

ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟ ΚΑΙ ΑΤΟΜΙΚΑ ΠΡΟΤΥΠΑ

Joseph John Thomson (Nobel 1906)

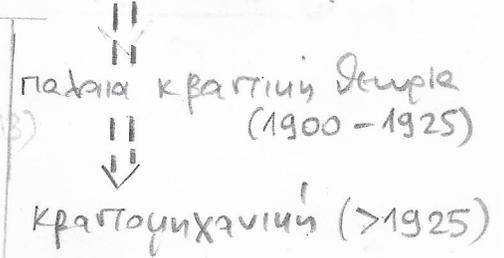
ηλεκτρόνιο 1897 J. J. Thomson

Το πρώτο ανακαλυφθέν υποατομικό σωματίδιο: **Οι καθοδιόμενες ακτίνες**

αποτελούνται από αρνητικά φορτισμένα σωματίδια πολύ μικρότερα των ατόμων με μεγάλο $\frac{q}{m}$.

{ φασματικά... κυβικό πρότυπο (1902),
πρότυπο "σταφιδώφωρου" (1904),
πρότυπο Κράου (1904) κ.α. } ("ηλεκτρονία")

πολλά φαινόμενα σχετίζονται με ηλεκτρόνια ατόμων & στερεών
δεν εξηγούνται με κλασική φυσική

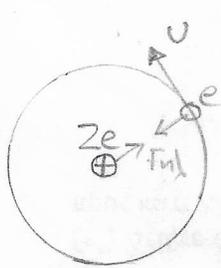


ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΡΟΤΥΠΟ RUTHERFORD (1911)

παλαιά κλασική εξήγηση το δ οποίου είναι το **ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΡΟΤΥΠΟ Bohr (1913)**

πειράματα Rutherford → τα ηλεκτρόνια περιφέρονται γύρω από έναν μικρό, πυκνό, θετικώς φορτισμένο πυρήνα

Ατομικό πρότυπο Rutherford: ιδιότυπο κλασικό, «ηλιακό» ή «πλανητικό» σύστημα



$$F_{nl} = F_k \Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

$$\frac{m_e v^2}{2} = E_{kin} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_{dyn} = (-e) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

* { K.M. = πυρήνας
σύνθετα σωματίδια
 $m_p \approx 1836 m_e$
 $m_n \approx 1839 m_e$ }

$$E_{tot} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

$$v = \sqrt{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}}$$

$$v = \omega r = 2\pi f r$$

$$\Rightarrow f = \sqrt{\frac{Ze^2}{16\pi^3 \epsilon_0 m_e r^3}}$$

* { $F_{nl} \gg F_{βαρ}$
Να αποδειχτεί
ως ζακισούλα }

Όμως, οι παραπάνω εξισώσεις παρουσιάζουν **αντιφάσεις**

1m) εξίσωση Larmor $P = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}$

a: επιτάχυνση (έδώ κεντρομόλος)
q: φορτίο (έδώ -e)

έκπεμπόμενη ισχύς από γρήγορα κινούμενο φορτίο

έκποση ΗΜ ακτινοβολίας $\Rightarrow E_{ολ} \downarrow \Rightarrow |E_{ολ}| \uparrow \Rightarrow r \downarrow \Rightarrow v \uparrow \text{ & } f \uparrow$

Το ηλεκτρόνιο χάνει ενέργεια διαγράφοντας μια σπειρωτή κίνηση συνεχώς μικρότερης ακτίνας $r \downarrow$ συνεχώς μεγαλύτερης ταχύτητας $v \uparrow$ συνεχώς μεγαλύτερης συχνότητας $f \uparrow$

... καταπιπτότατος μορφαία στον πυρήνα!

Δηλαδή το κλασικό πρότυπο Rutherford είναι ένα καταστροφικό πρότυπο.

$\lambda_n \downarrow$ συνεχώς $f \uparrow$ συνεχώς
 $v \uparrow$ συνεχώς

Πώς μπορεί αυτό να συμβιβαστεί με τα πειραματικά δεδομένα, τα οποία, ήδη από το τέλει του 19ου αιώνα, έδειχναν πως τα άτομα εκπέμπουν φως σε διακριτές και όχι συνεχώς συχνότητες (ενέργειες)

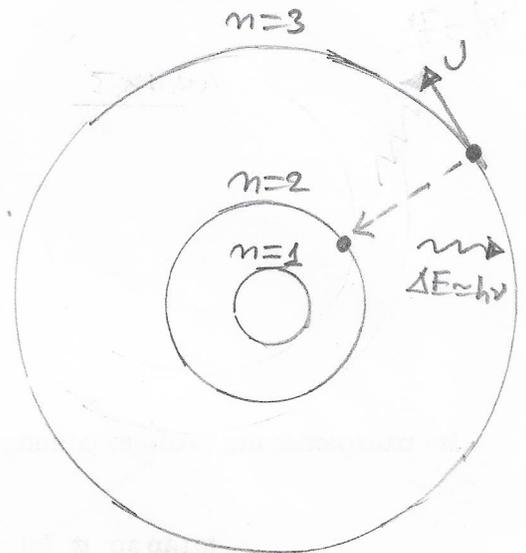
σειρές Lyman, Balmer, Paschen, ... (φύλλο 4)

Ατομικό Πρότυπο Bohr (1913)

παράφερε να εξηγήσει τον πειραματικό νόμο Rydberg για τις φασματικές γραμμές εκπομπής του ατόμου του H.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}^*$$

\downarrow
 σταθερά
 Rydberg
 $\approx 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$



n_1	n_2	Όνομα φασματικής σειράς	Συχνότητα προς
1	$2 \rightarrow \infty$	Lyman	91.13 nm (UV)
2	$3 \rightarrow \infty$	Balmer	364.51 nm (~Visible)
3	$4 \rightarrow \infty$	Paschen	820.14 nm (IR)
4	$5 \rightarrow \infty$	Breckett	1458.03 nm (FIR)
5	$6 \rightarrow \infty$	Pfund	2278.17 nm (FIR)
6	$7 \rightarrow \infty$	Humphreys	3280.56 nm (FIR)

μπορεί επίσης να εφαρμοστεί σε υδρογονοειδή ιόντα π.χ. He^+ , Li^{2+} , Be^{3+}

$$\frac{1}{\lambda} = RZ^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

μπορεί ακόμα να εφαρμοστεί σε μακρινά ηλεκτρόνια πολυηλεκτρονικών ατόμων όπου το ενεργό πυρηνικό φορτίο μπορεί να θεωρηθεί $\approx e > 0$
 αφού όλα τα πυρηνικά φορτία, ενός ατόμου, δισκελιούνται από τα ονόματα ηλεκτρονίου

ΥΠΟΘΕΣΕΙΣ

① Το ηλεκτρόνιο κινείται σε κυκλική τροχιά λόγω $F_{ηλ} = F_K$ και υπακούει στους νόμους της κλαστικής μηχανικής, τους οποίους εκφράζουν οι εξισώσεις τις οποίες γράψαμε προηγουμένως για τα $F_{ηλ} = F_K, E_{Kηλ}, E_{δυν}, E_{ολ}, v, f$

② Άλλω, ότι για τις άπειρες επιτρεπόμενες κλασικές τροχίες (σε ορατά φως ακτίνες), το ηλεκτρόνιο μπορεί να κινείται μόνο σε τροχίες:

$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ $L = r p = m_e v r = n \hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$
στροφορμή

ΕΙΣΑΓΕΤΑΙ ΑΞΙΩΜΑΤΙΚΑ
διακριτότητα
(«κβάντωση»)

σήμερα ονομάζεται
κύριος κβαντικός αριθμός
principal quantum number

③ Στις επιτρεπόμενες αυτές στάσιμες τροχίες (stationary orbits) το ηλεκτρόνιο ΔΕΝ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΕΙ (δηλ. δεν ισχύει η εξ. Larmor για την P)
Σε αυτές τις τροχίες, σε καθορισμένες απόστασεις από τον πυρήνα, το ηλεκτρόνιο έχει καθορισμένη, σταθερή ενέργεια.

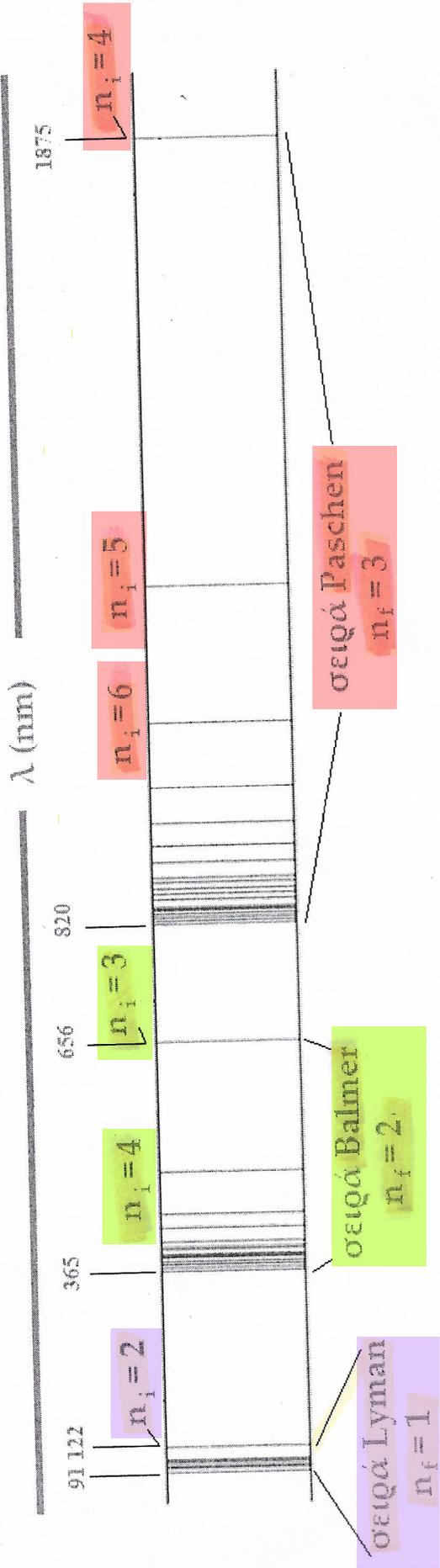
④ Ημ ακτινοβολία εκπέμπεται ή απορροφάται όταν το ηλεκτρόνιο αλλάξει επιτρεπόμενη τροχιά και η συχνότητα της εκπέμπεται ή απορροφάται Ημ ακτινοβολίας είναι

$hf = |E_i - E_f|$
initial final

$m_e v r = n \hbar$
 $v = \sqrt{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}}$ } $\Rightarrow \frac{m_e^2 r^2 Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r} = n^2 \hbar^2 \Rightarrow r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Ze^2 m_e} \cdot n^2$
 $a_0 := \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
ακτίνα Bohr

a_0 : χονδραειδίως, τυπικό μέγεθος του ατόμου
 $10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$
(ξήν. τυπικό μέγεθος πυρήνα $10^{-15} \text{ m} = 1 \text{ fm}$)
νανοεπιστήμη
νανοτεχνολογία

- $r_1 = a_0$
- $r_2 = 4a_0 \dots$ στο άτομο H
- $r_3 = 9a_0$
- ...



IR
δτιμήδες

UV-vis

UV
δτιμήδες

visual 380 nm - 760 nm
πείρα

δραση στον "μεσο" ανθρωπινο οφθαλμο

$$E_{ολη} = E_n = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 a_n} = -\frac{Ze^2 Z e^2 m_e}{8\pi\epsilon_0 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2} \Rightarrow E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Να συμπληρώσει τα προδόμενα

K	m
M	μ
G	n
T	p
P	f

$$R_E := \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \approx 13.6 \text{ eV}$$

Ενέργεια Rydberg

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \text{ στο H}$$

$$E_1 \approx -13.6 \text{ eV}$$

$$E_2 \approx -3.4 \text{ eV}$$

$$E_3 \approx -1.5 \text{ eV}$$

...

* Η άμεση μάζα $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$ επειδή $m_p \approx 1836 m_e$

$$\text{Από } hf = |E_{n_2} - E_{n_1}| \Rightarrow h \frac{c}{\lambda} = \left| -\frac{R_E}{n_2^2} + \frac{R_E}{n_1^2} \right| \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{R_E}{hc} \left| \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right|$$

$$R := \frac{R_E}{hc} \approx 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

σταθερά Rydberg

Δηλαδή, προκύπτει ο πειραματικός τύπος του Rydberg! ΕΠΙΤΥΧΙΑ

ΜΕΙΩΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΤΩΣ ΠΡΩΤΟΥ ΒΟΗΡ

10 εφαρμόζεται μόνο στο H, στα He⁺, Li²⁺, Be³⁺... , εξωτερικά ηλεκτρόνια μονοηλεκτρονικά άτομα (πολυηλεκτρονικών ατόμων (δυορών))

→ δεν επαρκεί ούτε για το άτομο του He.

20 Δεν μπορεί να εξηγήσει γιατί κάποιες φασματικές γραμμές είναι πιο έντονες από άλλες, δηλ. γιατί κάποιες μεταβάσεις μεταξύ ενεργειακών επιπέδων έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να συμβούν από άλλες.

30 Δεν μπορεί να εξηγήσει γιατί πολλές φασματικές γραμμές είναι πολλαπλές, δηλ. αποτελούνται από ξεχωριστές γραμμές των οποίων τα μήκη κύματος διαφέρουν ελάχιστα (λόγω ύψις ατομικών φασμάτων)

40 Δεν μπορεί να εξηγήσει γιατί επτά μαγνητικό πεδίου οι πολλαπλές γραμμές διαχωρίζονται (φαινόμενο Zeeman) (φύλλο 7)

50 Δεν κπαι επιτρέπει να κατανοήσουμε πώς αλληλεπιδρούν τα άτομα ώστε να σχηματίσουν μόρια, στερεά και άλλα συσσωρευτώμερα

ΧΗΜΕΙΑ ΦΥΣΙΚΗ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΕΝΗΣ ΥΛΗΣ

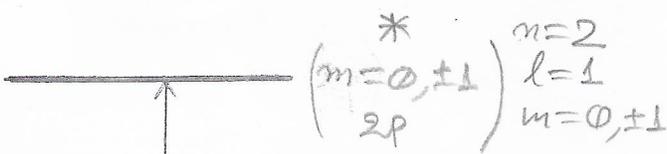


οιχα' οια' > 1925

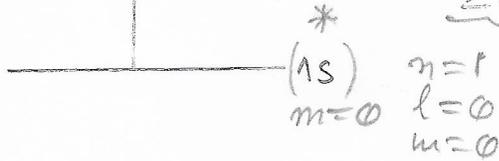
κβαντική μηχανική
quantum mechanics

Ἔτεῳ δὲ οὐδὲν ἴδμεν ἐν φυσῶν γὰρ ἢ ἀληθεία»

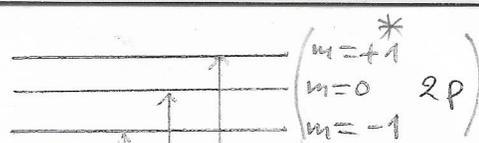
ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ
~ 470 - 370 π.Χ



φαινόμενο
Zeeeman



χωρίς μαγνητικό πεδίο

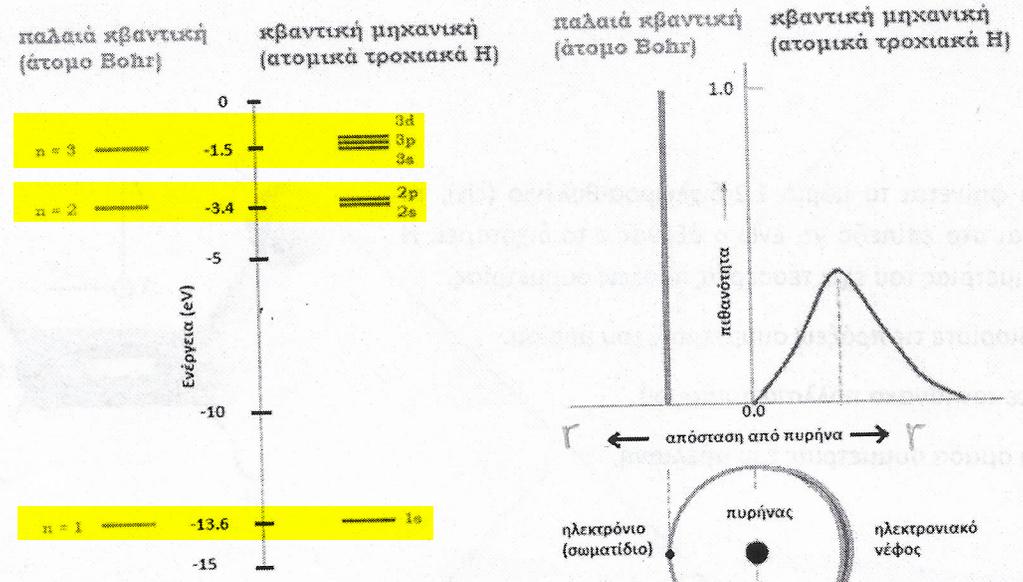


με μαγνητικό πεδίο

* σύμφωνα με το πρώτο αξονικό τροχιακό το άτομο θα εφεύρουμε άρχισια

Σύγκριση πρώτου Bohr - πρώτου ατομικών τροχιακών

© ΑΤΟΜΟ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ



Σύγκριση Ενέργειών

Σύγκριση θέσεων

ΜΕΡΙΚΕΣ ΠΑΡΑΓΩΓΕΣ

$$f(x,y) \quad \frac{\partial f(x,y)}{\partial x} := \frac{df(x,y)}{dx} \Big|_{y=\text{σταθερή}}$$

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial y} := \frac{df(x,y)}{dy} \Big|_{x=\text{σταθερή}}$$

όμοια για συνάρτηση περισσότερων μεταβλητών

Εδώ πια να έχουμε $f(x,t)$, $f(x,y,z,t)$

π.χ.

$$f(x,y) = x^2 + y^2$$

$$g(x,y) = xy^2 + 3x^2y$$

$$h(x,y,z) = 4xyz^4$$

ΑΣΚΗΣΗ : Βρείτε το λόγο $\frac{F_{ηλ}}{F_{βαρ}}$ στο άτομο του υδρογόνου.

$$\left. \begin{aligned} F_{ηλ} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \\ F_{βαρ} &= \frac{G m_p \cdot m_e}{r^2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{F_{ηλ}}{F_{βαρ}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 G m_p m_e}$$

$$e \approx 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\epsilon_0 \approx 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$$

$$G \approx 6.67 \cdot 10^{-11} \frac{\text{Nm}^2}{\text{kg}^2}$$

$$m_e \approx 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$m_p \approx 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\frac{F_{ηλ}}{F_{βαρ}} \approx \frac{1.6^2 \cdot 10^{-38}}{4\pi \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot 6.67 \cdot 10^{-11}}$$

$$\approx \frac{9 \cdot 10^{-31} \cdot 1.67 \cdot 10^{27}}{2.3 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{10^{-38}}{10^{-81}}}$$

$$\approx 2.3 \cdot 10^{39}$$

Δηλαδή, η ηλεκτρική δύναμη είναι συντηρητικώς μεγαλύτερη.

2008/1/10

κλασική μηχανική

άρχινη θέση x_i
άρχινη ορμή p_i
ασκοούμενες δυνάμεις

} \Rightarrow μέλλον γνωστό ακριβώς

ΑΙΤΙΑ \Rightarrow ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑ

στον καθημερινό κόσμο
από τις ποσότητες μπορούμε να καθορίσουμε
με μέτριο ακρίβεια γιατί οι προβλέψεις της κλασικής μηχανικής
να συμφωνούν με το πείραμα & γενικά με όσα έχουμε στην καθημερινότητα μας

κβαντική μηχανική

άρχη αβεβαιότητας
uncertainty principle

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$$

για την καθημερινή ζωή
αυτή η αβεβαιότητα
δεν έχει σημασία

οι αβεβαιότητες δεν οφείλονται σε συστηματικό ή τυχαίο σφάλμα
μέτρησας

οποιαδήποτε μέτρημα οδηγεί αύξηση κι άλλο την αβεβαιότητα μας

? Αφού δεν γνωρίζουμε
εξακριβώς το παρόν

\Rightarrow Δεν μπορούμε να γνωρίζουμε
εξακριβώς το μέλλον

Η άγνοιά μας δεν είναι εθελουσιαστική. Μπορούμε να γνωρίζουμε
πιθανότητες

π.χ. παρουσία σε χώρο
οργάνω
κλπ

Η κβαντική φυσική διερευνά σχέσεις μεταξύ πιθανοτήτων

ΑΙΤΙΑ & ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑ ΣΧΕΤΙΖΟΝΤΑΙ ΑΚΟΜΑ