Kvantumfizika IV.

Rutherford kísérlet, atommodellek

→ 1897: Thomson → mazsolák a pudinglaw modell (pudin: ⊕, mazsola ⊖)

→ Rutherford ezt próbálta cáfolni – igazolni. Kísérlete: α-(^4_2He) részecskék szóródása arany fóliáról. A szóródási minta elsöpörte a Thomson-modellt.

↳ Hatáskeresztmetszet: Tekintsünk egy részecskeyalábot, melyben N részecske érkezik Δt idő alatt. Ezek közül N_r szóródik. A reakció valószínűsége: $p = N_r/N$, amit jellemezhetünk a szóródó részecskék „hatásos" felületének és a yaláb keresztmetszetének hányadosával.

$$p = \frac{N_r}{N} = \frac{\sigma}{F}$$

→ Sok atomot bombázva ez arányos a szórócentrumok számával is.

$$p = \frac{N_r}{N N_c} \longrightarrow N_r = pNN_c = \frac{\sigma}{F} N N_c = \sigma \frac{N}{F\Delta t} N_c \Delta t = \sigma j N_c \Delta t$$

→ itt j a részecskeáram-sűrűség

$$\frac{dN_r}{dt} = \dot{N}_r = \sigma j N_c$$ → A képletben σ-t nevezzük hatáskeresztmetszetnek.

→ Rutherford a térszög szerinti szóródást vizsgálta → differenciális hatáskeresztmetszet. σ helyett $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ szerepel a képletben.

$$\hookrightarrow \frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}(\theta) = \left(\frac{1}{2}\frac{Z_1 Z_\alpha e^2}{m_\alpha v_\alpha^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}$$ → Rutherford-formula

Rutherford modellje: Atomok belsejében pozitív többlettöltésű mag: nucleus, elektronok bolygóként keringenek körülötte. Mozgásukat a Coulomb potenciál határozza meg.

→ Gond: → Nincs magyarázat arra, hogy az atomok miért csak egy bizonyos karakterisztikus értékeken nyelnek el v. bocsátanak ki EM-sugárzást.

→ Centripetális gyorsulás → energiaveszteség → spirális zuhanás

1913: Bohr-Modell

Postulátumok: $\boxed{1.}$ Az elektronok körpályákon keringenek az atommag körül, a Coulomb pot. hatására.

$\boxed{2.}$ Csak meghatározott pályák stabilak → stacionárius állapotok, az elektronok ezeken a gyorsulásuk ellenére nem sugároznak.

$\boxed{3.}$ Az egyes pályák közötti mozgás során sugárzás történik. A kisugárzott foton energiája: $h\nu = E_i - E_f$ (elnyelésre ugyanez.)

$\boxed{4.}$ Az elérhető pálya méretét az elektron impulzusmomentumára bevezetett feltétel szabja meg: Az elektron pálya impulzusmomentumának $\hbar = h/2\pi$ egész számú többszörösének kell lennie.

$$mvr = n\hbar \qquad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Alkalmazása a hidrogén atomra:

→ Az atom teljes energiája, ami az elektron kinetikus energiáját és a rendszer pot. energiáját tartalmazza:

$$E = K + U = \frac{1}{2} m_e v^2 - k_e \frac{e^2}{r} \qquad \left(k_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)$$

→ Mivel körmozgásról van szó, a centripetális gyorsulást a Coulomb-erőhöz köszönhetjük:

$$\frac{mv^2}{\cancel{r}} = k_e \frac{e^2}{r^{\cancel{2}}} \longrightarrow v^2 = \frac{k_e e^2}{rm} \longrightarrow K = \frac{k_e e^2}{2r}$$

→ A rendszer energiája tehát:

$$E = -\frac{k_e e^2}{2r} \qquad (\text{kötött állapot})$$

→ A lehetséges sugár értékeket a 4. pontulátum alkalmazásából kapjuk meg:

$$v = \frac{n\hbar}{mr} \longrightarrow v^2 = \frac{n^2\hbar^2}{m^2 r^2} = \frac{k_e e^2}{rm} \longrightarrow r = \frac{n^2\hbar^2}{m_e k_e e^2} \qquad (n = 1, 2, 3 \dots)$$

Bohr-sugár $(n=1)$ → $a_0 = \dfrac{\hbar^2}{m_e k_e e^2} \doteq 0.0529\,\text{nm}$

↳

→ Ebből a diszkrét energiák:

$$E_n = -\frac{Ze^2}{2a_0}\left(\frac{1}{n^2}\right) = -\frac{13.606\,eV}{n^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

→ Alkalmazzuk a 3. posztulátumot is:

$$c\frac{1}{\lambda} = \nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \frac{Ze^2}{2a_0 h}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

→ Ez a pontán teoretikus formula tökéletesen egyezik a Balmer-sor formulájával:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \longrightarrow R_H = \frac{Ze^2}{2a_0 hc} \qquad (99\%\ \text{pontosság})$$

→ Pontosabb érték: redukált tömeggel: $m_e' = \dfrac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_m}} \rightarrow R' = \dfrac{R}{1 + \frac{m_e}{m_m}}$

A Bohr-modell finomítása: Sommerfeld-féle kvantumfeltételek

→ Ellipszispályák kvantálása

↳ polárkoordinátarendszer $\mathcal{L} = \frac{1}{2}m_e\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2\right) + k\frac{Ze^2}{r}$

→ A Sommerfeld-féle kvantumfeltételek:

$$\oint p_r\,dr = n_r h \qquad \text{Kanonikus impulzusok}$$

$$\oint p_\phi\,d\phi = k h \qquad \rightarrow \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = p_r \;;\; \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = p_\phi$$

→ itt n_r: radiális kvantumszám, $l = k - 1$ mellékkvantumszám

⇒ Ezt a hidrogénre alkalmazva:

$$p_r = m_e\dot{r}\ ,\ p_\varphi = m_e r^2\dot{\phi} \longrightarrow E = -cRh\frac{1}{(n_r + k)^2}$$

→ Főkvantumszám: $n = n_r + k$

→ Az ellipszisek féltengelyei: $a = \dfrac{n^2\hbar^2}{k\,m_e e^2}$; $b = a\dfrac{k}{n}$ ← kvantumszám

↳ $k = 0$ nem megengedett!

A térbeli helyzet megadásához három koordinátára van szükség:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m_e \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 + r^2 \sin^2\phi \, \dot{\theta}^2 \right) + \frac{Z e^2}{r} k$$

$$p_r = m_e \dot{r} \,, \quad p_\phi = m_e r^2 \dot{\phi} \,, \quad p_\theta = m_e r^2 \sin\phi \, \dot{\theta}$$

$$\rightarrow \oint p_\theta \, d\theta = mh \longrightarrow p_\theta = \frac{mh}{2\pi} = m\hbar$$

$$m: -k, \ldots -1, 0, 1, \ldots k$$

$\Rightarrow$ Az adott n és k esetén $2k+1$ térbeli helyzet lehetséges.

$$k = n_\theta + |m|$$

$$n = n_r + n_\theta + |m|$$

(+) míg a spektrum finom szerkezete