

Wykład 21. 12 .2016

Atom o wielu elektronach

Laser

Rezonans magnetyczny

Jeszcze o atomach

Przypomnienie:

liczby kwantowe elektronu w atomie wodoru,

zakaz Pauliego,

powłoki, podpowłoki, orbitale,

Atomy wieloelektronowe

Liczby kwantowe

Rozwiązanie równania S. prowadzi do pojawienia się
3 liczb kwantowych:

$$H\Psi_{nlm} = E_n \Psi_{nlm}$$

Możliwe (dozwolone) wartości wszystkich liczb kwantowych:

- $n = 1, 2, 3, \dots$ kwantowanie energii
- $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ kwantowanie (wartości) m. pędu
- $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ kwantowanie składowej m. pędu

Energia zależy tylko od jednej (głównej) liczby kwantowej n

Liczby kwantowe elektronu w atomie wodoru i zakaz Pauliego

Do trzech liczb kwantowych n , l , m_l charakteryzujących stan elektronu w atomie wodoru należy dodać czwartą liczbę kwantową m_s związaną z rzutem spinowego momentu pędu na oś z . Te cztery liczby kwantowe charakteryzują **STAN KWANTOWY** elektronu:

$$n, l, m_l, m_s$$

Uwaga: Nie trzeba mówić o liczbie kwantowej spinu s (analogia do liczby kwantowej orbitalnego momentu pędu l), bo jej wartość jest zawsze równa $\frac{1}{2}$ natomiast możliwe są tu dwie wartości rzutu spinu: $m_s = +\frac{1}{2}$ oraz $m_s = -\frac{1}{2}$

Funkcja falowa (stan elektronowy) zależy od wszystkich liczb kwantowych, ale energia elektronu zależy tylko od jednej (głównej) liczby kwantowej n - **DEGENERACJA**

Degeneracja – jednej wartości energii (wartości własnej hamiltonianu) odpowiada więcej niż jedna funkcja falowa

$n = 1$	$l = 0$	$m_l = 0$	liczba stanów: 1
$n = 2$	$l = 0$	$m_l = 0$	liczba stanów: $1+3 = 4$
	$l = 1$	$m_l = -1, 0, 1$	
$n = 3$	$l = 0$	$m_l = 0$	liczba stanów $1+3+5 = 9$
	$l = 1$	$m_l = -1, 0, 1$	
	$l = 2$	$m_l = -2, -1, 0, 1, 2$	

Wartości energii zależą **jedynie** od liczby kwantowej n .

Każdej z nich (czyli jednej wartości n) odpowiada wiele funkcji falowych – **stanów** -numerowanych liczbami kwantowymi l (a więc odpowiadających stanom o różnych wartościach momentu pędu) oraz m_l (a więc o różnych wartościach składowej z momentu pędu). **Krotność degeneracji** wzrasta z wartością n .

Orbital elektronowy to stan elektronu charakteryzowany liczbami

n, l, m_l

Zakaz (reguła) Pauliego

Żadne dwa elektrony w tym samym atomie nie mogą posiadać identycznego zbioru wszystkich czterech liczb kwantowych, tzn. nie mogą być w tym samym stanie kwantowym.

Fermiony (cząstki o spinie połówkowym), np. elektron, proton, neutron

Bozony (cząstki o spinie całkowitym), np. foton, jądro deuteru (1 proton+1 neutron), atom Na^{23} , **bozon Higgsa** (przypomnienie: kondensat Bosego-Einsteina)

Przykład: dozwolone stany elektronowe dla $n=1, 2, 3$

$n = 1$	$l = 0$	$m_l = 0$	liczba stanów: 1
$n = 2$	$l = 0$	$m_l = 0$	liczba stanów: $1+3 = 4$
	$l = 1$	$m_l = -1, 0, 1$	
$n = 3$	$l = 0$	$m_l = 0$	liczba stanów $1+3+5 = 9$
	$l = 1$	$m_l = -1, 0, 1$	
	$l = 2$	$m_l = -2, -1, 0, 1, 2$	

Dla każdego orbitalu opisanego trójką liczb (n, l, m_l) możliwe są **dwa stany spinowe** odpowiadające

$m_s = +\frac{1}{2}$ („spin w górę \uparrow ”) oraz $m_s = -\frac{1}{2}$ („spin w dół \downarrow ”)

$n = 1, 2, 3, \dots$	kwantowanie energii
$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$	kwantowanie (wartości) momentu pędu
$m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$	kwantowanie składowej momentu pędu
$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	kwantowanie spinu

Obsadzanie kolejnych stanów - przykłady

Atom H ($Z=1$, 1 elektron):

W stanie podstawowym możliwy jeden z dwóch stanów

$$1\ 0\ 0\ +1/2 \quad \text{lub} \quad 1\ 0\ 0\ -1/2$$

Tę konfigurację elektronową zapisujemy jako $1s^1$

Atom He ($Z=2$, 2 elektrony):

W stanie podstawowym ich liczby kwantowe to:

$$1\ 0\ 0\ +1/2 \quad \text{oraz} \quad 1\ 0\ 0\ -1/2$$

Mówimy, że powłoka K ($n=1$) jest **zapełniona** i konfiguracja elektronowa jest $1s^2$

Obsadzanie kolejnych stanów - przykłady

Atom Li ($Z=3$, 3 elektrony):

W stanie podstawowym dwa elektrony są na podpowłoce 1s, a trzeci na podpowłoce 2s → konfiguracja $1s^2 2s^1$

Atom Be ($Z=4$, 4 elektrony):

W stanie podstawowym dwa elektrony są na podpowłoce 1s, następne dwa na podpowłoce 2s → konfiguracja $1s^2 2s^2$

Atom C ($Z=6$, 6 elektronów)

W stanie podstawowym dwa elektrony są na podpowłoce $1s^2$, kolejne dwa na podpowłoce 2s, a kolejne dwa na podpowłoce 2p, ale na różnych orbitalach (tzn. o różnych m_l) z niesparowanymi spinami → konfiguracja $1s^2 2s^2 2p^2$

Obsadzanie kolejnych stanów - przykłady

Atom Ne ($Z=10$, 10 elektronów): Gaz szlachetny

Konfiguracja $1s^2 2s^2 2p^6$

Mówimy, że powłoka L ($n=2$) jest **zapełniona**

Jeszcze nie mało komplikacji...

Atom w polu magnetycznym

Oddziaływanie momentów magnetycznych i dodawanie momentów pędu

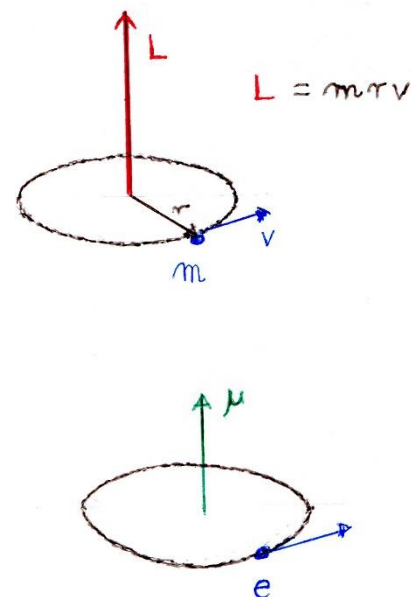
Atom wieloelektronowy

Atom w zewnętrznym polu magnetycznym

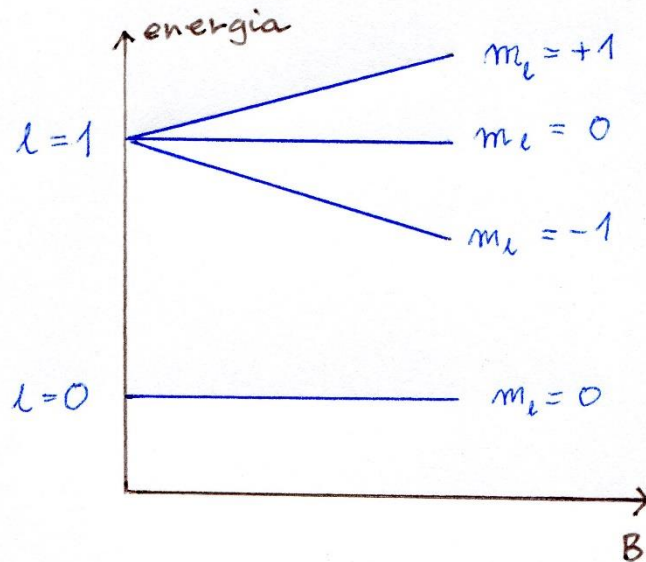
Poruszający się wokół jądra elektron ma **moment magnetyczny** μ proporcjonalny do orbitalnego momentu pędu L .

Ten moment magnetyczny oddziałuje z zewnętrznym polem magnetycznym, co prowadzi do rozszczepienia zdegenerowanych poziomów energetycznych (**efekt Zeemana**): $E_l = gBm_l$

Zauważ, że jeżeli $l = 0$ (moment pędu równy zero), to również moment magnetyczny jest równy zero. Oznacza to, że poziom charakteryzowany liczbą orbitalnego momentu pędu $l=0$ nie rozszczepia się w polu magnetycznym.



Przykład: rozszczepienie poziomów energetycznych (usunięcie degeneracji) dla stanów z $l = 1$ wzbudzonego stanu atomu w polu magnetycznym – efekt Zeemana



Dodatkowa energia każdego z tak powstałych poziomów jest proporcjonalna do indukcji pola magnetycznego B (czyli tego, jak silne jest pole) oraz kwantowej liczby m_l :

$$E_l = gBm_l$$

Stan z $l=0$ nie rozszczepia się w polu magnetycznym, bo dla niego jest możliwa tylko jedna wartość liczby kwantowej $m_l = 0$

(g w powyższym wzorze oznacza stałą).

Ale...

Spin $s = \frac{1}{2}$ jest też **momentem pędu** →
z nim jest też związany **moment magnetyczny** →

ten spinowy moment magnetyczny też oddziałuje z
zewnątrznym polem magnetycznym.

(co prowadzi do dwóch poziomów energetycznych
odpowiadających $m_s = \pm \frac{1}{2}$).

.

Oraz...

Wokół momentu magnetycznego istnieje pole magnetyczne.

Dwa momenty magnetyczne będą więc oddziaływać ze sobą. Możliwe jest więc oddziaływanie momentu magnetycznego związanego z orbitalnym momentem pędu z momentem magnetycznym związanym ze spinem – **sprzężenie spin-orbita**.

W efekcie oba momenty pędu dodają się tworząc **całkowity moment pędu** elektronu charakteryzowany nową liczbą kwantową oznaczaną literą **j** i nowe stany kwantowe i poziomy energetyczne.

Skutkiem tego sprzężenia jest częściowe **usunięcie degeneracji** – **struktura subtelna** poziomów energetycznych

Jądro atomowe też może mieć moment magnetyczny, który oddziałuje z momentami elektronów – **struktura nadsubtelna** poziomów energetycznych

Efekt Zeemana struktury subtelnej

Z całkowitym momentem pędu j jest też związany **moment magnetyczny** →

w zewnętrznym polu magnetycznym poziomy struktury subtelnej też się **rozszerzają** .

Co więcej: atom wieloelektronowy

W atomie wieloelektronowym obecne są **inne oddziaływania**, które opis kwantowomechaniczny musi uwzględniać, co prowadzi do istotnej rozbudowy struktury poziomów energetycznych:

Wszystkie elektrony oddziałują elektrycznie z jądrem i wzajemnie ze sobą.

Oddziałują ze sobą momenty magnetyczne **różnych elektronów**, co prowadzi do całkowitego spinu, całkowitego momentu orbitalnego i całego momentu pędu (**dodawanie momentów pędu**). Prowadzi to do nowych liczb kwantowych **L, S, J** i znacznego rozbudowania schematu struktury elektronowej w rzeczywistych atomach! Możliwa jest dalsza komplikacja wynikająca z oddziaływaniem momentów magnetycznych elektronów z momentem jądra (jeszcze jedna liczba kwantowa **F**).

Rozszczepienie poziomów energetycznych w polu magnetycznym

Zapamiętaj: poziom energetyczny każdego atomu charakteryzowany różnym od zera momentem pędu (**orbitalnym** bądź **spinowym** bądź **całkowitym**) w zewnętrznym polu magnetycznym rozszczepia się na poziomy o różnych energiach charakteryzowane odpowiednią magnetyczną liczbą kwantową **m_l** , bądź **m_s** , bądź **m_j** , bądź **m_f**

Podsumowanie

Czego dowiedzieliśmy się o budowie atomu

O czym powinniśmy pamiętać - podstawy

Energie elektronów w atomie są **skwantowane**

Stan elektronu (jego funkcja falowa) zależy od **czterech liczb kwantowych** opisujących: energię, orbitalny moment pędu, rzut orbitalnego momentu pędu na wybrany kierunek, spin (czyli własny moment pędu elektronu) - **degeneracja**

W danym atomie dwa elektrony nie mogą mieć identycznego zestawu wszystkich czterech liczb kwantowych (**zakaz Pauliego**)

O czym powinniśmy pamiętać - podstawy

Z momentem pędu związany jest **moment magnetyczny**, który oddziałuje z polem magnetycznym. To prowadzi do modyfikacji energii elektronu – rozszczepienia poziomów energetycznych. Również w zewnętrznym polu elektrycznym ma miejsce modyfikacja poziomów atomowych.

Momenty magnetyczne oddziałują ze sobą – mówimy o **sprzężeniach momentów pędu**. To też prowadzi do rozszczepienia poziomów energetycznych.

O promieniowaniu i laserach

Promieniowanie ciała doskonale czarnego

Kwantowy obraz promieniowania: absorpcja, emisja spontaniczna, emisja wymuszona

Reguły wyboru

Inwersja obsadzeń i akcja laserowa

Rezonans magnetyczny

Która gwiazda jest gorętsza? (żółta czy niebieska)

Oglądając rozgwieżdżone niebo można zauważyć, że niektóre gwiazdy są bardziej żółte, a inne bardziej niebieskie. Który z kolorów: żółty czy niebieski wskazuje gwiazdę o wyższej temperaturze? Odpowiedź daje prawo wiążące długość fali promieniowania o największej mocy emitowanego przez ciało doskonale czarne z temperaturą tego ciała:

$$\lambda_{\max} T = \text{const}$$

prawo przesunięć Wiena

T rośnie λ_{\max} maleje

Kwantowy obraz promieniowania

Absorpcja i emisja spontaniczna i wymuszona

Akcja laserowa

Różne schematy realizacji

Promieniowanie i atom – co już wiemy

Atom może **absorbować** (pochłaniać) oraz **emitować** (wysyłać) promieniowanie.

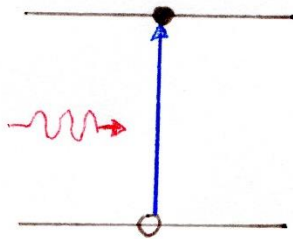
Energia hf absorbowanego/emitowanego **fotonu** jest równa **różnicy energii** poziomów energetycznych, między którymi zachodzi przejście elektronowe:

$$E_d + hf = E_g$$
$$E_g - E_d = hf$$
$$\lambda = \frac{c}{f}$$

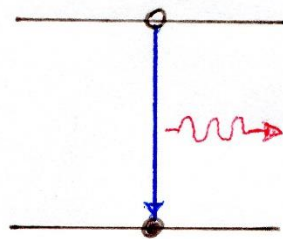
Mówimy, że spełniony jest warunek **rezonansu** (promieniowanie rezonansowe).

Promieniowanie i atom – co jeszcze musimy wiedzieć

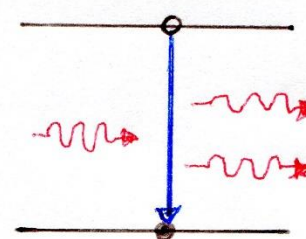
Emisja może być **spontaniczna** i **wymuszona**:



absorpcja



spontaniczna



wymuszona

Emitowany w sposób wymuszony foton ma **takie same własności** jak foton wymuszający – **jest dokładnie taki sam**.

Emisja wymuszona wymaga **inwersji** obsadzeń poziomów energetycznych.

Inwersja obsadzeń

Obsadzenie poziomu energetycznego mówi o tym, ile elektronów znajduje się w danym stanie. W „zwykłych” warunkach elektrony zajmują najniżej położone poziomy (poziomy o mniejszej energii). **Inwersja obsadzeń** to odwrócenie takiego rozkładu.

W próbce złożonej z dużej liczby (jednakowych) atomów możemy mówić o **inwersji obsadzeń w próbce**, gdy w części atomów „zaburzony” jest naturalny rozkład elektronów, tzn. więcej atomów znajduje się w wyższych stanach energetycznych.

Promieniowanie a atom – jeszcze coś ważnego...reguły wyboru

Pamiętaj, że **stan elektronu** (jego funkcję falową) w atomie charakteryzuje nie tylko **energia** (liczba kwantowa n), ale też inne liczby kwantowe (**orbitalny moment pędu l** , jego rzut na wybrany kierunek m_z , **spin m_s**).

Bardzo ważny fakt: nawet, jeżeli częstość f fotonu (czyli jego energia) spełnia warunek rezonansu, może to nie wystarczyć, by miało miejsce przejście między poziomami energetycznymi: muszą być spełnione jeszcze pewne relacje między innymi liczbami kwantowymi zaangażowanych w przejście stanów elektronowych. Te dodatkowe relacje to **reguły wyboru**.

Reguły wyboru

Podczas emisji i absorpcji promieniowania spełniona jest nie tylko zasada zachowania energii (energia fotonu jest równa różnicy energii między poziomami, pomiędzy którymi zachodzi przejście), ale muszą być spełnione jeszcze tzw. **reguły wyboru**.

Związane są one z zasadą zachowania momentu pędu i mówią, jakie muszą być wartości liczb kwantowych związanych właśnie z momentem pędu, by emisja bądź absorpcja fotonu była możliwa. Dla promieniowania świetlnego wartość liczby l pomiędzy zaangażowanymi stanami może różnić się o wartość jeden.

Laser

Co jest konieczne, aby „zbudować” laser
Różne realizacje

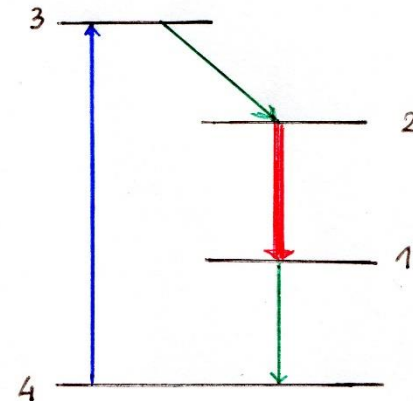
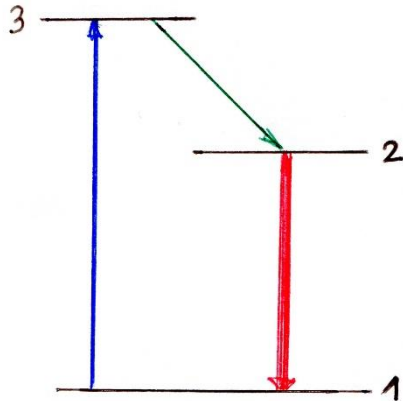
Warunek konieczny akcji laserowej

Promieniowanie laserowe – emisja wymuszona:

- Inwersja obsadzeń w ośrodku atomowym
- Wzmocnienie procesu emisji wymuszonej przez wywołanie jej w wielu atomach ośrodka

Warunkiem efektywnej akcji laserowej jest emisja wymuszona z b. wielu atomów – wybór atomów o odpowiednich właściwościach (**stan metatrwały**)

Akcja laserowa w układach 3 i 4 poziomowych



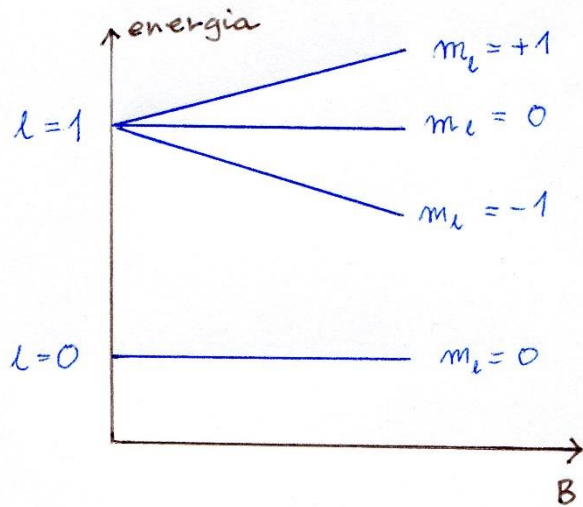
Atomy ze stanu podstawowego przenoszone są („pompowane”) do jednego ze stanów wzbudzonych (**linia niebieska**), skąd szybko „spadają” do stanu metastabilnego 2 (**linia zielona**), w którym przebywać mogą długo w skali czasowej procesów atomowych. Wskutek emisji wymuszonej z tego stanu do stanu 1 wywołana się AKCJA LASEROWA (**linia czerwona**). W układzie 4 poziomowym stan 1 nie jest stanem podstawowym; atomy powracają z niego do stanu podstawowego (**linia zielona**).

Stany **metastabilne** „długożyciowe” (nawet milisekundy) – **2**.
Akcja laserowa między poziomami 2-1

Rezonans magnetyczny

Atom w zewnętrznych polach magnetycznych: stałym i oscylującym
Obrazowanie metodą rezonansu magnetycznego

Kilka słów przypomnienia

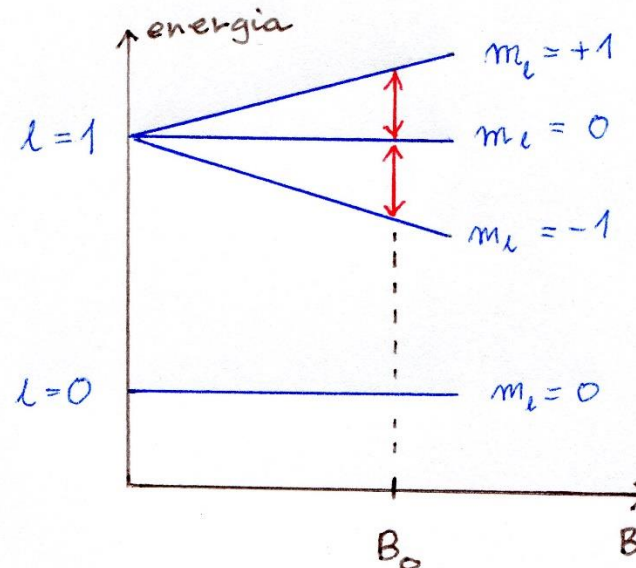
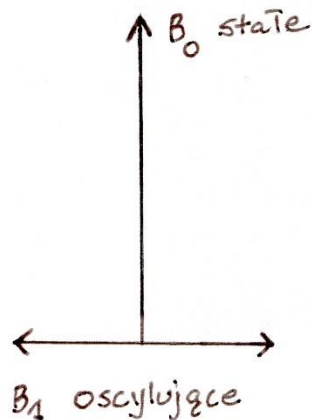


W zewnętrznym stałym polu magnetycznym poziomy energetyczne atomu ulegają rozszczepieniu. Odległości tych rozszczepionych poziomów leżą w zakresie **mikrofal**.

Rezonans magnetyczny

Pomiędzy rozszczepionymi poziomami mogą zajść **przejścia**, którym towarzyszy **emisja/absorpcja** promieniowania mikrofalowego.

Jeżeli tak „przygotowany” atom poddać działaniu drugiego pola magnetycznego, zmieniającego się okresowo w czasie z częstotliwością **równą** odległości tych rozszczepionych poziomów, to może między nimi zajść absorpcja oraz emisja wymuszona promieniowania mikrofalowego – **REZONANS MAGNETYCZNY**.



Obrazowanie metodą RM

Jest to złożona technika, która wykorzystuje zjawisko RM dla otrzymania precyzyjnych obrazów przekrojów ciała.

Wykorzystuje ona RM realizowany dla protonów, z których złożone są jądra atomowe.

Proton jest cząstką o spinie $\frac{1}{2}$, a więc w polu magnetycznym posiada dwa poziomy energetyczne o $m_s = \pm\frac{1}{2}$, których odległość zależy od wielkości pola. Pomędzy tymi poziomami dodatkowe zmienne pole magnetyczne o odpowiednio dobranej częstotliwości (**REZONANS**) może wywołać przejścia, które są rejestrowane jako sygnał rezonansu. Za pomocą obróbki komputerowej można w ten sposób rekonstruować gęstość protonów w badanym obszarze.

Obrazowanie metodą RM

Główną informacją, jaką otrzymujemy jest rozkład gęstości jąder atomowych.

Proton jest jądrem atomu wodoru, którego stężenie w organizmie ludzkim jest wysokie (woda, tłuszcz). W badaniu RM uzyskuje się rozkład gęstości tego właśnie pierwiastka.

W badaniu otrzymamy dobry obraz tkanek miękkich (np. mózg), inaczej niż w w Tomografii Rentgenowskiej, najlepiej obrazującej kości.

Pytania do wykładu 4

1. Cząstki elementarne dzielą się na bozony i fermiony.

Fermiony to cząstki o spinie....., a bozony to cząstki o spinie

2. Poziomy energetyczne atomu umieszczonego w polu magnetycznym mogą się rozszczepiać. O efekcie tym decyduje wartość liczby kwantowej.....

3. Pochłonięciu (absorpcji) fotonu przez atom towarzyszy przejście elektronu pomiędzy poziomami energetycznymi. Spełniona jest przy tym jedna z podstawowych zasad fizyki, a mianowicie

4. Akcja laserowa zachodzi dzięki zjawisku emisji wymuszonej. Warunkiem, by była ona efektywna, a więc aby możliwa była generacja promieniowania laserowego jest wytworzenie w układzie atomowym zjawiska

5. Realizacja zjawiska rezonansu magnetycznego wymaga umieszczenia atomu w stałym zewnętrznym polu magnetycznym oraz dodatkowo w polu magnetycznym

Koniec wykładu 4

Literatura

D. Halliday, R. Resnick, J. Walker, *Podstawy fizyki*, PWN, 2003 (istnieje nowsze wydanie)

E. Hecht, *Optyka*, PWN, 2012

P.A. Tipler, R.A. Llewellyn, *Fizyka współczesna*, PWN, 2011

UWAGA: Tematyce dotyczącej kwantowej budowy atomu (a także cząsteczki i ciała stałego) poświęcona jest olbrzymia literatura o bardzo różnym poziomie zaawansowania i specjalizacji. Wymienione trzy pozycje są łatwo dostępnymi podręcznikami w języku polskim, w których tematyka ta jest przedstawiona na dość wstępnym poziomie.