$	$n_i = 3, 4, 5, \dots$
Seria Paschena	$n_f = 3$	$n_i = 4, 5, 6, \dots$

# Wzbudzenia, emisja, absorpcja



Atom pochłania/emituje foton o energii  $hf$ , czemu towarzyszy przeskok elektronu między poziomami energetycznymi w taki sposób, że całkowita energia układu „atom + foton” nie zmienia się.

# Problemy i pytania – o czym model Bohra nie mówi

O czym model Bohra nie mówi?

- atom z **więcej niż jednym elektronem** – oddziaływanie każdego z elektronów z jądrem i między elektronami,
- **szerokość i kształt linii widmowej** – linia widmowa nie ma jednej, ściśle określonej długości fali (częstotliwości),
- **rozszczenie linii widmowych** – oglądane z większą zdolnością rozdzielczą linie widmowe nie są „pojedyncze”

.....



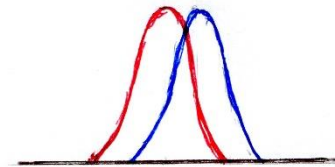
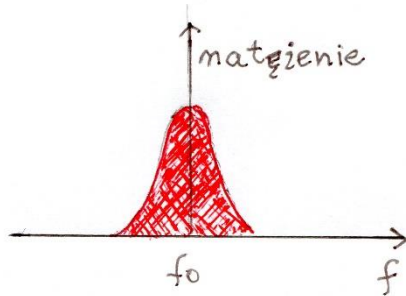
# Linie widmowe

Kształt linii widmowej i zdolność rozdzielcza

Rozszczepienie linii

# Linia widmowa i zdolność rozdzielcza

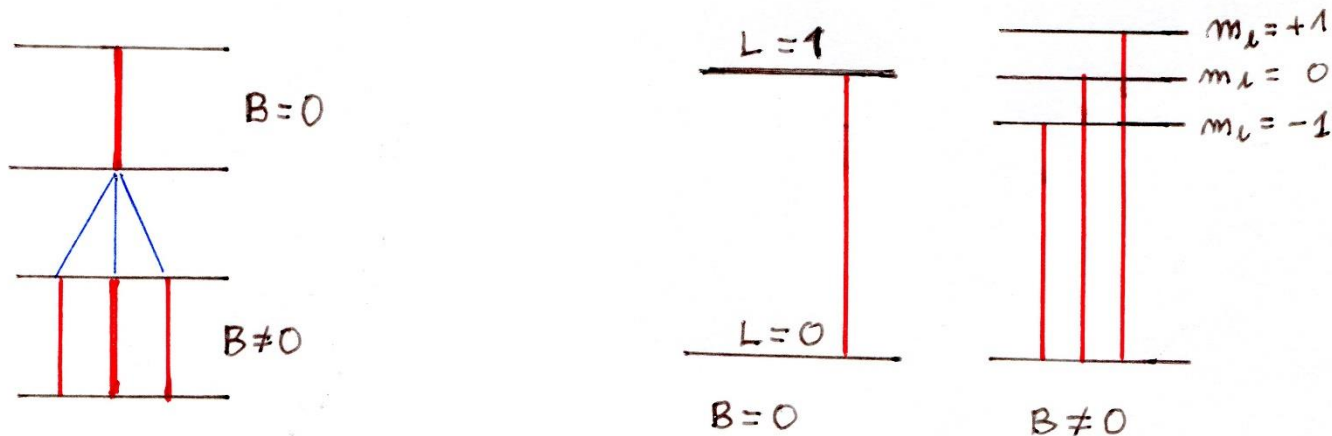
Linia widmowa nie jest „nieskończenie wąska” – jej natężenie (jasność) jest największe w centrum, któremu odpowiada częstość  $f_0 = (E_2 - E_1)/h$ . Natężenie to maleje w kierunku mniejszych i większych częstości. Każdą linię widmową charakteryzuje jej **szerokość** mierzona w połowie jej wysokości, czyli dla natężenia równemu połowie natężenia maksymalnego w centrum linii.i.



Dwie linie o niewiele różniących się częstościami centralnych mogą na siebie nachodzić – są one słabo rozdzielone. Każdy przyrząd służący do pomiaru widma – **spektrometr** – ma określoną **zdolność rozdzielczą**, tym lepszą, im bliżej leżące linie potrafi rozóżnić.

# Rozszczepienie linii widmowych – rozszczepienie poziomów energetycznych

Pojedyncza linia widmowa w zmienionych warunkach może **rozszczerzyć się** na kilka linii. Typową realizacją takiego zachowania jest **efekt Zeemana**: rozszczepienie linii widmowej po umieszczeniu promieniującego atomu w polu magnetycznym. Przyczyną takiego rozszczepienia linii jest rozszczepienie poziomów energetycznych atomu, między którymi zachodzi przejście.



Symbol  $B$  oznacza indukcję pola magnetycznego: im większa wartość  $B$  tym silniejsze pole magnetyczne. Rys. z lewej: rozszczepienie linii widmowej, rys. z prawej: wyjaśniające rozszczepienie linii rozszczepienie poziomu górnego. (Uwaga: objaśnienie symboli  $L$  i  $m_l$  w dalszej części)

# Kwantowomechaniczny model atomu wodoru

Równanie Schrödingera i jego konsekwencje

# Podstawowe idee modelu atomu Bohra- przypomnienie

- postulowany ad hoc warunek kwantowania dotyczył momentu pędu elektronu
- kwantowanie orbit  $\leftrightarrow$  energii
- poziomy energetyczne  $E_n = -13.6/n^2$  eV  
n=1, 2, 3, ... liczby kwantowe
- poziom (stan) podstawowy n = 1
- poziomy (stany) wzbudzone n = 2, 3, 4, ...
- energia jonizacji  $n \rightarrow \infty$
- promieniowanie związane z „przeskokami” elektronu między orbitami  $\leftrightarrow$  przejściami między stanami elektronowymi

Co z tego przetrwało w kwantowomechanicznym modelu atomu?

# Równanie Schrödingera – równanie własne dla hamiltonianu H

$$H\Psi = E \Psi$$

$$H = T + V(x,y,z) \quad , \quad \Psi = \Psi(x,y,z)$$

H to **hamiltonian** opisujący **całkowitą energię** elektronu (kinetyczną T + potencjalną U)

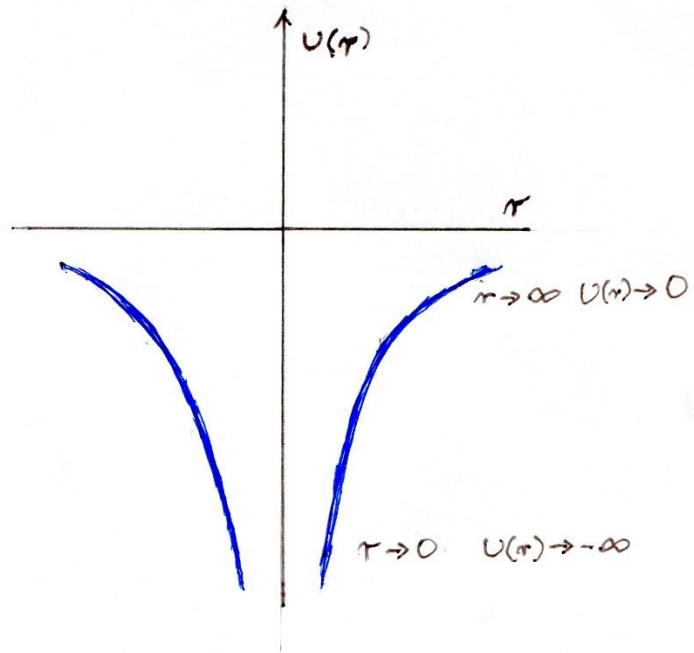
$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mv \frac{mv}{m} = \frac{1}{2m}(mv)^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

E to **wartości własne** - możliwe (dozwolone) **wartości energii** elektronu w atomie,

$\Psi$  to **funkcje własne** opisujące **stany** (dozwolone) elektronu w atomie.

# Energia potencjalna elektronu w atomie wodoru



$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

# Zanim szczegółowo o atomie... interludium o studni potencjału

Co daje rozwiązanie równania Schrödingera w  
przypadku studni potencjału

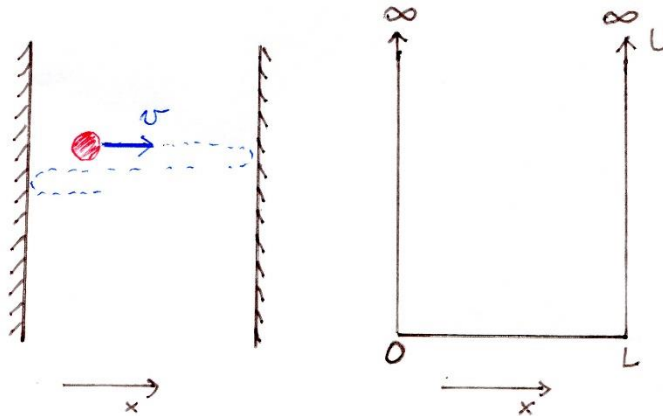
Efekt tunelowy

Zastosowanie: skaningowy mikroskop tunelowy



# „Nieskończona studnia potencjału”

## Studnia energii potencjalnej o nieskończonej głębokości



Rysunek po lewej: klasyczny prototyp sytuacji – ruch cząstki ograniczony ścianami, od których cząstka odbija się nie opuszczając przestrzeni między nimi.

Rysunek po prawej: schematyczne przedstawienie „nieskończenie głębokiej jednowymiarowej studni potencjału”. Cząstka kwantowa może poruszać się wzdłuż osi  $x$ , w obszarze  $[0,L]$  jej energia potencjalna jest równa zero, na brzegach tego odcinka energia potencjalna ma wartość nieskończoną.

# „Nieskończona studnia potencjału”

## Studnia energii potencjalnej o nieskończonej głębokości

Rozwiązania równania Schrödingera

$$H\Psi(x) = E \Psi(x)$$

dają funkcje falowe

$$\Psi_n = \Psi_n(x)$$

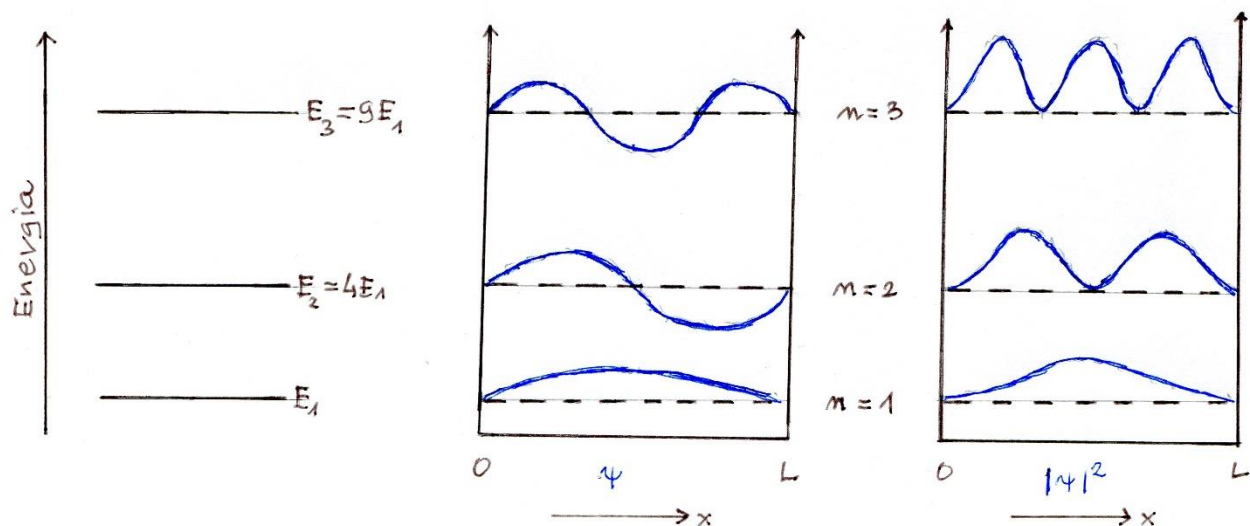
oraz energie własne cząstki w studni

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2, n = 1, 2, 3, \dots$$

Energia cząstki w studni jest skwantowana i zależy od liczby kwantowej  $n$  –  
**poziomy energetyczne**

Zauważ, że najmniejsza wartość energii (poziom podstawowy) jest różna od zera.

# Poziomy energetyczne, funkcje falowe i prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w studni



Poziomy energetyczne nie są równoodległe: ze wzrostem  $n$  oddalają się od siebie.

Funkcje falowe nie wykraczają poza brzegi studni → cząstka nie opuszcza obszaru wnętrza studni.

W studni są miejsca, w których prawdopodobieństwo znalezienia cząstki jest równe zero.

# Przykład liczbowy - porównaj

1. Elektron znajduje się w studni o ściankach odległych o 0.200 nm. Jego energia w stanie podstawowym  $n = 1$  jest równa

$$E_1 = 1.51 \times 10^{-18} \text{ J}$$

2. Ciało o masie 1.00 mg porusza się między dwoma ściankami odległymi o 1.00 cm.

Zakładając, że rozważamy ten układ jako nieskończenie głęboką studnię energii potencjalnej, możemy obliczyć energię cząstki w stanie z  $n = 1$ :

$$E_1 = 5.49 \times 10^{-58} \text{ J,}$$

czemu odpowiadałaby prędkość cząstki równa  $v = 3.31 \times 10^{-26} \text{ m/s}$ . Jest to wielkość niemierzalna – obiekt jest praktycznie nieruchomy, a takiego właśnie zachowania oczekujemy od obiektu makroskopowego w „stanie podstawowym”.

# Porównaj schematy poziomów energetycznych w dwóch studniach

$$E_n \propto -\frac{1}{n^2}$$

W atomie wodoru (elektron w „studni potencjału” kulombowskiego) energie własne mają wartości własne ujemne i ze wzrostem liczby kwantowej leżą coraz bliżej siebie

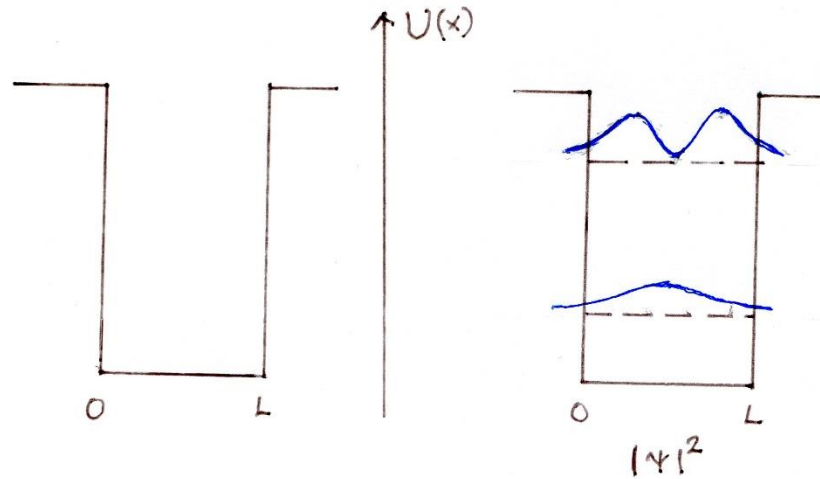
$$E_n \propto n^2$$

W „nieskończenie głębokiej prostokątnej studni” energie własne są dodatnie i ze wzrostem liczby kwantowej  $n$  oddalają się od siebie

W obu przypadkach energia jest skwantowana, choć szczegółowe właściwości poziomów energetycznych są inne. Przeskokom elektronu między poziomami towarzyszy emisja/absorpcja promieniowania.

# „Skończona studnia potencjału”

Cząstka może poruszać się wzdłuż osi  $x$ , na odcinku  $[0, L]$  jej energia potencjalna jest równa zero, a na brzegach jej energia potencjalna  $U$  ma wartość skończoną

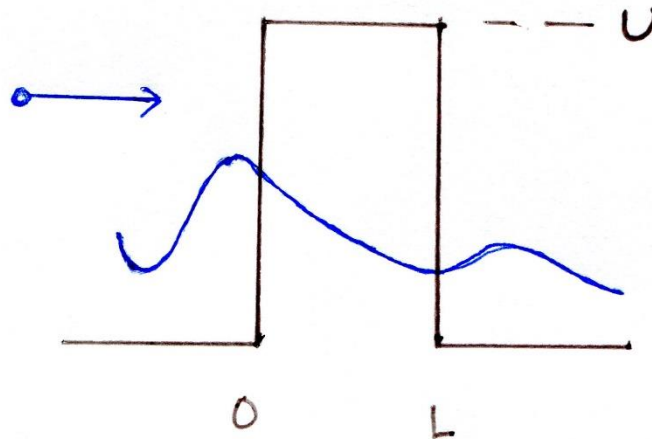


Inaczej niż w przypadku studni nieskończonej:

Funkcje falowe „wylewają się” poza brzegi studni  $\rightarrow$  różne od zera prawdopodobieństwo znalezienia cząstki poza studnią  $\leftrightarrow$

**tunelowanie**

# Bariera potencjału i efekt tunelowy

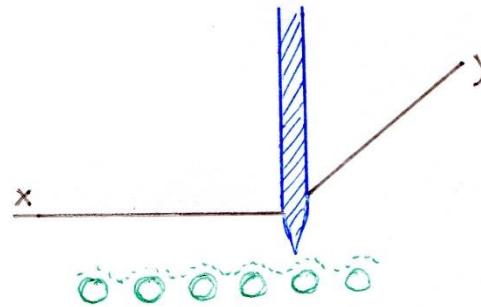


Funkcja falowa cząstki nadlatującej ku barierze z energią kinetyczną mniejszą niż wysokość bariery może „przeniknąć” przez barierę → prawdopodobieństwo znalezienia cząstki po przeciwnej stronie bariery jest różne od zera ↔ **zjawisko tunelowe**.

W przypadku klasycznym takie przeniknięcie cząstki przez barierę nie jest możliwe – cząstka odbije się od bariery.

# Skaningowy mikroskop tunelowy (STM)

Nad powierzchnią (na zielono zaznaczone atomy powierzchni) przesuwa się ostrze piezoelektryczne.



Przestrzeń między ostrzem a powierzchnią stanowi barierę energii potencjalnej, przez którą elektrony z próbki mogą tunelować dając wkład do prądu tunelowego tworząc obraz wideo odwzorowujący położenie ostrza w trakcie jego przesuwania ponad próbką. W ten sposób można uzyskać precyzyjny obraz szczegółów powierzchni z rozdzielczością pionową  $\sim 0.001$  nm, znacznie lepszą niż rozmiar atomu.



## Pytania do wykładu 2

1. Co nazywamy poziomem energetycznym atomu w modelu Bohra?
2. Elektron przeskakuje z poziomu energetycznego o energii  $E_2$  na poziom energetyczny o energii  $E_1$ . Ile wynosi częstotliwość promieniowania emitowanego przez atom wskutek tego przejścia elektronowego?
3. Promieniowanie emitowane podczas przejść elektronowych pomiędzy poziomami energetycznymi atomu wodoru układa się w linii widmowe tworzące tzw. serie widmowe (Lymana, Balmera, Paschena...). Co łączy wszystkie linie jednej serii widmowej?
4. Jaki obiekt nazywamy studnią potencjału? Czy energia cząstki w studni potencjału jest skwantowana?
5. Na czym polega zjawisko tunelowe?

Koniec wykładu 2