Atomfizika előadás
10. Az atomok hullámmodellje

2008. december 1.

Kvantumos jelenségek

- energia – foton energiája, $h\nu$

  atomi elektron energiaszintjei
- perdület – elektron pályaperdülete $n\hbar$

  elektron spinje
- nem kötött elektron energiája viszont folytonos lehet

Hogyan lehet leírni egyszerre folytonos és diszkrét értékeket felvevő mennyiségeket?

operátorok sajátértékei

Hullámtermészet értelmezése

- Az elektron interferenciára képes: hullámként is tud viselkedni
- Hogyan magyarázzuk a hullámtulajdonságait?

  (fotonét a Maxwell-egyenletekkel)

Milyen egyenlet az ami egy elektronhullámot leír?

Hullámegyenlet? nem teljesen

- Schrödinger-egyenlet!

operátorok vannak benne, és

hullámegyenlet szerű (deriválás idő és tér szerint)

idő szerint csak első derivált van benne

Fizikai mennyiségek új felfogása

- lendület (impulzus):

$$p_i \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$$

- Energia, mozgási energia (a lendület alapján):

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

- helykoordináta, helyzeti energia:

$x \rightarrow x^*$ $\quad$ $ke^2/r \rightarrow (ke^2/r)^*$

Az elektron energiája

- klasszikusan:

$$E = E_{mozgási} + E_{helyzeti} = \frac{p^2}{2m} - \frac{ke^2}{r}$$

- a hullámmechanikai képben az energia egy operátor *(H)*, ami hat egy függvényre, és egy másikat csinál belőle *Hf=g*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) f(x,y,z) - \frac{ke^2}{r} f(x,y,z) = g(\underline{r})$$

Az energia számértékét további „ügyeskedéssel” kell majd kiszámolni.

Melyik függvény az ami fizikai?

- Az az f a jó, amit a H operátor a saját konstans szorosába transzformál át

$$Hf(x,y,z)=g(x,y,z)=Ef(x,y,z)$$

Az ilyen függvény a H sajátfüggvénye, és az E szám a H operátor sajátértéke, ennek a számnak lesz fizikai jelentése: az energia értéke

Hidrogénatom elektronjának új leírása

- energiaoperátor írja le az elektron viselkedését
- sajátfüggvény, sajátenergia fogalma kell a leíráshoz
- Az elektron pályája: trajektória helyett sűrűségeloszlása lesz (radiális sűrűségeloszlás)
- perdülettel rendelkező állapotok (p, d, f) leírása matematikailag bonyolult, ezt csak áttekintjük

A sajátfüggvény keresése

Az *f(x,y,z)* egy térben értelmezett függvény, értéke most egy valós szám minden pontban, általában azonban komplex szám

Csak gömbszimmetrikus függvények körében vizsgálódunk, ez fizikailag a 0 perdületű állapotokat jelenti, (ezt a tulajdonságot s-betűvel jelöljük)

Így az *f(x,y,z)* jelölés helyett elég az $f(r,\varphi,\vartheta)=f(r)$ jelölést használni

A mozgási energia operátorában a Laplace-operátor jelent meg (Δ), ha megnézzük a gömbi koordinátarendszerben (r,φ,ϑ) felírt alakját, akkor látjuk, hogy ezt felosztható két részre: $\Delta=\Delta_r+\Delta_{\varphi,\vartheta}$

r szerinti deriváltakat tartalmazó tag: $\Delta_r=R$

szögek szerinti deriváltakat tartalmazó tag: $\Delta_{\varphi,\vartheta}=L^2$

szerencsére a kettő nem keveredik ☺

Az *R* operátorban a deriválások alakja matematikai könyvek szerint: $$Rf=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\cdot f)$$

Azt kell először megtudnunk,

1 hogy egy gömbszimmetrikus *f(r)*-t milyen függvénybe visz át az *R*,

2 ezután tudjuk kiszámolni, hogy ezt az *f(r)*-t a *H* milyen függvénybe viszi, és

3 ezen számolások alapján tudjuk kiválasztani a *H* sajátfüggvényeit.

A sajátfüggvény keresése (számolások)

1. megsejtjük, hogy milyen alakú a sajátfüggvény! $\rightarrow$ $f(r) = N \cdot e^{-\alpha r}$

   (itt *k* és α konstansok, és *r* - ugye - a változó)

2. első deriválás:

$$\frac{\partial}{\partial r}(r \cdot f) = \frac{\partial}{\partial r}\left(r \cdot N e^{-\alpha r}\right) = N\left(e^{-\alpha r}\frac{\partial}{\partial r} r + r\frac{\partial}{\partial r} e^{-\alpha r}\right) = N\left(e^{-\alpha r} - \alpha r e^{-\alpha r}\right)$$

3. második deriválás

$$\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}(r \cdot f) = N\frac{\partial}{\partial r}\left(e^{-\alpha r}(1-\alpha r)\right) = N(-\alpha e^{-\alpha r}(1-\alpha r) - \alpha e^{-\alpha r}) =$$

$$= N(-2\alpha e^{-\alpha r} + \alpha^2 r e^{-\alpha r})$$

4. *Rf* kiszámolása: $\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r \cdot f) = N(-2\alpha\frac{e^{-\alpha r}}{r} + \alpha^2 e^{-\alpha r})$

5. A H operátor hatása *f*-re lehet-e *E·f(r)*-rel egyenlő? ♣-egyenlet:

$$g(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\left(Ne^{-\alpha r}\right) - \frac{ke^2}{r}Ne^{-\alpha r} = -\frac{\hbar^2}{2m}N(-2\alpha\frac{e^{-\alpha r}}{r} + \alpha^2 e^{-\alpha r}) -$$

$$-\frac{ke^2}{r}Ne^{-\alpha r} = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}Ne^{-\alpha r} + N\frac{e^{-\alpha r}}{r}\left(\frac{\hbar^2\alpha}{m} - ke^2\right) = Ef(r) = ENe^{-\alpha r}$$

6. Két fajta függvényünk lett: *exp(-αr)* és *exp(-αr)/r* alakúak, ez utóbbi típus együtthatója, ha 0, akkor tényleg a *g(r)* éppen *Ef(r)* lesz!

$$\frac{\hbar^2\alpha}{m} - ke^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = \frac{mke^2}{\hbar^2}$$

7. Ennek reciproka éppen a Bohr-sugár! (A Bohr-modellben az első pálya sugara.)

$$a_0 = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{mke^2}$$

8. Megvan a sajátfüggvény ☺ : $f(r) = Ne^{-\frac{r}{a_0}}$

Fizikai mennyiségek

- Most már tudunk fizikai mennyiségekről valamit mondani:

1. Mekkora a H operátor sajátértéke ebben a gömbszimmetrikus esetben? ♣-egyenlet alapján, α most kiszámolt értéke mellett:

$$Hf(r) = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} f(r) = Ef(r) \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m^2k^2e^4}{\hbar^4}$$

$$E = -\frac{mk^2e^4}{2\hbar^2}$$

Ez a „szétkent" elektron-hullám energiája egy proton terében, az említett feltételek mellett.

Pont annyi, mint a pontszerűnek képzelt elektroné a Bohr-modellben n=1-nél.

Fizikai menyiségek

- megtalálási valószínűség: *f(r)-abszolutérték*²

$$p(x,y,z) = N^2 e^{-2r/a_0}$$

- radiális sűrűségeloszlás: egy *r* sugarú *Δr* vastag gömbhéjban a megtalálási valószínűségek összege osztva *Δr* :

$$\rho(r) = \frac{dP}{dr} = 4\pi r^2 f^2(r) = 4\pi r^2 N^2 e^{-2r/a_0}$$

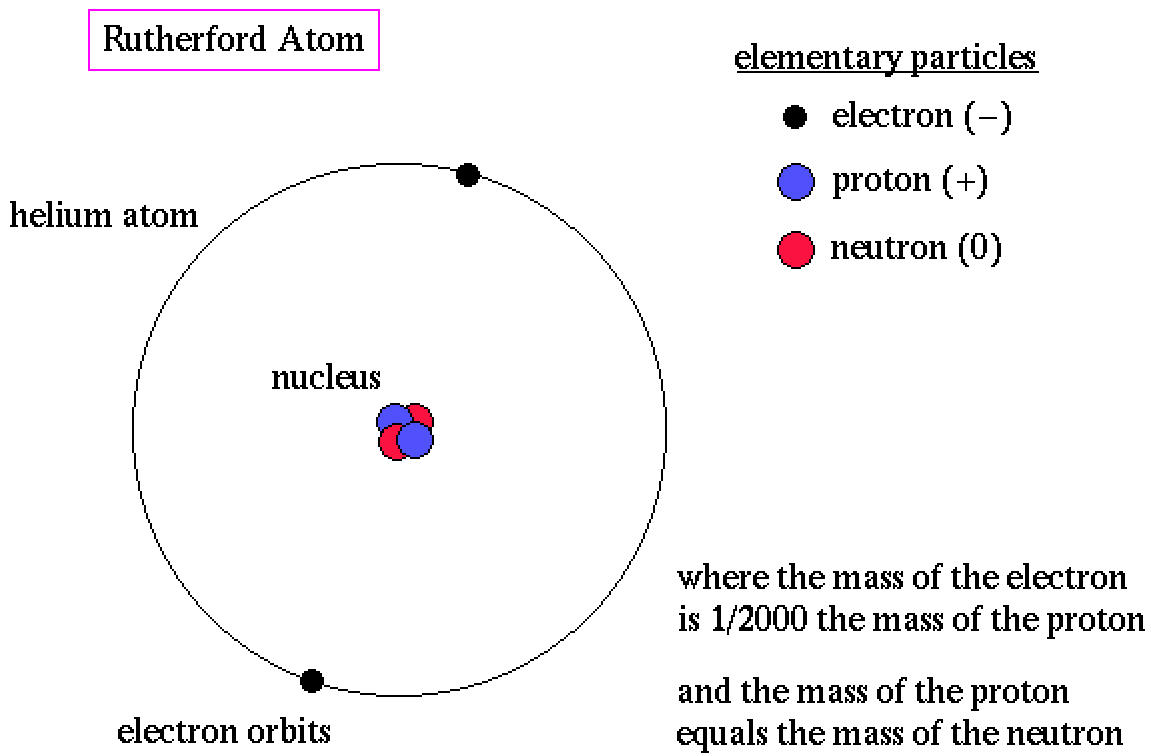
- ennek maximuma milyen *r*-nél van? (*r*-szerinti derivált = 0):

$$0 = \frac{\partial \rho(r)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} k\left(r^2 e^{-2r/a_0}\right) = k\left(e^{-2r/a_0} 2r + r^2 \frac{-2}{a_0} e^{-2r/a_0}\right) = 2kre^{-2r/a_0}\left(1 - \frac{r}{a_0}\right)$$

$$1 - \frac{r}{a_0} = 0 \Rightarrow r_{\max} = a_0$$

ekkora volt az elektronpálya sugara a Bohr-modellben!! ☺

Az atom szerkezete korábban

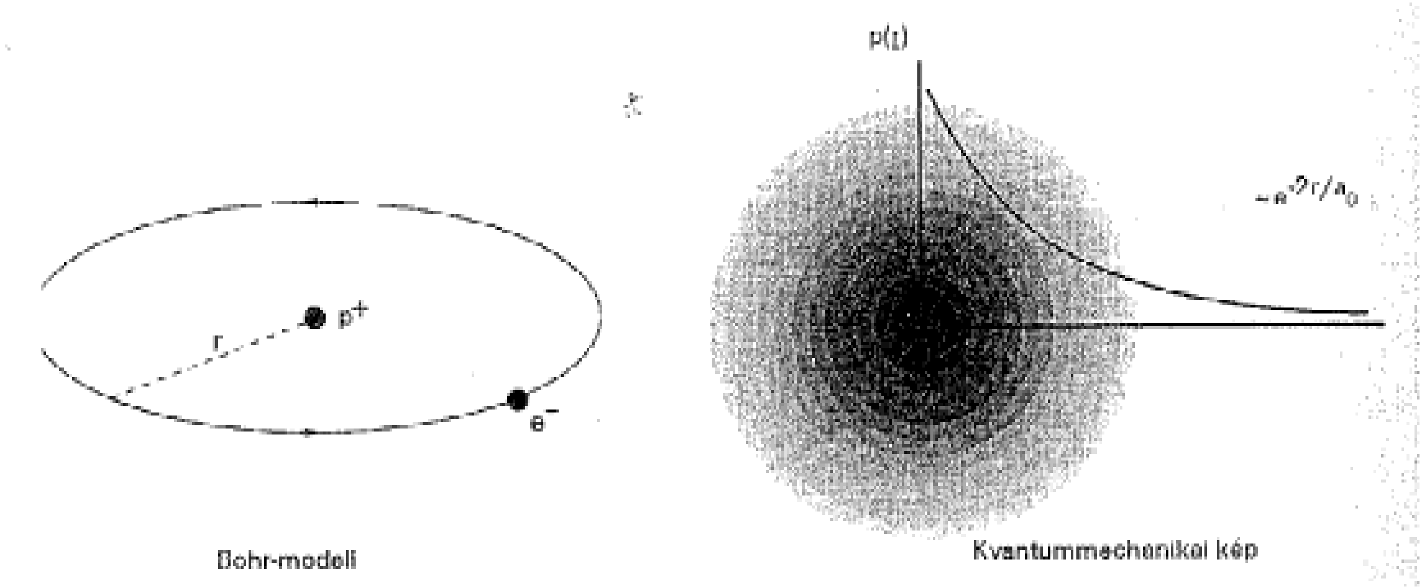


Ehhez adjuk hozzá a hullámmechanikai új információkat:

az elektron hullám (tud interferálni)

a hullámtulajdonságait a Schrödinger-egyenlet írja le, ez alapján ki tudjuk számolni, milyen is ez a hullám.

Az atomhéj az elektron-hullám képben



A hidrogénatomban az elektron „elkenve" található meg,
a hullámfüggvény abszolút-érték négyzetének jelentése
a megtalálási valószínűség!
(Eddig csak a gömbszimmetrikus esetet néztük meg, van
amikor ez nem teljesül.)

Érvényesség határai

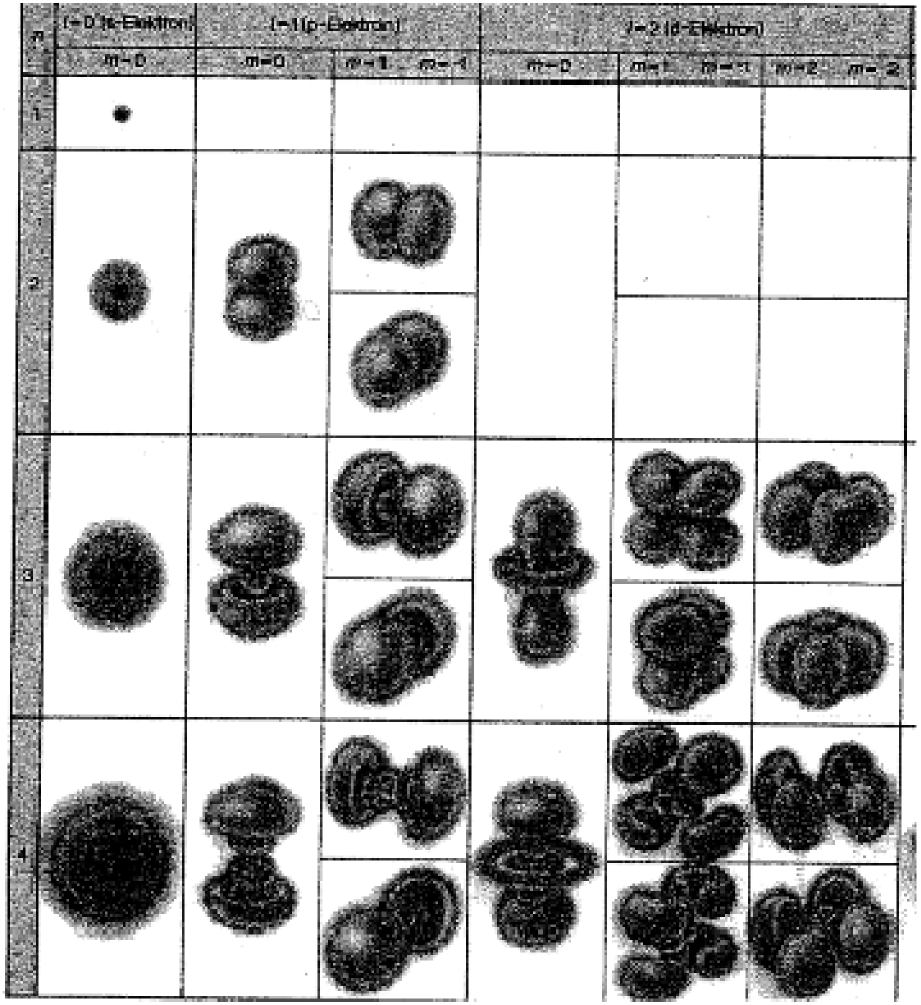
A hidrogénatom elektronjának legalacsonyabb energiájú állapotát írtuk csak le (n=1), ami gömbszimmetrikus.

- Van ennek gerjesztett állapota is. (nem gömbszimmetrikus is lehet akkor már)
- A nem gömbszimetrikus állapotok keresésekor a Laplace-szögfüggő részét be kell venni *H*-ba, ezáltal bejönnek ennek a sajátfüggvényei is! Ezek: gömbfüggvények $Y_{lm}(\varphi, \vartheta)$
- Az ℓ, *m* kvantumszámoknak van fizikai jelentése is: pályaperdület, és annak adott irányú vetülete
- Nagyon hasonló alakúak a magasabb rendszámú atomok elektronpályái is, de ott számos nehézség jön közbe.

Az atomi elektron kvantumszámai

- főkvantumszám - energiaoperátor (H)
- mellékkvantumszám - pályaperdület ($\vec{L}$)
- mágneses kvantumszám - L *z*-irányú vetülete
- spin kvantumszám - sajátperdület

Az atomi elektronpályák alakjai



s p d

A nem gömbszimmetrikus állapotok perdülettel is rendelkeznek!
2-6. oszlopok
ℓ=1 p-pályák
ℓ=2 d-pályák
ℓ=3 f-pályák

(*Így* értelmezik a perdületet a kvantummechanikában.)

ℓ=0 s-pályák a gömbszimmetrikusak

Mágneses tér az atomon belül

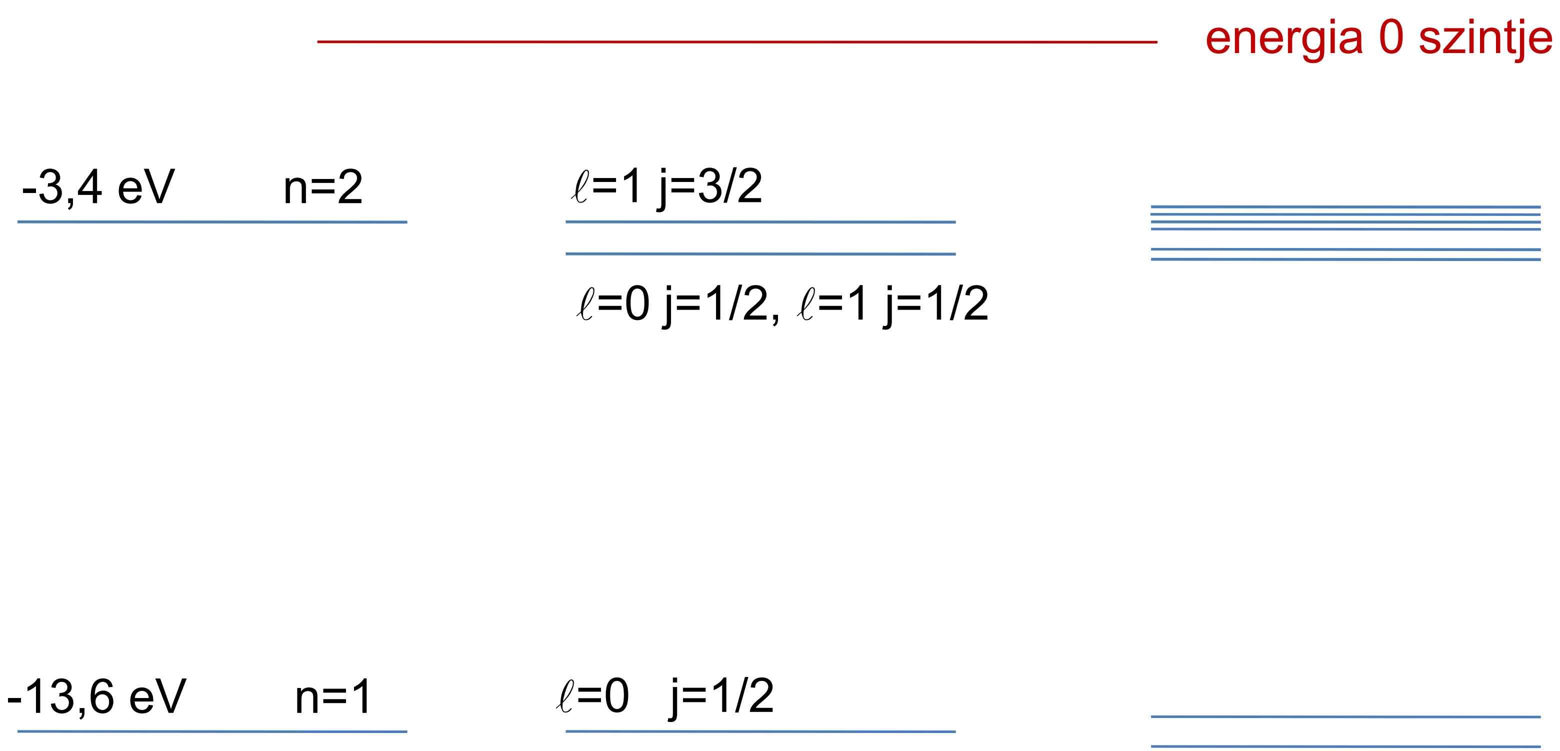
- Korábban láttuk: mozgó elektron mágneses teret kelt. Ha egy elektron kering a mag körül perdülete van, at atomi elektronoknak a hullámképben is van perdületük $\rightarrow$
- hullámképben is keltenek mágneses teret

- akkor a spinjük két irányban állhat és így ezekek különböző az energiájuk
- sőt az összes perdületük is kétféle lehet (teljes perdület)

$$j = \ell + s = \ell \pm ½$$

- p-pályán a *j* így lehet: 1/2 vagy 3/2

A hidrogénatom elektronjának energiaszintjei



durvaszerkezet
Bohr-modell
Schrödinger-kép

finomszerkezet
relativisztikus energia, spin

hiperfinom-szerkezet
atommag mágneses tere