

*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:

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar$$

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$$

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

$$\Delta p_z \Delta z \geq \hbar$$

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 $m = 9 \cdot 10^{-31}$ kg, $\Delta x = 0,1$ nm.
 $\Delta v = 10^6$ ms⁻¹.

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

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.

$$F_{\text{odstredivá}} = F_{\text{elektrická}} \quad \longrightarrow \quad m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (1)$$

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

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad n \dots \text{kvantové číslo dráhy} \quad (2)$$

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

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

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

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

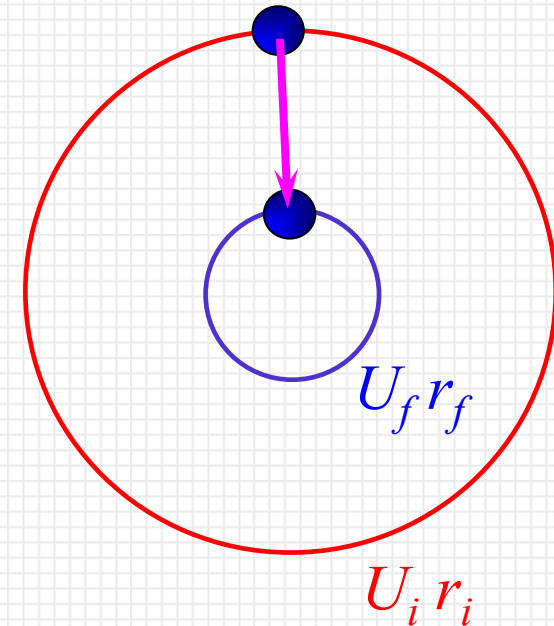
$$r_1 = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad \longrightarrow \quad r_n = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2}$$

Celková energia elektrónu na n -tej dráhe je:

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

Určíme frekvenciu pri preskoku elektrónu.

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



Čiarové spektrá z Bohrovho modelu

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

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

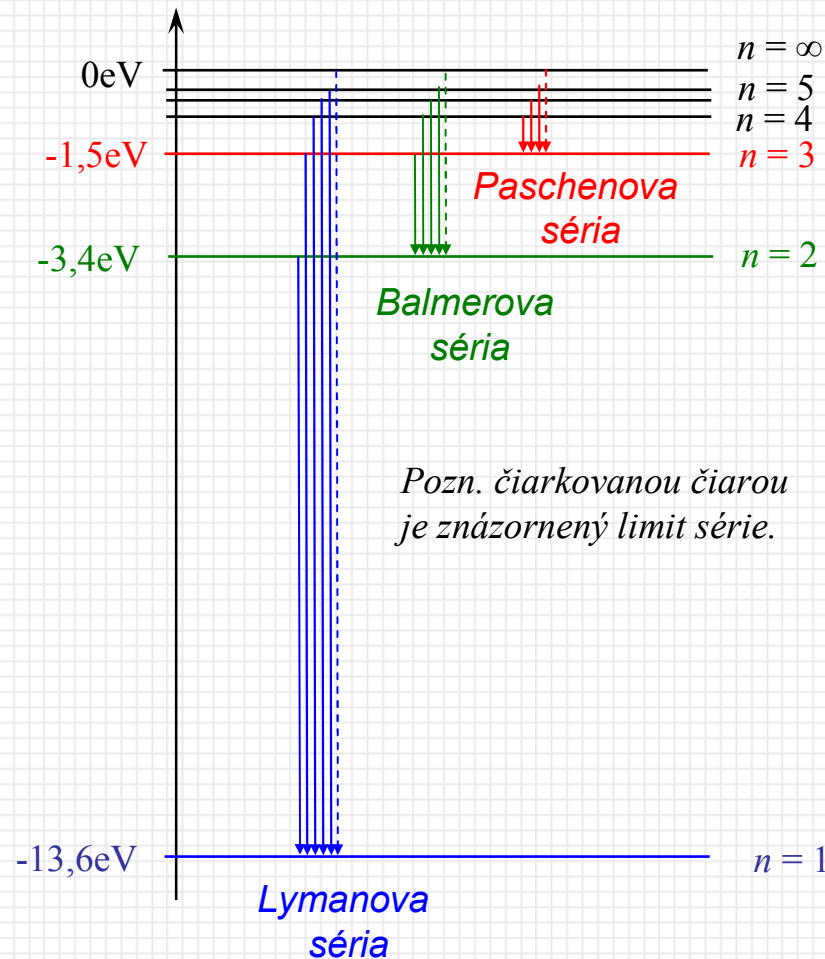
Rydbergova konštanta:

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

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

Balmerova séria je v oblasti viditeľného spektra:

- $E_3 - E_2 = 1,90\text{eV}$ (652nm)
- $E_4 - E_2 = 2,55\text{eV}$ (486nm)
- $E_5 - E_2 = 2,86\text{eV}$ (434nm)
- $E_6 - E_2 = 3,02\text{eV}$ (410nm)
- $E_\infty - E_2 = 3,12\text{eV}$ (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

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

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

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

Časová S.r.

Stacionárna S.r.

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



kvantové čísla

n, l, m

$n = 0, 1, 2, 3,$ hlavné kvantové číslo

$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ vedľajšie kv. číslo

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ magnetické kv. číslo

Kvantové čísla, výberové pravidlá

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6,$$

$$s, p, d, f, g, h$$

$$s = +1/2 \quad \text{spinové kvantové číslo}$$

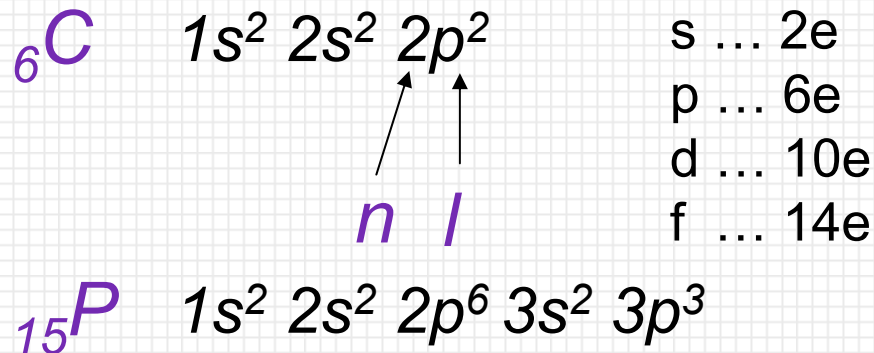
$$-1/2$$

	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

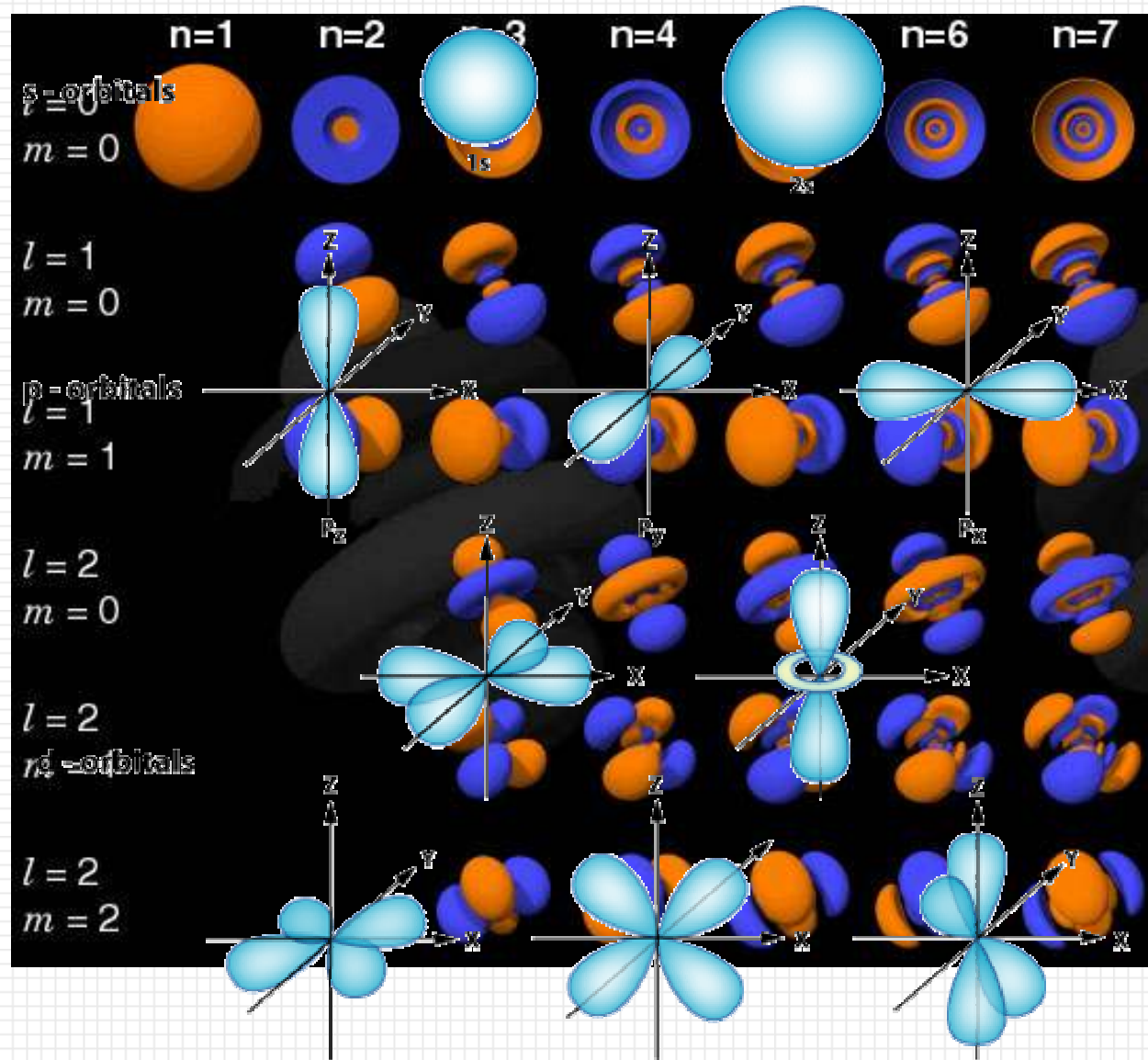
Výberové pravidlá: Elektróny môžu preskakovať len medzi takými stavmi, ktorých kvantové číslo sa líši aspoň o 1.

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

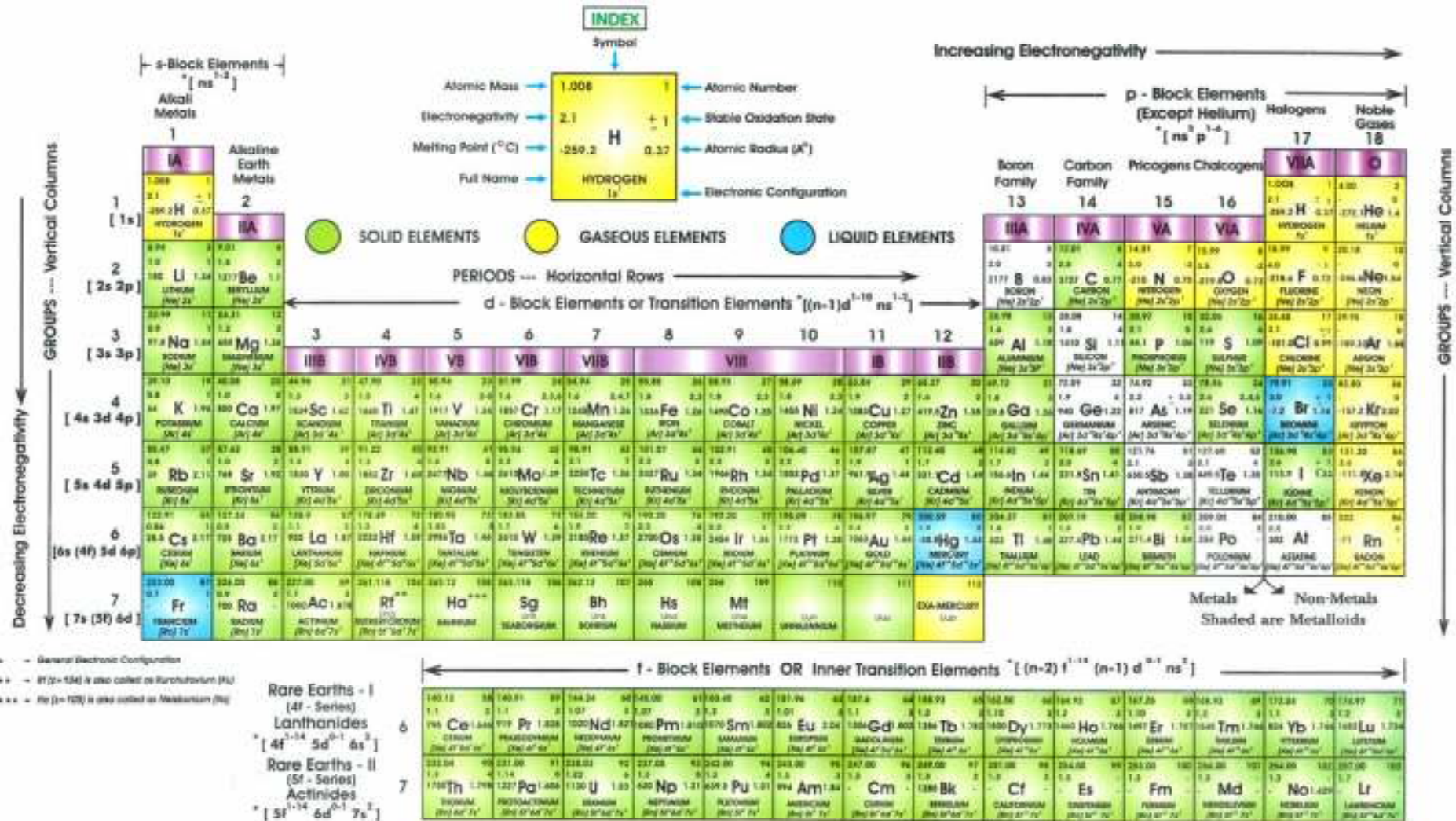
IVA		VA	
12.01	6	14.01	7
2.5	4	3.0	-3
3727 C 0.77		-210 N 0.75	
CARBON		NITROGEN	
[He] 2s ² 2p ²		[He] 2s ² 2p ³	
28.08	14	30.97	15
1.8	4	2.1	5
1410 Si 1.11		44.1 P 1.06	
SILICON		PHOSPHORUS	
[Ne] 3s ² 3p ²		[Ne] 3s ² 3p ³	



Orbitaly s, p, d



Periodická tabuľka

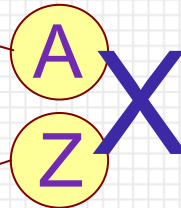


Values are taken from Lange's Handbook of Chemistry, 12th Edition, McGraw-Hill Book Company, New York, Edited by: John A. Dean

Atómové jadro

		náboj	hmotnosť	
jadro	protóny	+e	$m_p = 1,6725 \cdot 10^{-27} \text{kg}$	} nukleóny
	neutróny	0	$m_n = 1,6748 \cdot 10^{-27} \text{kg}$	

Hmotnostné číslo ... počet nukleónov v jadre



Atómové číslo ... počet protónov v jadre

Počet neutrónov $N = A - Z$

Izotopy sú prvky s rovnakým Z ale rôznym A .