Ατομική Φυσική

Γ.Χ. Σακελλαρόπουλος
Καθηγητής Ιατρικής Φυσικής – Ιατρικής Πληροφορικής

Τμήμα Ιατρικής – Εργαστήριο Ιατρικής Φυσικής

Εισαγωγή

- Νευτώνεια Μηχανική Newton (~1750)
- Ηλεκτρομαγνητική Θεωρία Maxwell (~1800)
- Θερμοδυναμική (~1800)

ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

Θεμέλιο επιστήμης μέχρι ~1900
Βάση τεχνολογικών εφαρμογών 20ου αιώνα

~1900: Στροφή προς ερμηνεία ατομικής δομής της ύλης και φασμάτων φωτός.

Αναδύεται η διακριτή δομή πολλών φυσικών μεγεθών (ενέργεια, ύλη)

Η Κλασική Φυσική κρίνεται ανεπαρκής στην ερμηνεία των νέων πειραματικών δεδομένων.

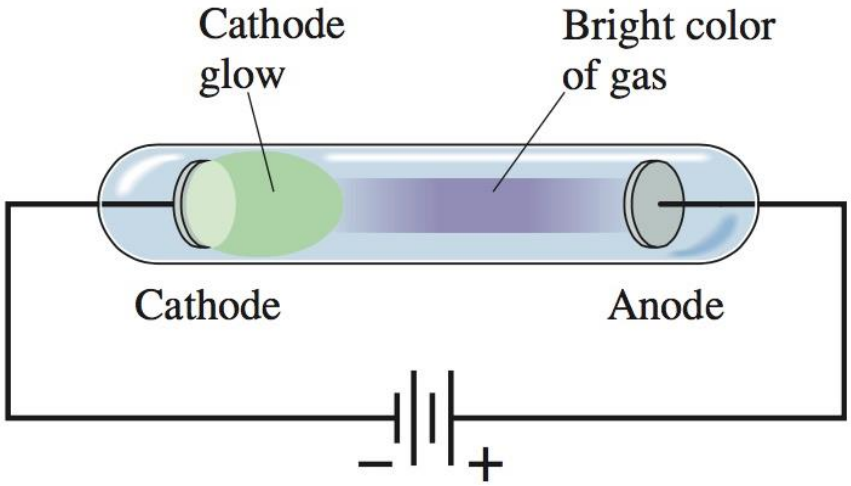
Γένεση **ΣΥΓΧΡΟΝΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ**

Θεωρία Σχετικότητας
(Einstein): Νέα θεώρηση της σχέσης χώρου-χρόνου

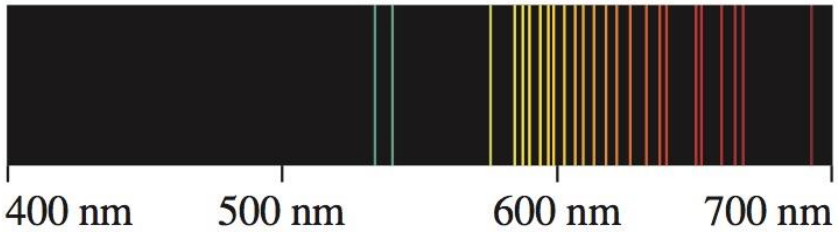
Κβαντική Μηχανική
(Heisenberg, Born, Schrödinger, Dirac): Δυισμός σωματιδίου-κύματος στον (υπο)ατομικό κόσμο

Φάσματα εκπομπής

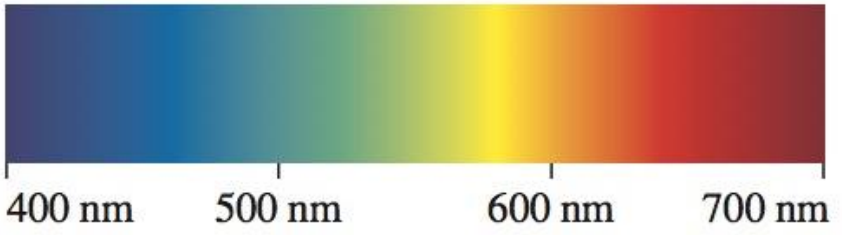
Faraday (1820)
Ηλεκτρική εκκένωση σε αέριο υπό χαμηλή πίεση: Παραγωγή φωτός



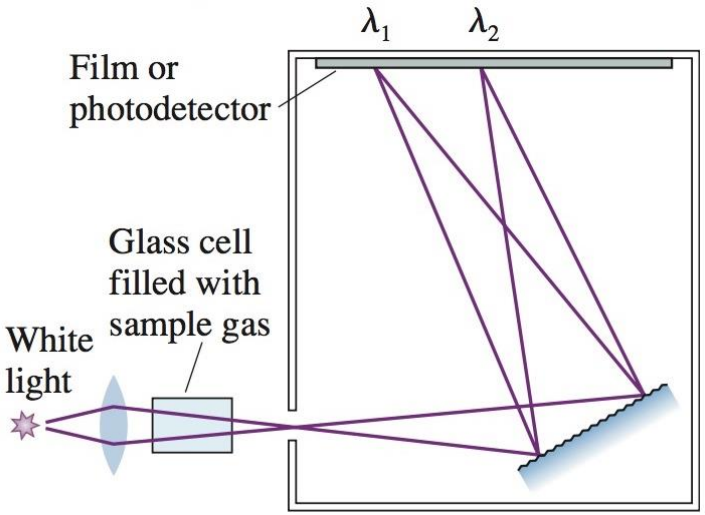
Διακριτό φάσμα εκπομπής Νέου
(κάθε αέριο εκπέμπει διαφορετικό φάσμα, χαρακτηριστικό του αερίου)



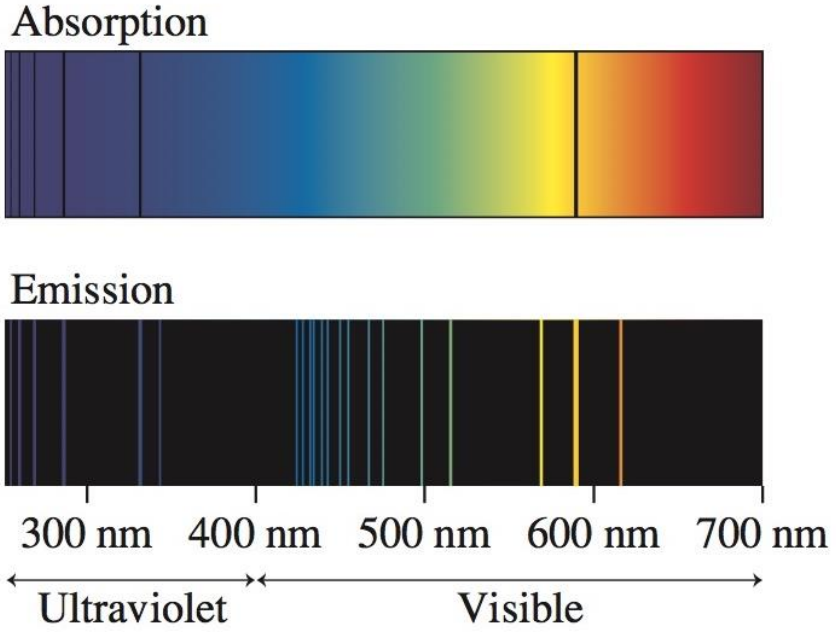
Συνεχές φάσμα λαμπτήρα πυρακτώσεως



Φάσματα απορρόφησης



Λευκό φως περνά μέσα από αέριο και χτυπά σε φράγμα περίθλασης και κατόπιν σε φωτογραφικό φιλμ



Κάθε μήκος κύματος του φάσματος απορρόφησης υπάρχει στο φάσμα εκπομπής αλλά όχι το αντίστροφο!

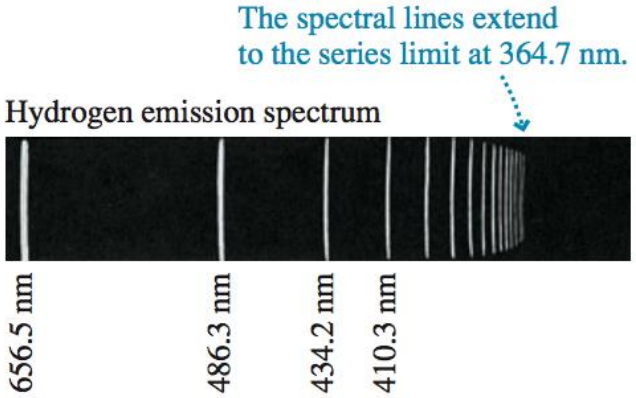
Ερωτήματα

- Τι προκαλεί την εκπομπή και την απορρόφηση φωτός από τα άτομα;
- Γιατί το φάσμα είναι διακριτό;
- Γιατί κάποια μήκη κύματος εκπέμπονται αλλά δεν απορροφώνται;
- Γιατί τα φάσματα είναι διαφορετικά για κάθε στοιχείο;

Εμπειρική γνώση

Balmer 1885

Τα μήκη κύματος του φάσματος του Υδρογόνου περιγράφονται από τη σχέση:



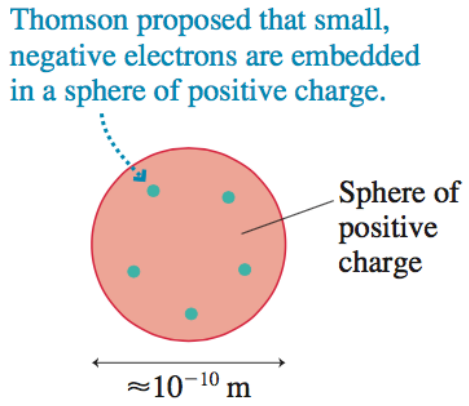
$$\lambda = \frac{91.18\ \text{nm}}{\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)} \qquad n = 3, 4, 5, \ldots$$

$$\lambda = \frac{91.18\ \text{nm}}{\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)} \qquad m = 1, 2, 3, \ldots \qquad n = m + 1, m + 2, \ldots$$

Απλή σχέση, και όλοι συμφωνούσαν ότι θα έχει απλή εξήγηση!
Χρειάστηκαν 30 χρόνια για να βρεθεί όμως...

Thomson 1897:

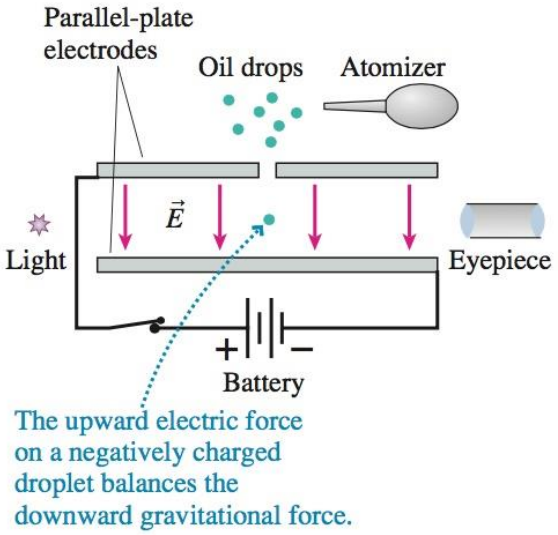
- Το άτομο περιέχει φορτισμένες συνιστώσες που μπορούν να διαχωριστούν (ακτίνες Χ χτυπούν αέριο Ηe, μαγνητικό πεδίο προκαλεί απόκλιση)
- Ανακάλυψη ηλεκτρονίου
- Πρώτο μοντέλο ατόμου (σταφιδόψωμο)



Millikan 1906:

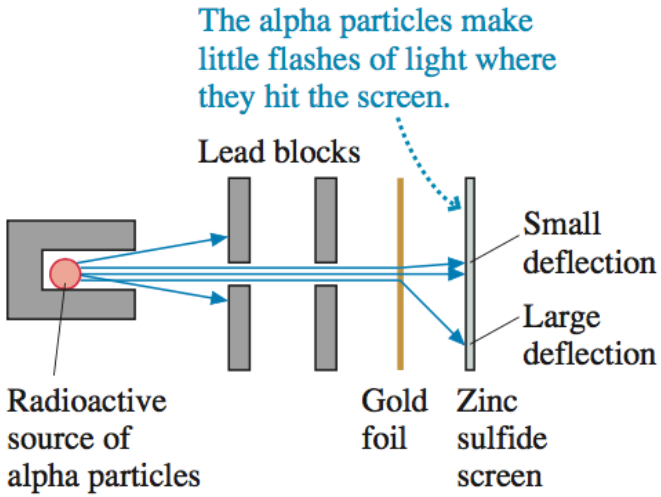
Μέτρηση φορτίου ηλεκτρονίου

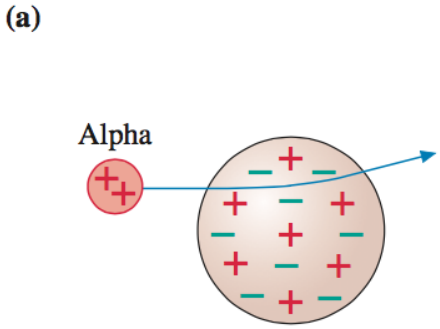
Αιωρούμενες σταγόνες λαδιού με φορτίο ακέραιο πολλαπλάσιο του $1{,}6 \times 10^{-19}$ Coulomb



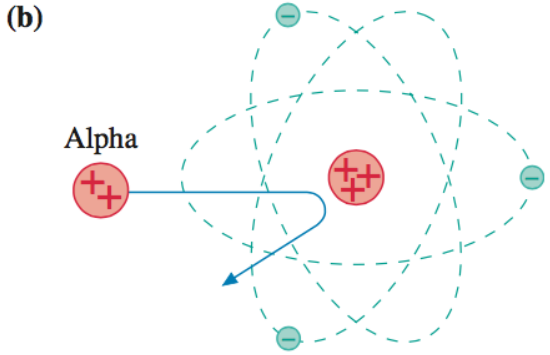
Rutherford 1909:

- **Ύπαρξη πυρήνα στο άτομο**
- Βομβαρδισμός φύλλου χρυσού με σωμάτια α
- («Ακτίνες α» και «Ακτίνες β» που εκπέμπονταν από κρυστάλλους ουρανίου είχαν ανακαλυφθεί μόλις το 1896 από τον Becquerel)
- «Πλανητικό μοντέλο»
- **Διάμετρος πυρήνα ~10fm**, ~10.000 φορές μικρότερη από διάμετρο ατόμου





The alpha particle is only slightly deflected by a Thomson atom because forces from the spread-out positive and negative charges nearly cancel.



If the atom has a concentrated positive nucleus, some alpha particles will be able to come very close to the nucleus and thus feel a very strong repulsive force.

eV

- Η κινητική ενέργεια που αποκτά ένα σωμάτιο με φορτίο ίσο με του ηλεκτρονίου όταν επιταχυνθεί σε χώρο με διαφορά δυναμικού ενός Volt
- 1 eV = 1.6×10^{-19} Joule

Πείραμα Rutherford

- Δέσμη από σωμάτια α ενέργειας 8.3 MeV χτυπούν φύλλο χρυσού. Πόση ταχύτητα έχουν τα σωμάτια;

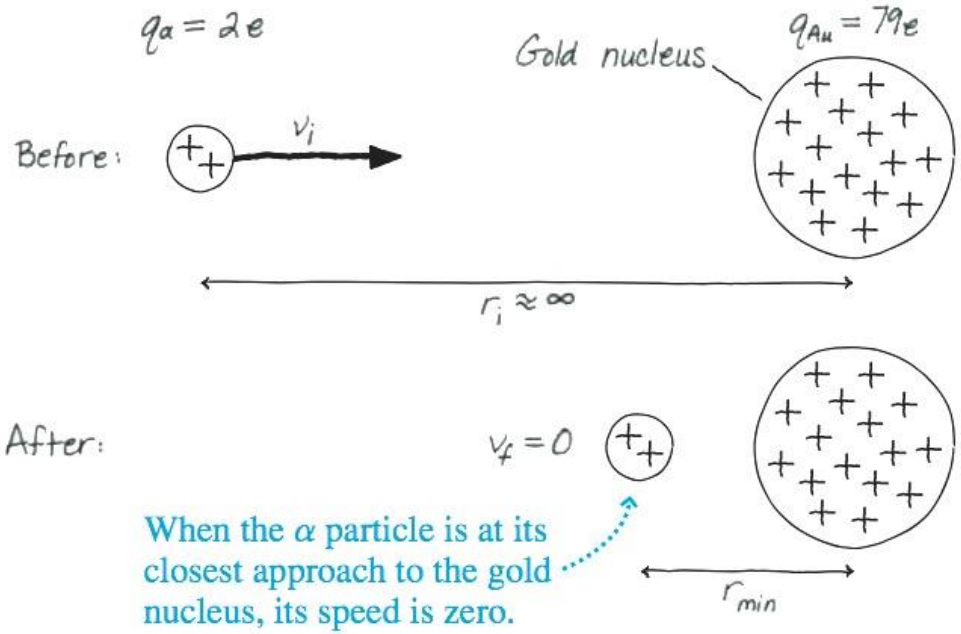
$$K = 8.3 \times 10^6 \text{ eV} \times \frac{1.60 \times 10^{-19} \text{ J}}{1.00 \text{ eV}} = 1.33 \times 10^{-12} \text{ J}$$

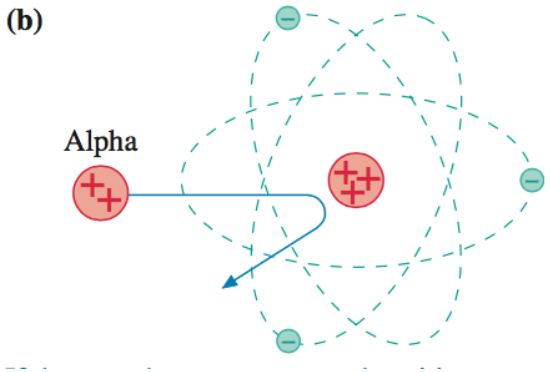
$$K = \frac{1}{2} m v^2 = 1.33 \times 10^{-12} \text{ J}$$

$$v = \sqrt{\frac{2K}{m}} = 2.0 \times 10^7 \text{ m/s}$$

Πείραμα Rutherford

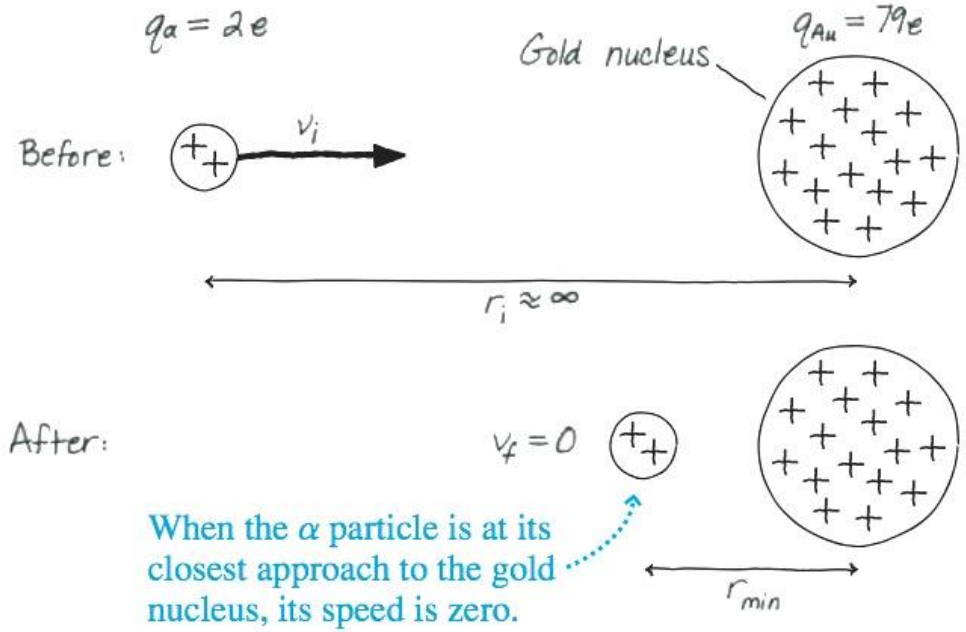
- Τα σωμάτια α με ταχύτητα 2x10^7 m/s χτυπούν φύλλο χρυσού. Πόσο κοντά στον πυρήνα μπορούν να φτάσουν;





$$K_f + U_f = K_i + U_i$$

Πείραμα Rutherford



$$K_f + U_f = K_i + U_i$$

$$0 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_\alpha q_{Au}}{r_{min}} = \frac{1}{2}mv_i^2 + 0$$

$$r_{min} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2q_\alpha q_{Au}}{mv_i^2}$$

$$r_{min} = 2.7 \times 10^{-14}\ \text{m}$$

$q_\alpha = 2e$

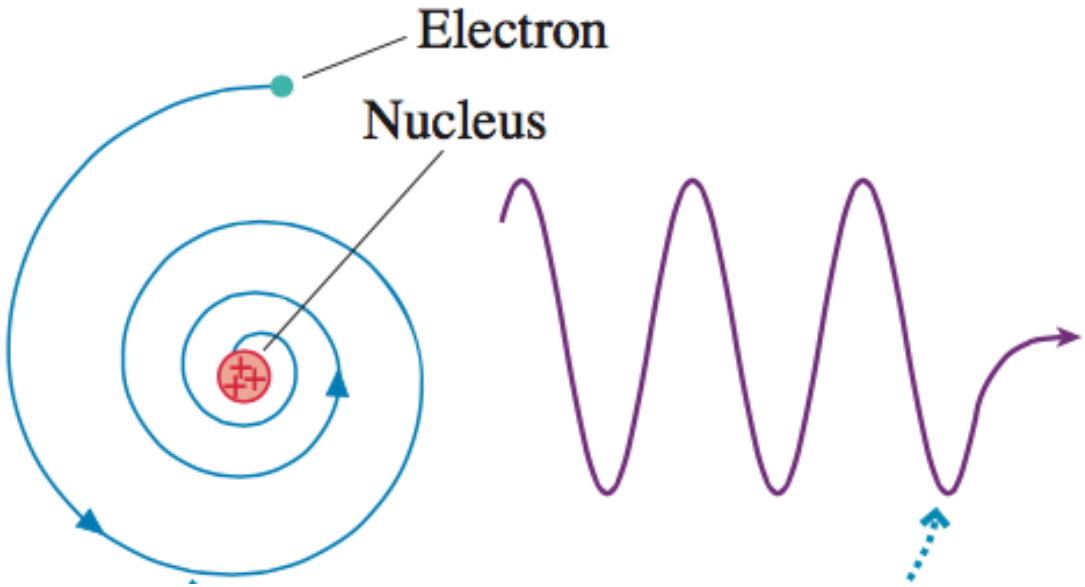
$q_{Au} = 79e$

$e = 1.6\ 10^{-19}$ Cb

$m_\alpha = 4 \times 1.66\ 10^{-27}$ Kg

$\varepsilon_0 = 8.85\ 10^{-12}$ F/m

Θεωρητικό αδιέξοδο

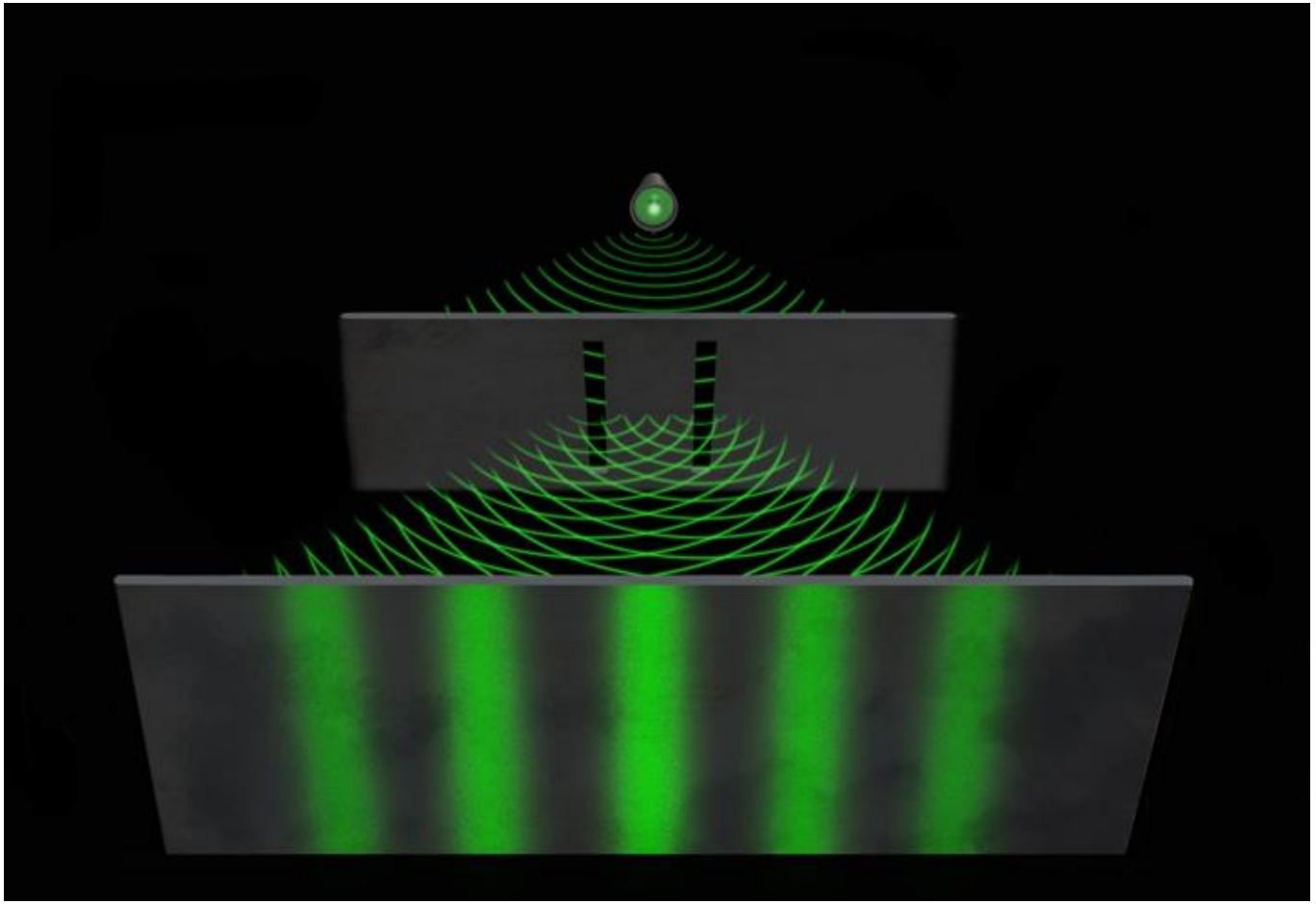


Το ηλεκτρόνιο κινείται σε κυκλικές (ή ακόμα και ελλειπτικές) τροχιές άρα επιταχύνεται. Επομένως εκπέμπει Ηλεκτρομαγνητική Ακτινοβολία, άρα χάνει ενέργεια, οπότε τελικά θα πέσει πάνω στον πυρήνα.

Η κλασική μηχανική του Newton και ο Ηλεκτρομαγνητισμός προβλέπουν κατάρρευση του ατόμου σε περίπου 1 μsec.

Φως: Κύμα ή σωματίδιο;

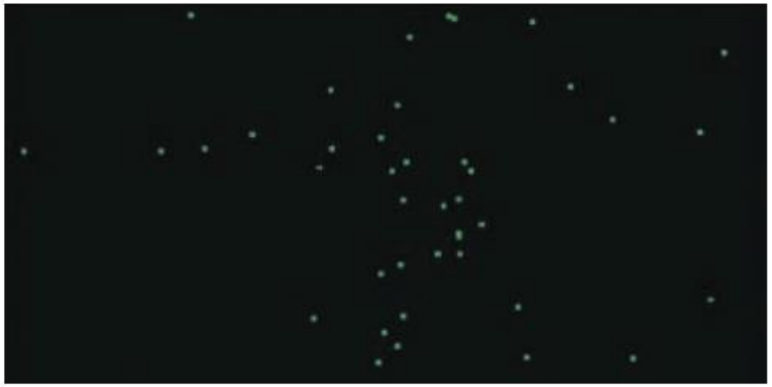
Πείραμα διπλής σχισμής



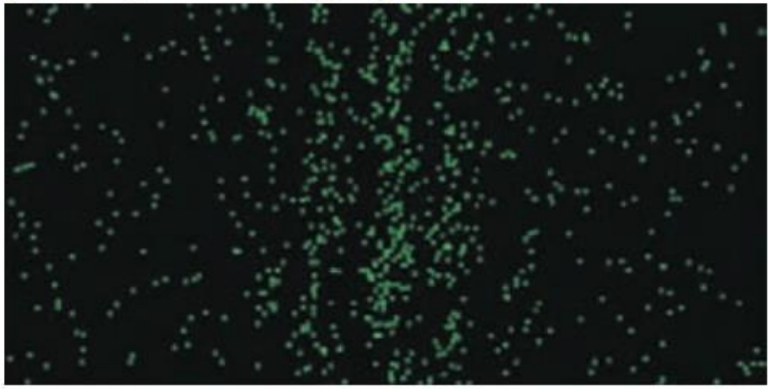
Φως: Κύμα ή σωματίδιο;

Πείραμα διπλής σχισμής με πολύ μικρή ένταση φωτός

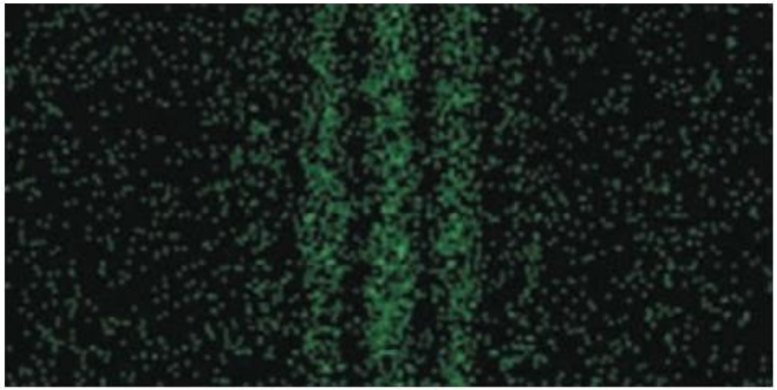
1. Εικόνα μετά από πολύ μικρό χρονικό διάστημα



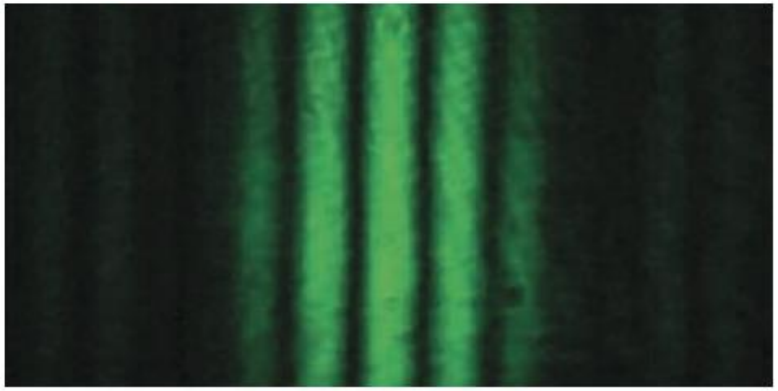
2. Εικόνα μετά από μεγαλύτερο χρονικό διάστημα



3. Η εικόνα εξακολουθεί να σχηματίζεται



4. Τελική εικόνα μετά από μεγάλο χρονικό διάστημα



Φως: Κύμα ή σωματίδιο;

- Όταν η ένταση είναι μικρή, το φως στο πείραμα συμπεριφέρεται ως σωμάτιο: φωτόνιο
- Πείραμα με τόσο μικρή ένταση φωτός ώστε να τα φωτόνια να περνούν ένα-ένα, οδηγεί πάλι σε φαινόμενα συμβολής. Το φωτόνιο συμβάλλεται με τι;
- Με τον εαυτό του! Άρα περνά και από τις δύο σχισμές! Το φωτόνιο είναι σωμάτιο & κύμα ταυτόχρονα

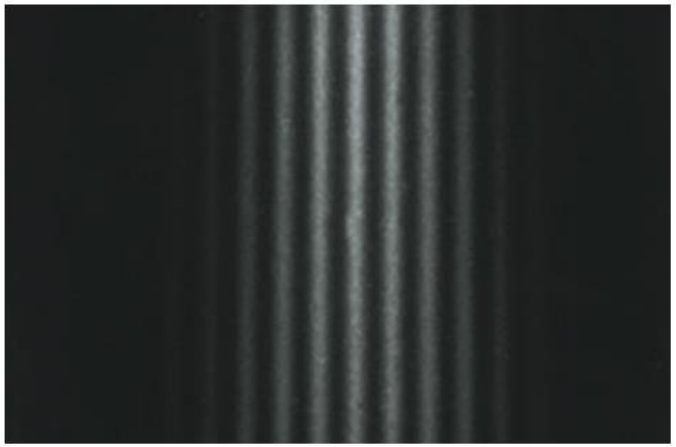
Φως: Άλλοτε κύμα & άλλοτε σωμάτιο

- Το φώς αποτελείται από διακριτές μονάδες χωρίς μάζα που ονομάζονται φωτόνια
- Κάθε φωτόνιο έχει ενέργεια $E=hf$ όπου f η συχνότητά του και $h=6.63\ 10^{-34}$ Joule sec (σταθερά Planck)
- Η υπέρθεση ικανού αριθμού φωτονίων έχει τα χαρακτηριστικά του κλασσικού ηλεκτρομαγνητικού κύματος.

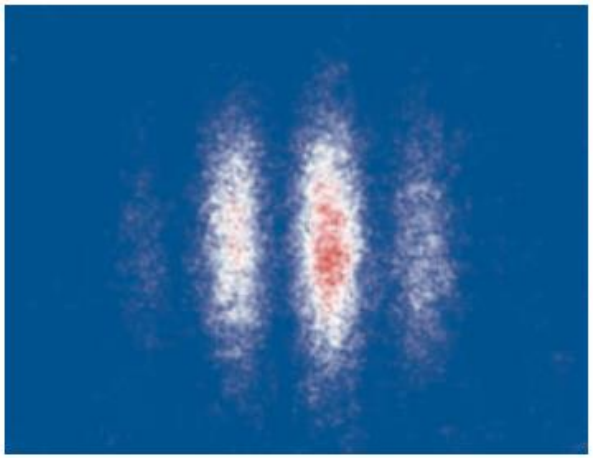
Μήπως και τα σωμάτια έχουν κυματικό χαρακτήρα;

- Μήκος κύματος De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$



Συμβολή ηλεκτρονίων

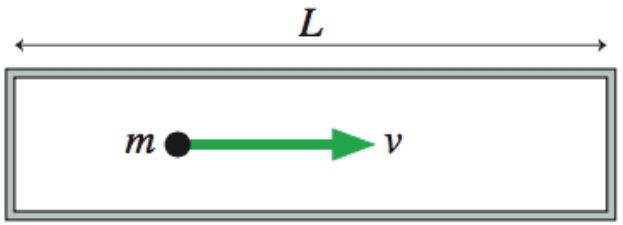


Συμβολή ατόμων

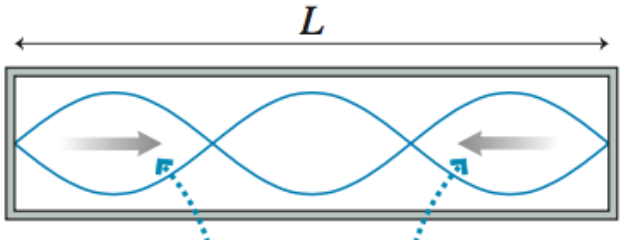
Σωμάτια περιορισμένα στο χώρο όπως τα κύματα

- Στάσιμα κύματα

Κλασικό σωματίδιο, ελαστικές σκεδάσεις αριστερά & δεξιά



Ανακλώμενο κύμα που δημιουργεί στάσιμο κύμα



$$\lambda_n = \frac{h}{mv} = \frac{2L}{n} \Rightarrow v_n = n\left(\frac{h}{2Lm}\right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

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

Κβαντισμός ενέργειας

Niels Bohr

- Μαθητής του Rutherford
- Σύνθεση των προηγουμένων ευρημάτων (δυϊσμός ύλης, κβάντωση ενέργειας)
- Διατύπωση αξιωμάτων

1ο αξίωμα του Bohr

- Το άτομο αποτελείται από έναν κεντρικό πυρήνα που περιέχει όλα τα θετικά φορτία και σχεδόν όλη τη μάζα του ατόμου.
- Τα ηλεκτρόνια κινούνται γύρω από τον πυρήνα σε ευσταθείς τροχιές.

2ο αξίωμα του Bohr

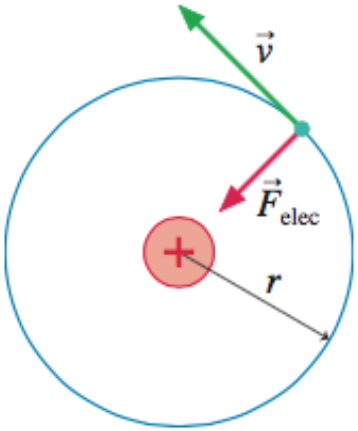
- Τα ηλεκτρόνια του ατόμου μπορούν να βρίσκονται μόνο σε συγκεκριμένες τροχιές ή ενεργειακά επίπεδα. Όταν τα τροχιακά ηλεκτρόνια είναι σε ευσταθή κατάσταση, εντός της συγκεκριμένης τροχιάς, δεν εκπέμπεται ακτινοβολία, παρά το ότι τα ηλεκτρόνια επιταχύνονται.

3ο αξίωμα του Bohr

- Εκπομπή ή απορρόφηση ακτινοβολίας από ένα άτομο έχουμε μόνο όταν ένα ηλεκτρόνιο μεταβαίνει από μια ευσταθή κατάσταση σε μια άλλη διαφορετικής ενέργειας.
- Η ενέργεια της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας (φωτόνια) δίνεται από την

$$E_{\text{φωτονίου}}=E_{\text{αρχική}}-E_{\text{τελική}}=hf$$

Το άτομο του Υδρογόνου κατά το πρότυπο Bohr (*Άτομο Bohr*)

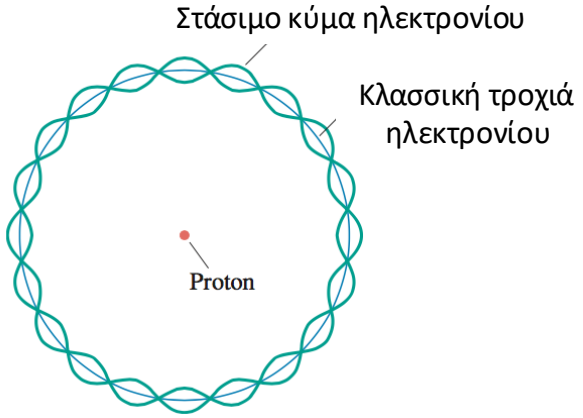


$$F_{elec} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \Rightarrow \boxed{v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mr}}$$

$$E = K + U = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_{\text{elec}}q_{\text{proton}}}{r} = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Στάσιμο κύμα προκύπτει όταν η συνολική διαδρομή (αφετηρία-προορισμός-αφετηρία) είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του λ, άρα

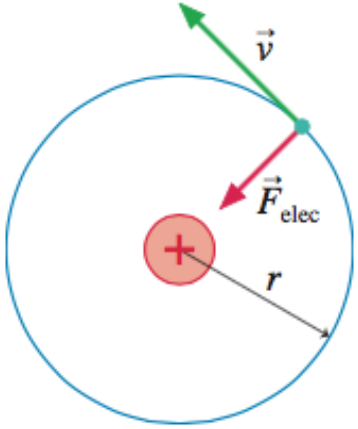
$2\pi r = n\lambda$ (n=1, 2, 3, …)



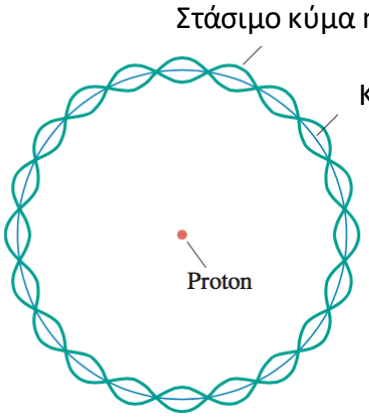
Όμως λόγω de Broglie, $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$

Άρα: $2\pi r = n\frac{h}{mv}$ οπότε $v_n = \frac{nh}{2\pi mr}$ ή $\boxed{v_n = \frac{n\hbar}{mr}}$

Το άτομο του Υδρογόνου κατά το πρότυπο Bohr (*Άτομο Bohr*)



$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mr}$$



$$v_n = \frac{n\hbar}{mr}$$

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$a_{\text{B}} = \text{Bohr radius} \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 5.29 \times 10^{-11}\ \text{m} = 0.0529\ \text{nm}$$

$$r_n = n^2 a_{\text{B}} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Η ακτίνα είναι κβαντισμένη

$$E_n = -\frac{13.60\ \text{eV}}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Η ενέργεια είναι κβαντισμένη

$$L = n\hbar \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Η στροφορμή είναι κβαντισμένη

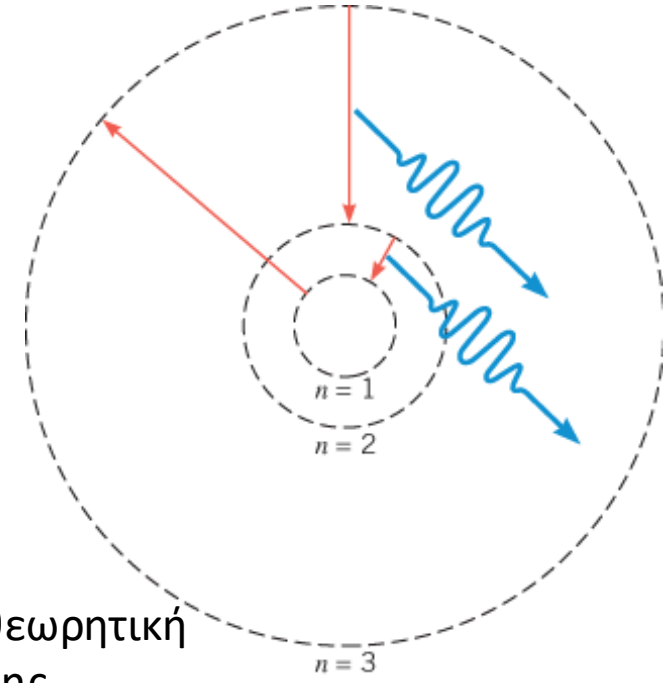
Άτομο Bohr: Φάσμα εκπομπής Η

$$f = \frac{\Delta E_{\text{atom}}}{h} = \frac{E_n - E_m}{h}$$

$$f = \frac{1}{h}\left\{\left[-\frac{1}{n^2}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{2a_{\text{B}}}\right)\right] - \left[-\frac{1}{m^2}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{2a_{\text{B}}}\right)\right]\right\}$$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{2ha_{\text{B}}}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

$$\lambda_{n\to m} = \frac{c}{f} = \frac{8\pi\epsilon_0 hca_{\text{B}}/e^2}{\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)}$$



Επί τέλους, η θεωρητική επιβεβαίωση της εμπειρικής γνώσης (Balmer)!

«Δυστυχώς», το πρότυπο του Bohr μπορεί να εξηγήσει επαρκώς μόνο το άτομο του Υδρογόνου….

Κβαντική Μηχανική

Werner Heisenberg

Αρχή Απροσδιοριστίας

(ή αβεβαιότητας)

Εάν μετράμε τη θέση ενός σωματίου με αβεβαιότητα Δ*x* και ταυτόχρονα μετράμε την ορμή του με αβεβαιότητα *Δp*, τότε

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

υπάρχει όριο στην ακρίβεια που μπορούμε να μετρήσουμε την ενέργεια ΔΕ ενός συστήματος, αν το σύστημα παραμένει σε μια δεδομένη ενεργειακή κατάσταση για χρόνο Δt.

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Κβαντική Μηχανική

Erwin Schrödinger.

- Εξίσωση Schrödinger (μια διάσταση)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

- Κάθε σωματίδιο χαρακτηρίζεται από μια κυματοσυνάρτηση ψ(x)
- $|\psi(x)|^2$ δίνει την πιθανότητα να εντοπιστεί το σωματίδιο σε μια περιοχή εύρους δx στη θέση x

Κβαντική θεωρία των τροχιακών ηλεκτρονίων

- Για να είναι επιλύσιμη η εξίσωση Schrödinger για το άτομο του Υδρογόνου πρέπει να ικανοποιούνται οι εξής συνθήκες:
- Ενέργεια ατόμου (n: κύριος κβαντικός αριθμός)

$$E_n = -\frac{1}{n^2}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{2a_B}\right) = -\frac{13.60\ \text{eV}}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

- Τροχιακή στροφορμή ηλεκτρονίου
  (l: τροχιακός κβαντικός αριθμός)

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad l = 0, 1, 2, 3, \ldots, n-1$$

- z-συνιστώσα στροφορμής ηλεκτρονίου
  (m: μαγνητικός κβαντικός αριθμός)

$$L_z = m\hbar \qquad m = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l$$

Κβαντική θεωρία των τροχιακών ηλεκτρονίων

- Επί πλέον, για να εξηγηθεί η συμπεριφορά ατόμων Υδρογόνου σε μαγνητικά πεδία (πείραμα Stern-Gerlach όπου τα ηλεκτρόνια αποδεικνύεται να εμφανίζουν μαγνητική ροπή και άρα ιδιοστροφορμή), απαιτείται ένας ακόμα κβαντικός αριθμός, ο κβαντικός αριθμός του spin
- z-συνιστώσα ιδιοστροφορμής ηλεκτρονίου (spin)
  (m_s: κβαντικός αριθμός spin)

$$S_z = m_s \hbar \qquad m_s = +\frac{1}{2} \text{ or } -\frac{1}{2}$$

Οι (τέσσερις) κβαντικοί αριθμοί

Κύριος κβαντικός αριθμός

- n: 1, 2, 3, …, n

Τροχιακός κβαντικός αριθμός

- l: 0, 1, 2, 3, …, n-1

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός

- m: -l, -l+1, …, 0, … l-1, l

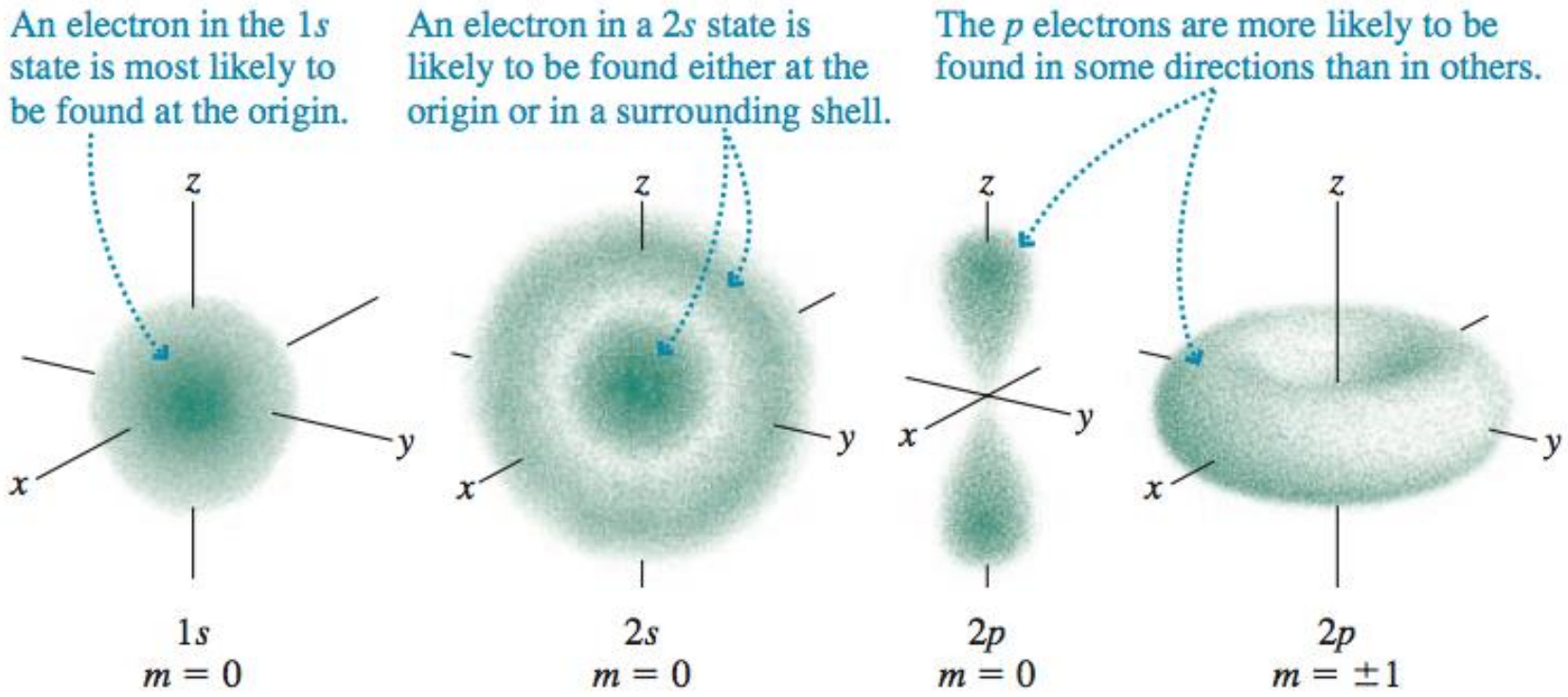
Κβαντικός αριθμός spin

- m_s: -1/2, +1/2

TABLE 41.1 Symbols used to represent quantum number l

l	Symbol
0	s
1	p
2	d
3	f

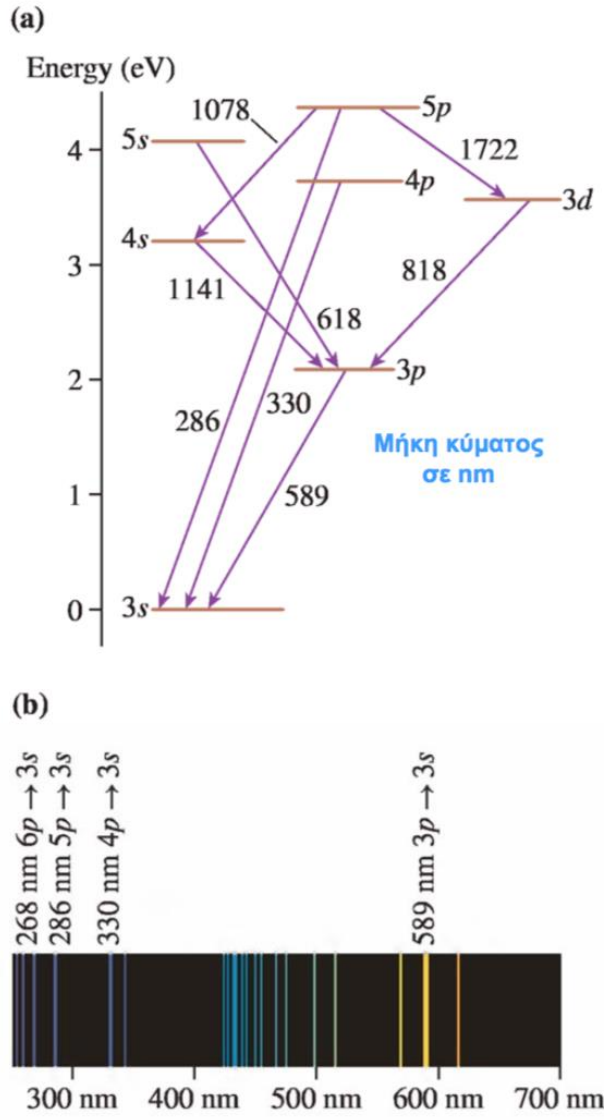
Πυκνότητες πιθανότητας (Η)



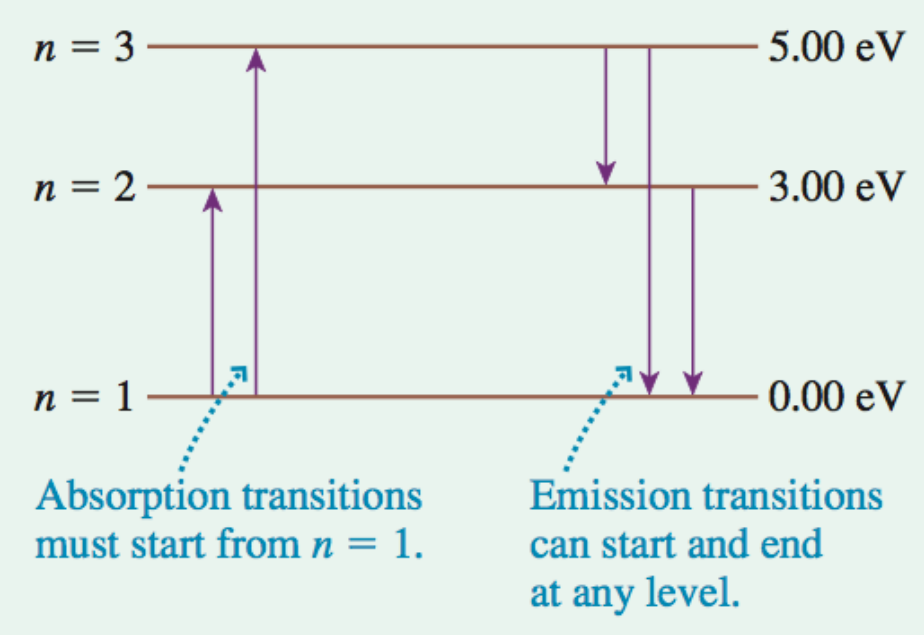
Φάσματα εκπομπής

- Μόνο στο άτομο του Υδρογόνου οι ενεργειακές στάθμες εξαρτώνται αποκλειστικά από τον κύριο κβαντικό αριθμό *n*

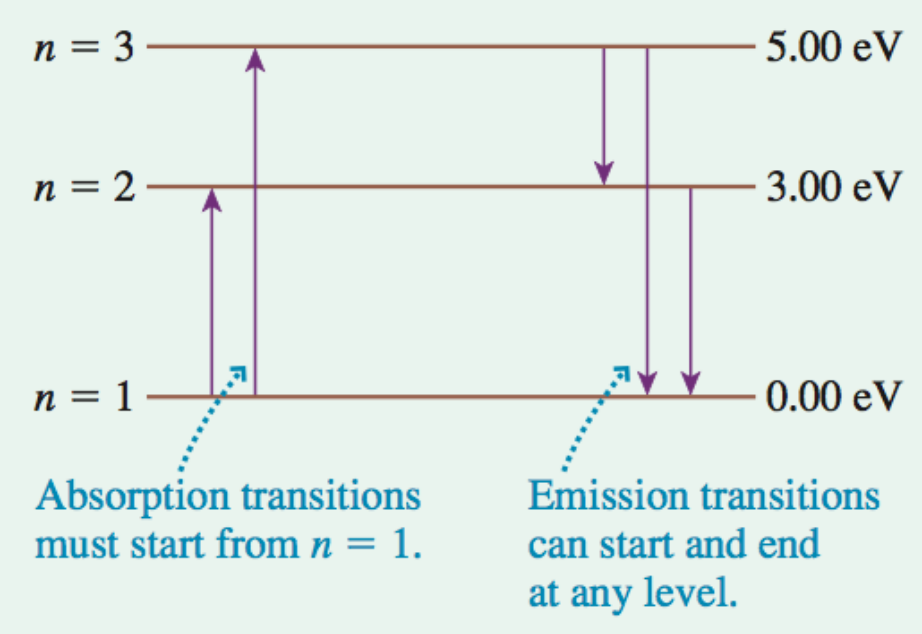
- Σε όλα τα υπόλοιπα στοιχεία οι ενεργειακές στάθμες εξαρτώνται από:
  - Τον κύριο κβαντικό αριθμό ***n***
  - Τον τροχιακό κβαντικό αριθμό ***l***



- Ένα **άτομο** έχει ενεργειακές στάθμες E1=0eV, E2=3eV, E3=5eV. Ποιά μήκη κύματος παρατηρούνται στο φάσμα απορρόφησης και εκπομπής αυτού του ατόμου;



Η (βασική) ενεργειακή στάθμη E1 του ατόμου ορίζεται εδώ ίση με 0 eV κατά σύμβαση, για απλοποίηση των υπολογισμών



- Απορρόφηση 1 προς 2: ΔE=3eV

f=ΔE/h=3x1.6x10^{-19} Joule/6.63 10^{-34} Joule sec =

=0.723x10^{15}Hz

λ=c/f=(3x10^{8} m/s)/(0.723x10^{15}/s)=415nm (μπλε)

Απαγορευτική Αρχή του Pauli

- Δε μπορούν να υπάρξουν δύο ηλεκτρόνια του ίδιου ατόμου που να έχουν την ίδια ακριβώς τετράδα κβαντικών αριθμών
- Για να μοιραστούν δύο ηλεκτρόνια το ίδιο τροχιακό πρέπει να έχουν αντίθετο spin

Wolfgang Pauli

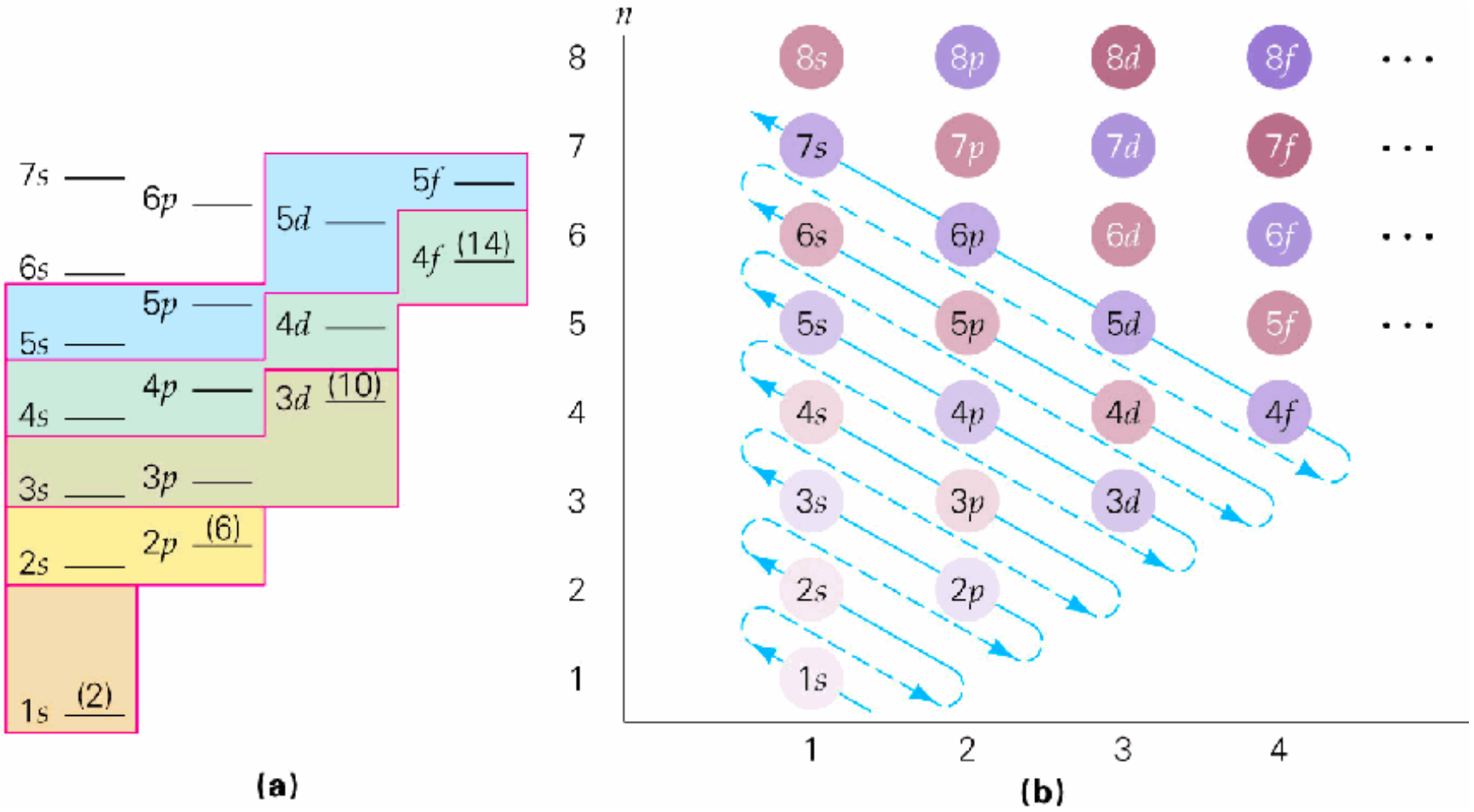
Απαγορευτική Αρχή του Pauli

- Επιτρεπόμενος αριθμός ηλεκτρονίων σε κάθε φλοιό:

$$2n^2$$

- Επιτρεπόμενος αριθμός ηλεκτρονίων σε κάθε υπο-φλοιό:

$$2(2l+1)$$

Wolfgang Pauli

Συμπλήρωση τροχιακών