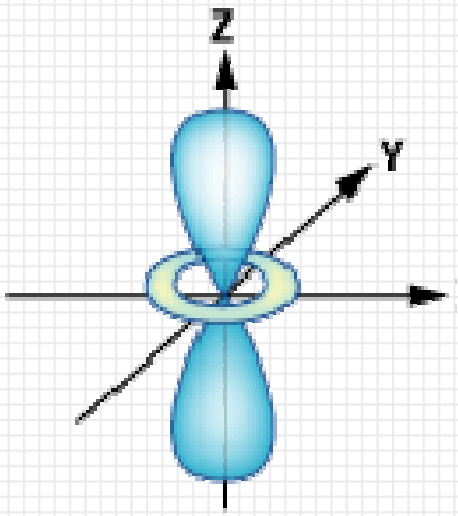
Atómový obal, jadro



Heisenbergov princíp neurčitosti.
Bohrov model atómu vodíka.
Kvantová mechanika, Schrödingerova rovnica.
Kvantové čísla a ich význam.
Periodická sústava prvkov.
Jadro atómu.

Heisenbergove relácie (princíp) neurčitosti

Kvantový aspekt a zavedenie Planckovej konštanty poukazuje na rozdiely medzi klasickou a kvantovou fyzikou.
Kým v klasickej fyzike nie je žiadne ohraničenie určenia presnosti polohy, tak v kvantovej fyzike mikročastíc je potrebné uvažovať tzv.
Heisenbergove relácie neurčitosti:

$$\boxed{\Delta p \Delta x \geq \hbar}$$

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$$
$$\Delta p_y \Delta y \geq \hbar \quad \text{(v troch rozmeroch)}$$
$$\Delta p_z \Delta z \geq \hbar$$

Pr. Častica s hmotnosťou $m = 10^{-15}$ *kg,* $\Delta x = 10$ *nm.*
$\Delta v = 10^{-9}$ ms^{-1}.

$$\frac{\Delta E}{v} v \Delta t \geq \hbar$$

Pr. Elektrón s hmotnosťou $m = 9.10^{-31}$ *kg,* $\Delta x = 0{,}1$ *nm.*
$\Delta v = 10^{6}$ ms^{-1}.

$$\boxed{\Delta E \Delta t \geq \hbar}$$

Bohrov model atómu

Teória atómu vodíka – Niels Bohr (1913). Teória je založená na predpokladoch:

1) Elektrón sa pohybuje po kruhovej dráhe s polomerom r okolo protónu.

$$F_{odstredivá} = F_{elektrická} \Rightarrow \boxed{m\frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}} \qquad (1)$$

2) Elektrón sa pohybuje po takých dráhach, ktoré spĺňajú kvantovú podmienku.

$$mvr = n\frac{h}{2\pi}$$

n … kvantové číslo dráhy (2)

3) Elektrón pri pohybe po takýchto dráhach nevyžaruje ani neprijíma energiu.

4) Pri preskoku z jednej dovolenej hladiny na druhú sa vyžiari, alebo pohltí fotón s energiou $h\nu$.

$$h\nu = U_2 - U_1 \qquad (3)$$

Bohrov model atómu (pokračovanie)

U_2 a U_1 sú energie na príslušných kvantových dráhach. Z rovníc (1) a (2) dostávame pre polomer prvej dráhy

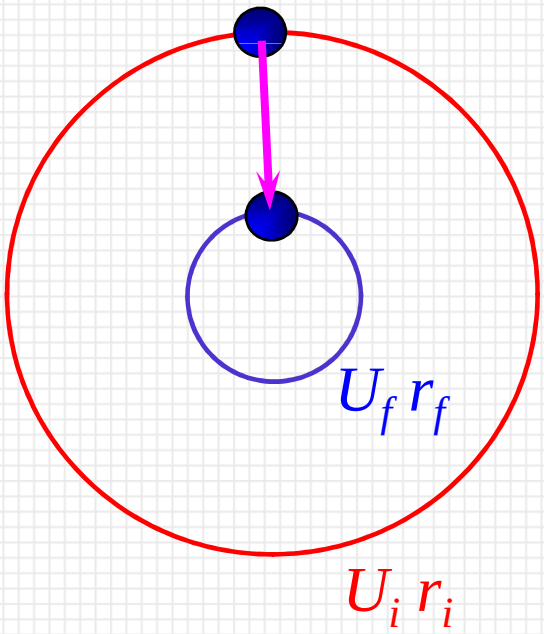
$$r_1 = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2} = 0{,}53.10^{-10}\, m \quad \Rightarrow \quad r_n = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2}$$

Celková energia elektrónu na n-tej dráhe je:

$$U_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_n} \quad \xrightarrow{\text{po dosadení za } r_n} \quad \boxed{= -\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2}}$$

Určíme frekvenciu pri preskoku elektrónu.

$$\nu = \frac{U_i - U_f}{h} \quad \Rightarrow \quad = \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$



Čiarové spektrá z Bohrovho modelu

Prechod medzi stacionárnymi stavmi je spojený s určitou spektrálnou čiarou. Vlnová dĺžka spektrálnej čiary je daná nasledovne:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}\left(\frac{1}{n_f^2 - n_i^2}\right)$$

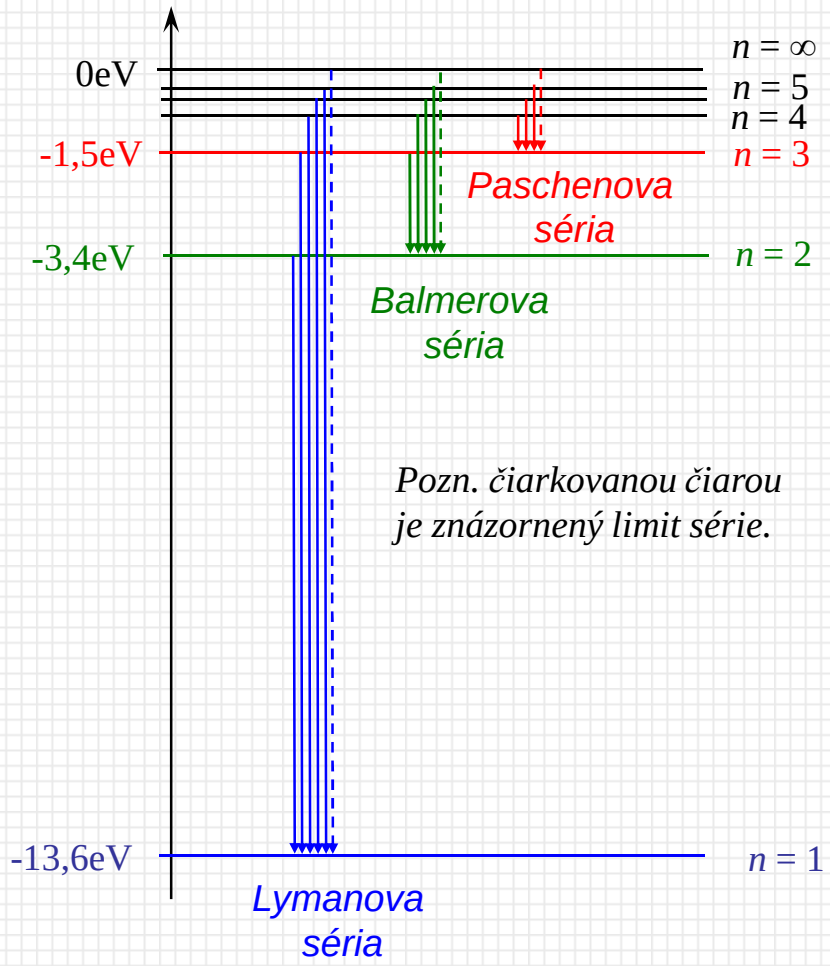
Rydbergova konštanta:

$$R_H = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{n_f^2 - n_i^2}\right)$$

Balmerova séria je v oblasti viditeľného spektra:

E_3-E_2 = 1,90eV (652nm)
E_4-E_2 = 2,55eV (486nm)
E_5-E_2 = 2,86eV (434nm)
E_6-E_2 = 3,02eV (410nm)
E_6-E_2 = 3,12eV (397nm)



Bohrov model vs. kvantová mechanika

Bohrov model je funkčný len pre najjednoduchší atóm s jedným elektrónom na kruhovej dráhe. V prípade viacelektrónových atómov je nepresný. Tiež BM považuje elektrón za bodovú časticu pohybujúcu sa po dráhe. Pojem dráhy v mikrofyzike podľa Heisenberga nemá zmysel.

Vyvinutie všeobecnejšej teórie – kvantová mechanika, základ je Schrödingerova rovnica

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

Časová S.r.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi$$

Stacionárna S.r.

$$x, y, z - r,\ \varphi,\ \upsilon$$

$$\Updownarrow$$

kvantové čísla n, l, m

n = 0, 1, 2, 3,	*hlavné kvantové číslo*
l = 0, 1, 2, ..., n-1	*vedľajšie kv. číslo*
m = 0, ±1, ±2, ... ±l	*magnetické kv. číslo*

Kvantové čísla, výberové pravidlá

l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6,
s, p, d, f, g, h

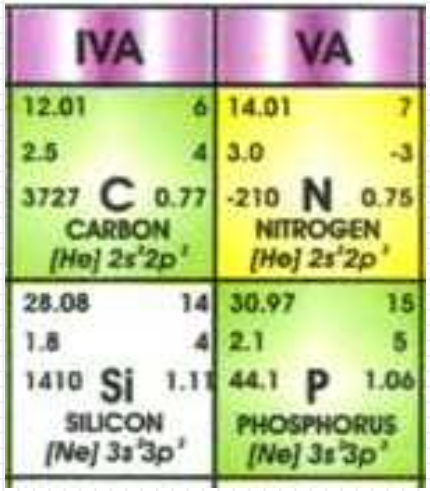
s = +1/2
-1/2

spinové kvantové číslo

	s	p	d	f	g
n = 1	1s				
n = 2	2s	2p			
n = 3	3s	3p	3d		
n = 4	4s	4p	4d	4f	
n = 5	5s	5p	5d	5f	5g

Výberové pravidlá: Elektróny môžu preskakovať len medzi takými stavmi, ktorých kvantové číslo sa líši aspoň o 1.

Pauliho princíp: V atóme nemôžu existovať dva elektróny, ktoré by boli charakterizované rovnakým súborom hodnôt kvantových čísel n, l, m, s.



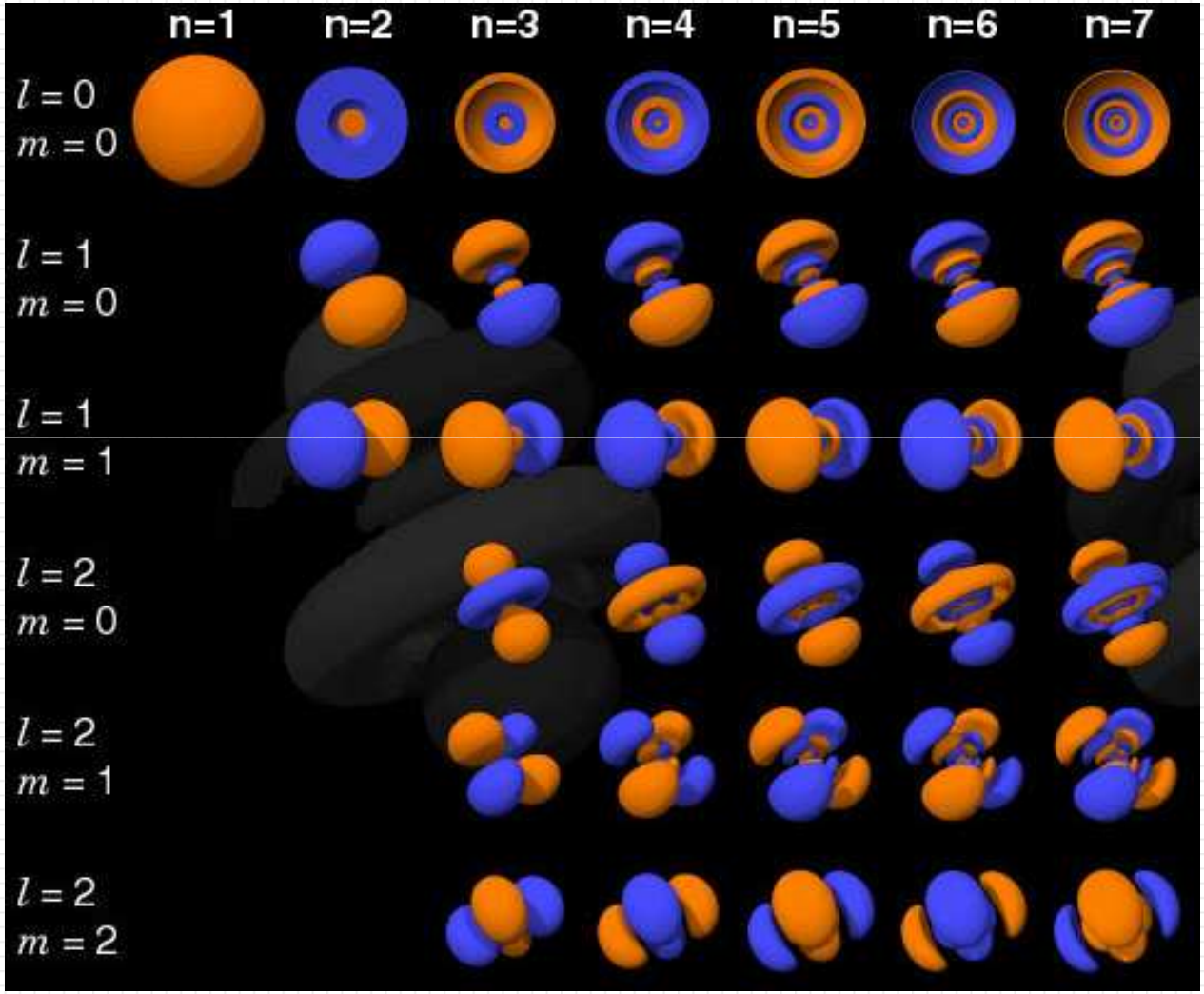
$_{6}C$ $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$

n l

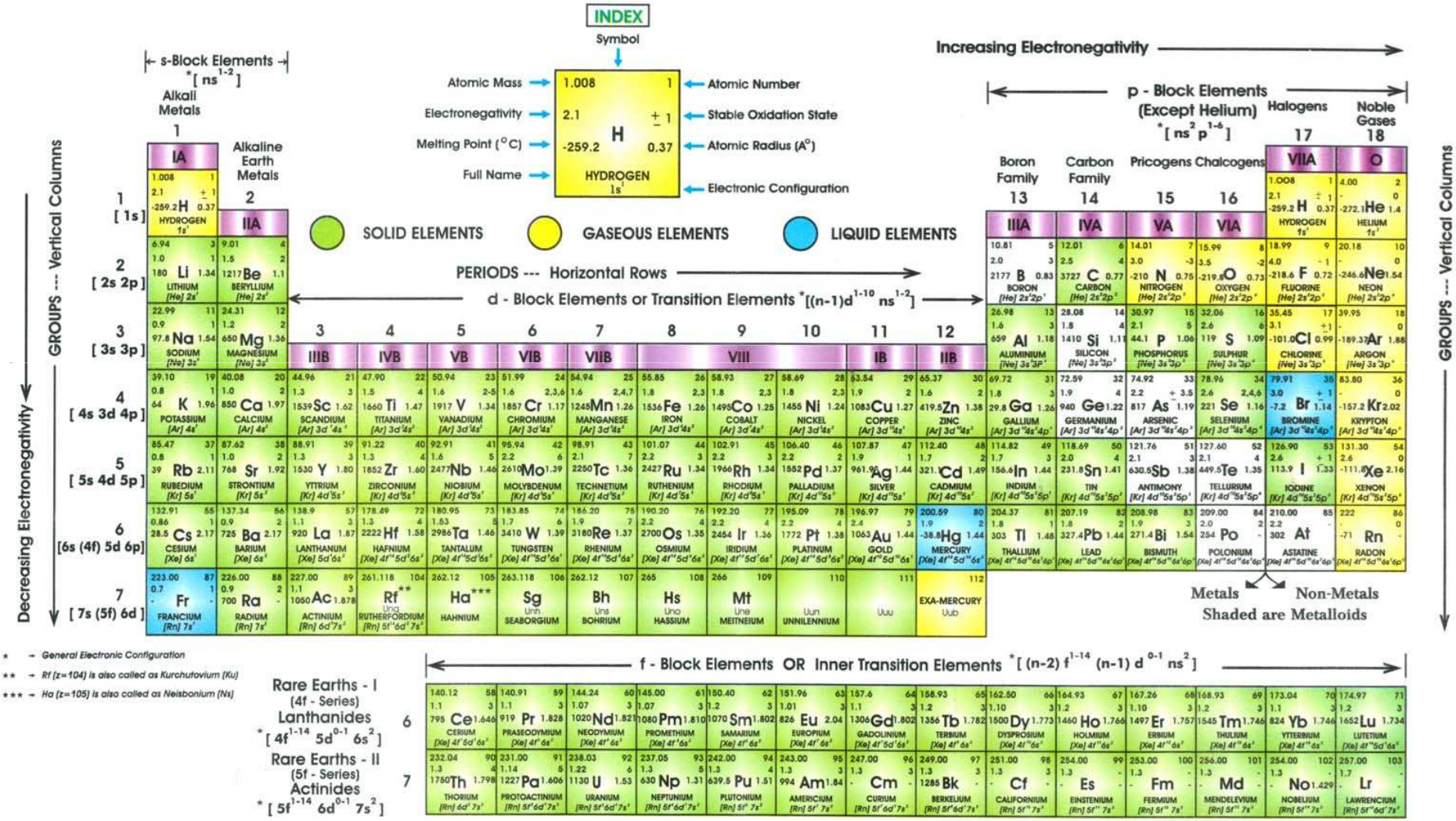
s … 2e
p … 6e
d … 10e
f … 14e

$_{15}P$ $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^3$

Orbitaly s, p, d



Periodická tabuľka



Values are taken from Lange's Handbook of Chemistry
12th Edition, McGraw Hill Book Company, New York
Edited by: John A. Dean

Atómové jadro

		náboj	hmotnosť	
jadro	protóny	+e	$m_p = 1{,}6725.10^{-27}$ kg	nukleóny
	neutróny	0	$m_n = 1{,}6748.10^{-27}$ kg	

Hmotnostné číslo ... počet nukleónov v jadre

$$^{A}_{Z}X$$

Atómové číslo ... počet protónov v jadre

Počet neutrónov $N=A-Z$

Izotopy sú prvky s rovnakým Z ale rôznym A.