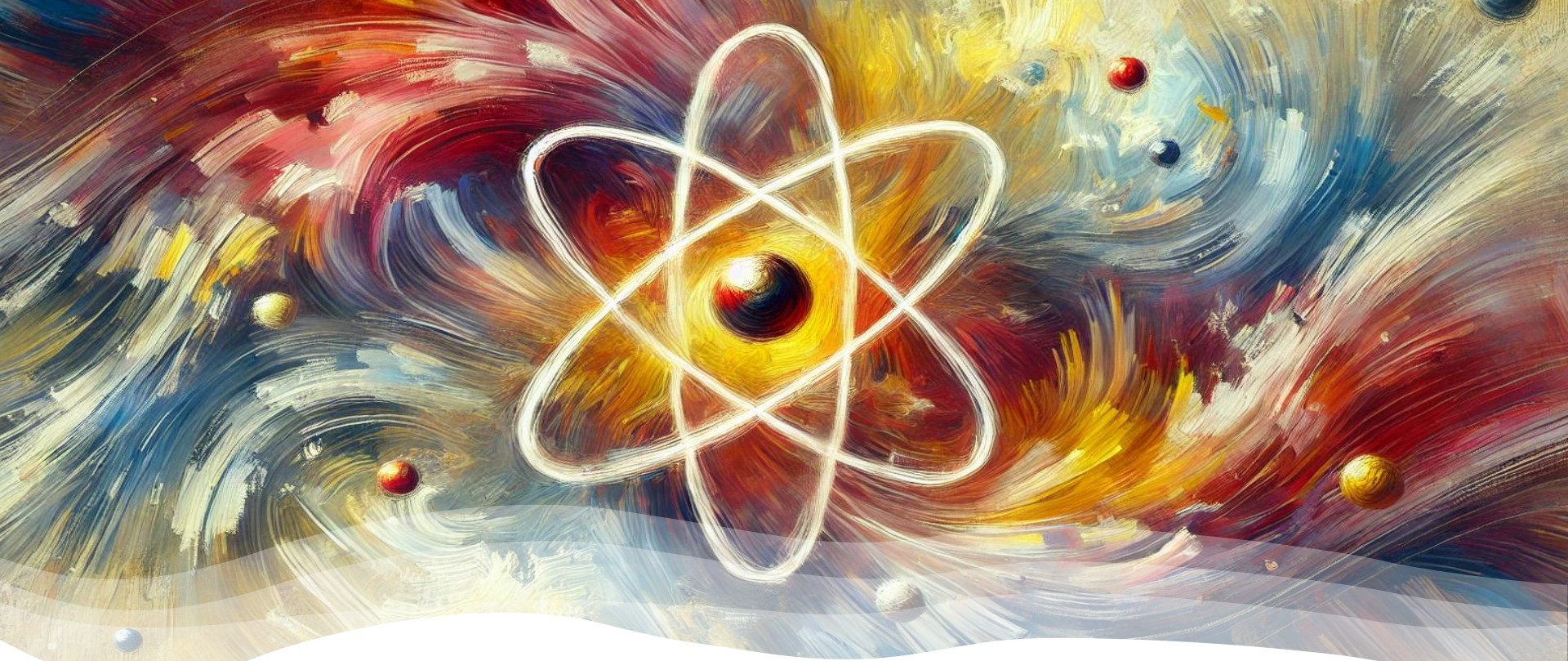


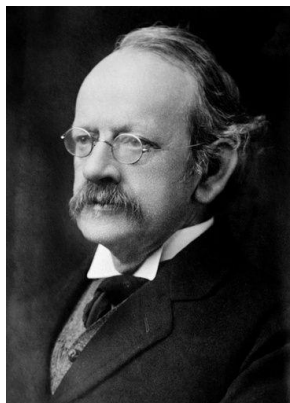


Atom to podstawowy budulec materii, zbudowany z cząstek elementarnych – protonów, neutronów oraz elektronów.

Podstawy fizyki atomu

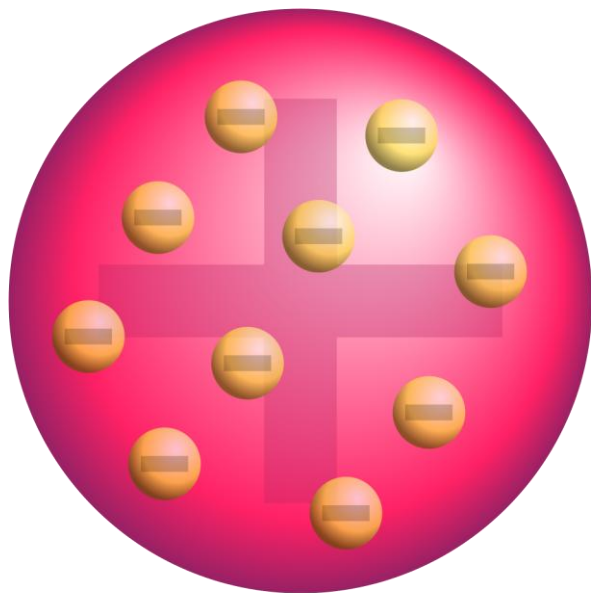
Katarzyna Gwóźdź

Model atomu Thompsona (1904)



Joseph John Thomson
(1856-1940) nagroda
Nobla z fizyki w 1906 za
odkrycie elektronu

Słowo atom pochodzi z greckiego
 $\alpha\tau\omicron\mu\omicron\varsigma$ – átomos (od α -, „nie-” + $\tau\acute{\epsilon}\mu\nu\omega$ –
temno, „ciąć”), oznaczającego coś,
czego nie da się przeciąć ani podzielić



Pierwszy model atomu

„Ciasto z rodzynekami”

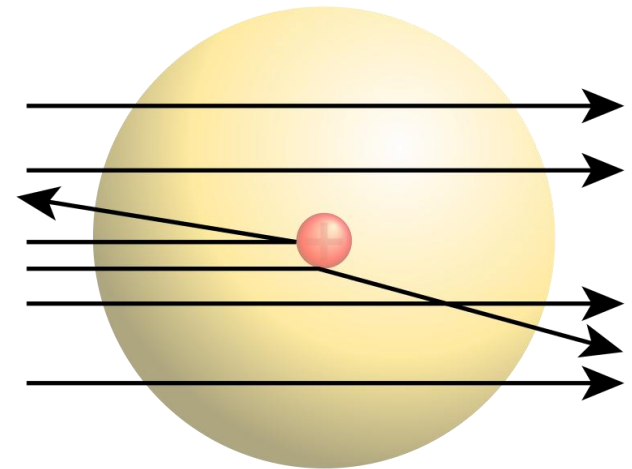
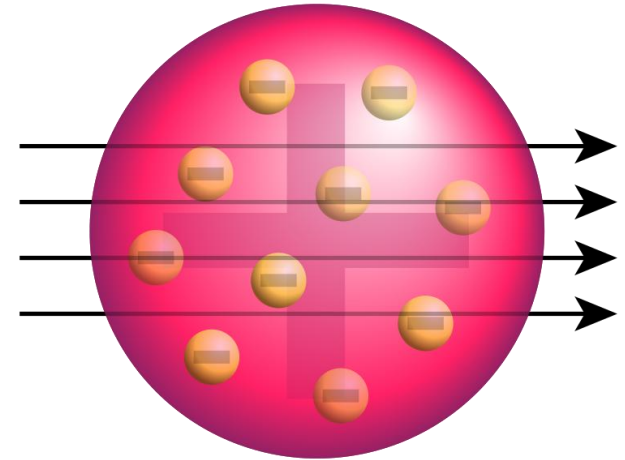
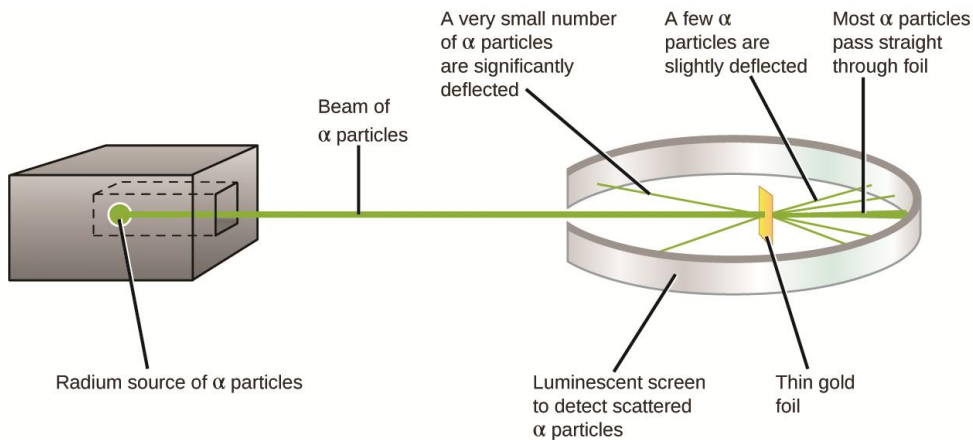
Atom został podzielony

Doświadczenie Rutherforda (1909)

Atomy helu (cząstki α) uderzają w złotą folię

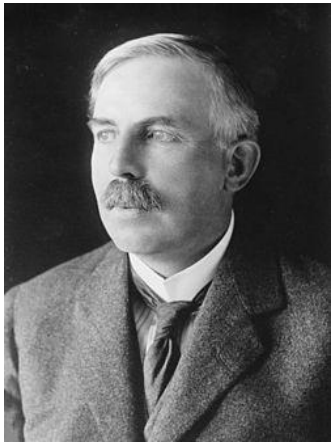
Wg modelu Thompsona powinny przechodzić bez zmiany kierunku

Część zmieniała kierunek, część się odbijała

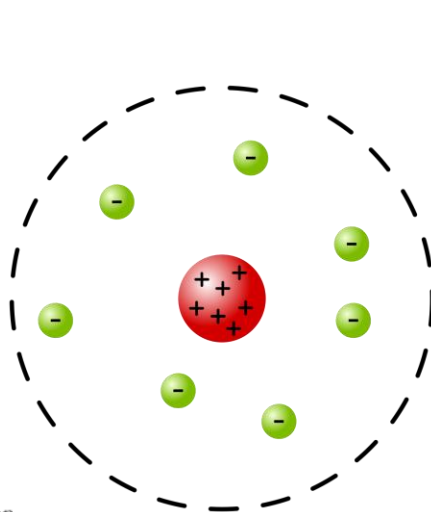


Autorstwa Drawn by User:Fastfission in Illustrator and Inkscape. -Fastfission 15:04, 14 April 2008 (UTC) - Praca własna, Domena publiczna, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=486528>

Model atomu Ruthenforda



Ernest Rutherford (1871-1937) Nagroda Nobla z chemii w 1908 za badania rozpadu promieniotwórczego pierwiastków



Ładunek dodatni zgromadzony w gęstym jądrze w środku atomu

Ładunki ujemne są rozproszone i okrążają jądro

Autorstwa Bensteele1995 - Praca własna,
CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=21332267>

Problemy:

Elektron przyspiesza

Emituje promieniowanie elektromagnetyczne

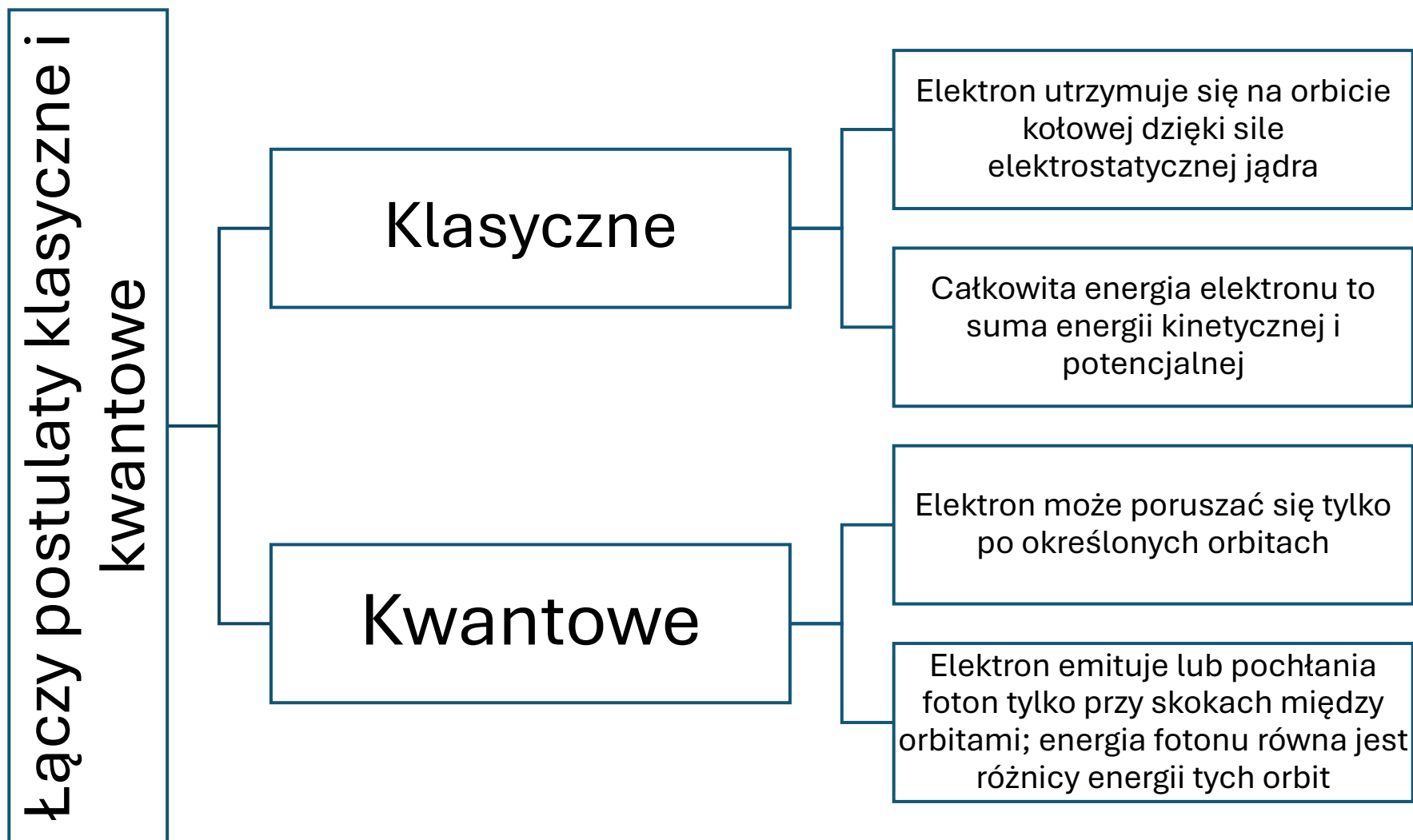
Traci energię

Spada na jądro

Atom przestaje istnieć

https://chem.libretexts.org/Courses/BethuneCookman_University/B-CU%3ACH-331_Physical_Chemistry_I/CH-331_Text/01%3A_The_Dawn_of_the_Quantum_Theory/1.8%3A_The_Bohr_Theory_of_the_Hydrogen_Atom

Model atomu Bohra (1913)



Model atomu Bohra

Niels Bohr (1885-1962) Nagroda Nobla z fizyki w 1922 za badania nad strukturą atomu

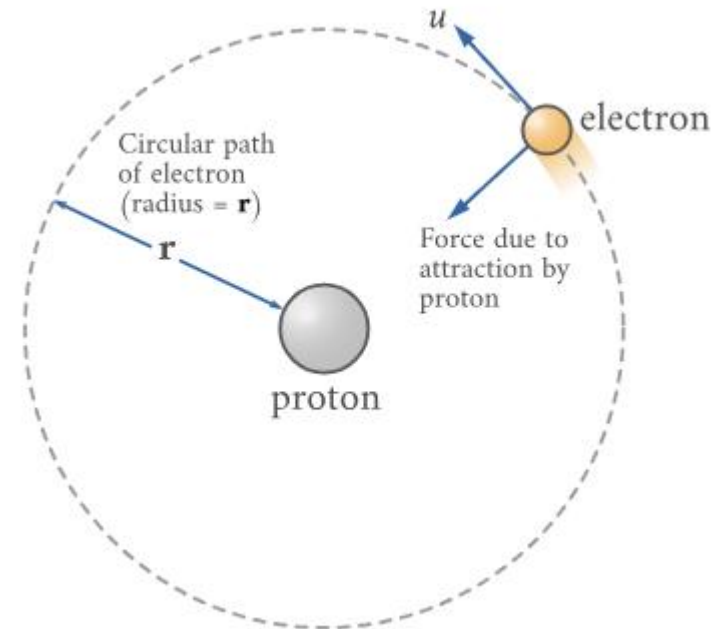


Klasyczne

Elektron utrzymuje się na orbicie kołowej dzięki sile elektrostatycznej jądra

Całkowita energia elektronu to suma energii kinetycznej i potencjalnej

https://chem.libretexts.org/Courses/BethuneCookman_University/B-CU%3ACH-331_Physical_Chemistry_I/CH-331_Text/01%3A_The_Dawn_of_the_Quantum_Theory/1.8%3A_The_Bohr_Theory_of_the_Hydrogen_Atom

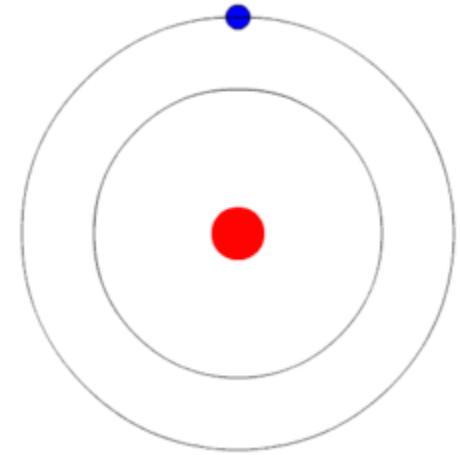


Model atomu Bohra

Kwantowe

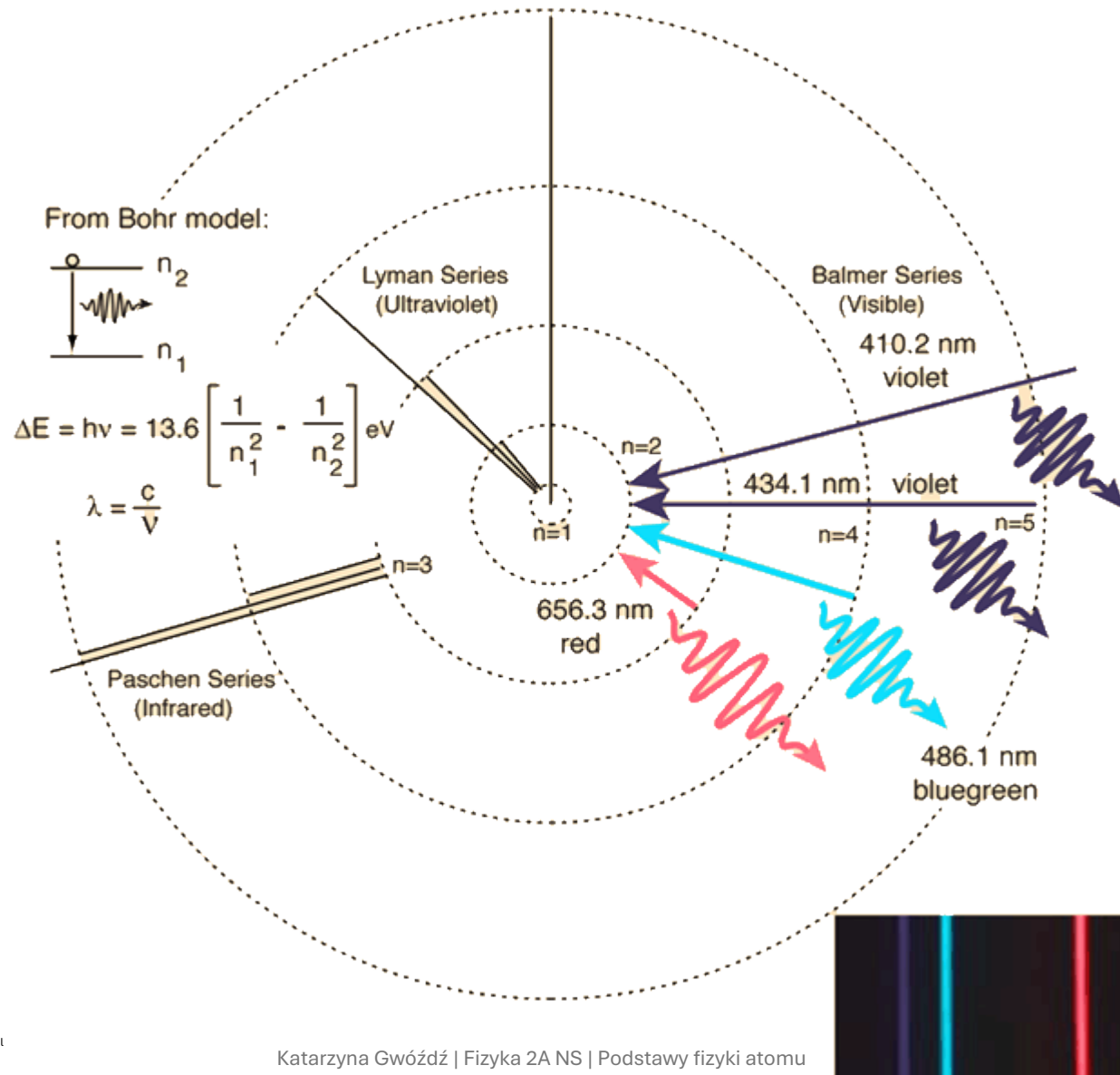
Elektron może poruszać się tylko po określonych orbitach

Elektron emituje lub pochłania foton tylko przy skokach między orbitami; energia fotonu równa jest różnicy energii tych orbit

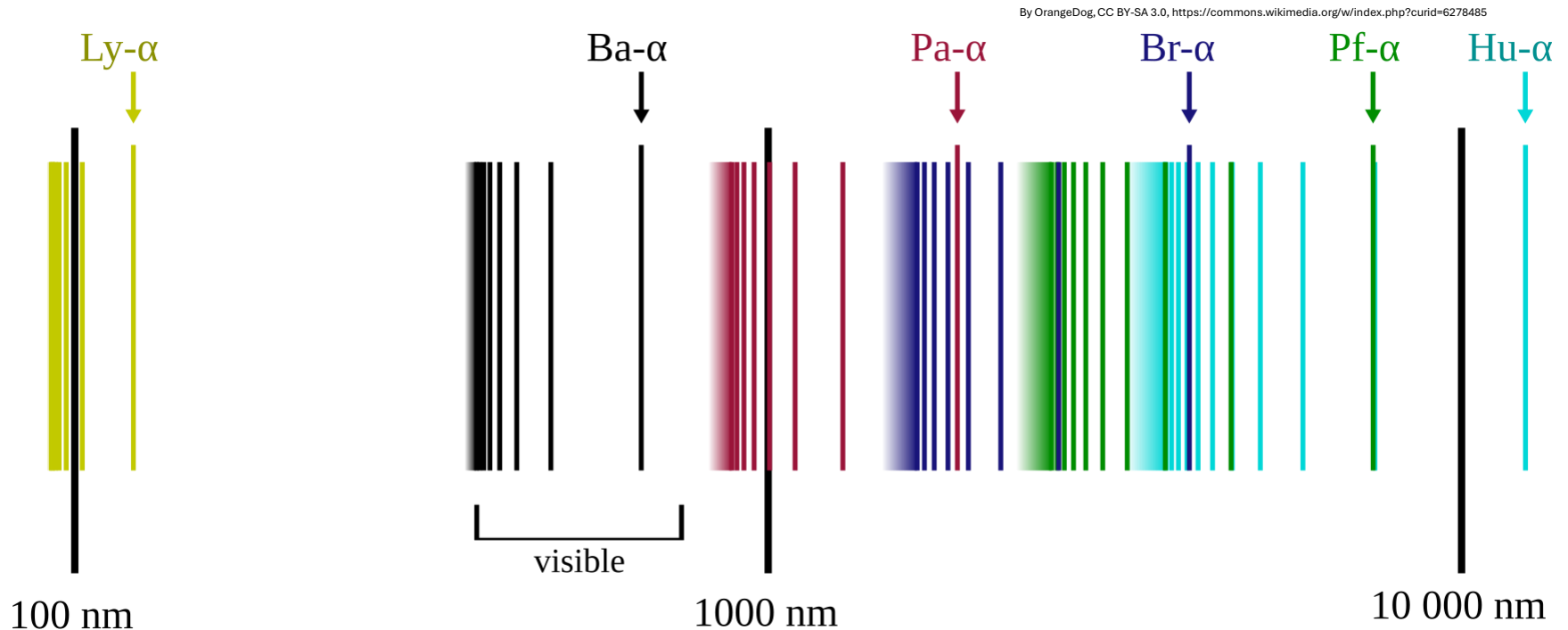


Autorstwa Kurzon - Praca własna, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=32177429>

Linie widmowe atomu wodoru



Linie widmowe atomu wodoru



Model atomu Bohra pozwala przewidzieć widmo, ale tylko dla wodoru.

Model atomu Bohra - problemy

Wprowadza postulaty kwantowe bez ich wyjaśnienia

Nie rozważa interakcji między elektronami

Nie uwzględnia spinów elektronowych

Nie uwzględnia zasady nieoznaczoności Heisenberga

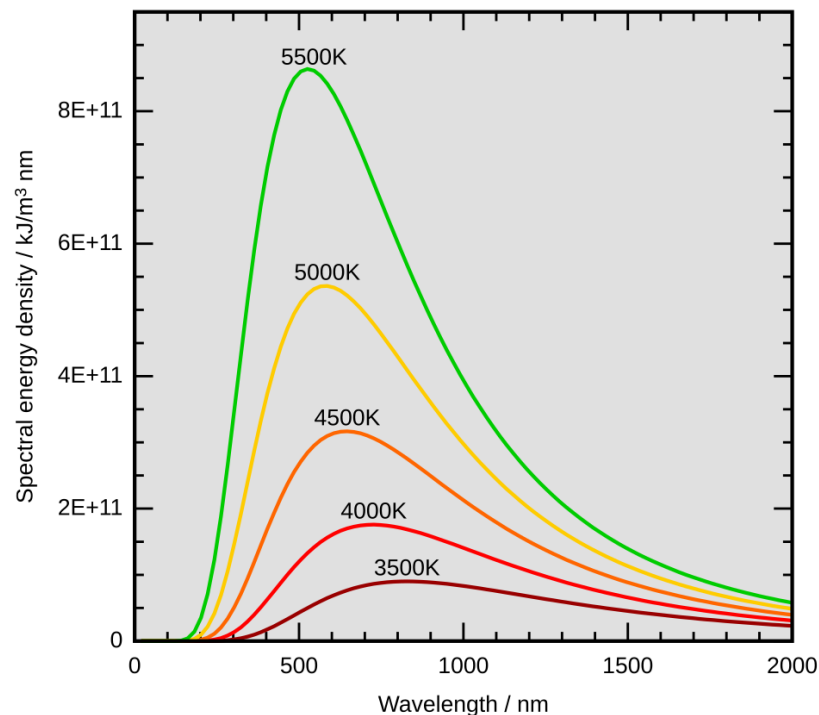
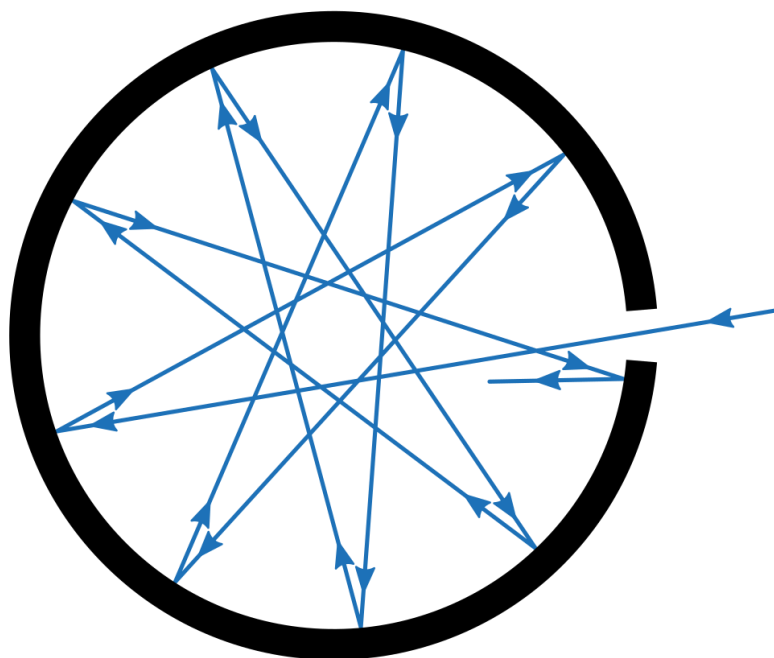


Mechanika kwantowa

<https://www.chip.pl/2022/01/fizyka-quantowa-fakty>

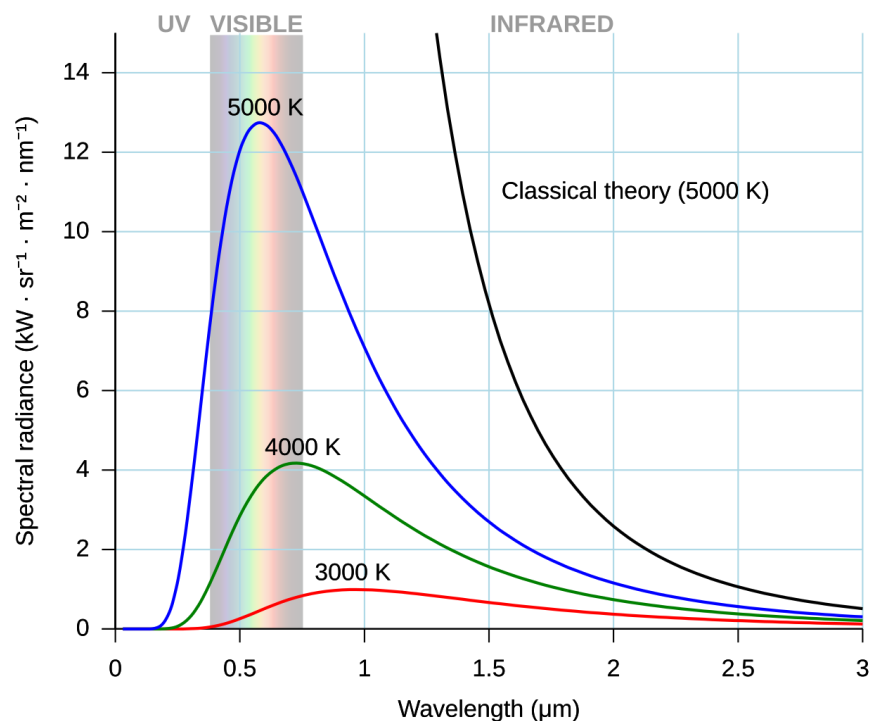
Katastrofa w nadfiolecie

Ciało doskonale czarne – pochłania 100% padającego promieniowania elektromagnetycznego, promieniuje spektrum zależnie tylko od temperatury



Katastrofa w nadfiolecie

Bazujące na termodynamice klasycznej prawo Rayleigha-Jeansa dobrze opisuje emisję promieniowania dla fal długich, jednak dla fal krótkich jest całkowiec błędne.



John William
Strutt, Lord
Rayleigh (1842-
1919) Nagroda
Nobla z fizyki w
1904 za odkrycie
argonu



Katastrofa w nadfiolecie

Planck założył, że energia jest emitowana porcjami – kwantami, co pozwoliło na prawidłowy opis promieniowania CDC. Uznaje się to za początek mechaniki kwantowej (1900)

$$E = nh\nu$$

$n = 0, 1, 2, 3 \dots$ - liczba naturalna

$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ - stała Plancka

ν - częstotliwość drgań oscylatora harmonicznego

Max Planck (1858-1947) nagroda Nobla z fizyki w 1918 za odkrycie kwantów energii



Zjawisko fotoelektryczne

Energia wybitych elektronów nie zależy od natężenia światła, tylko od częstotliwości fali elektromagnetycznej

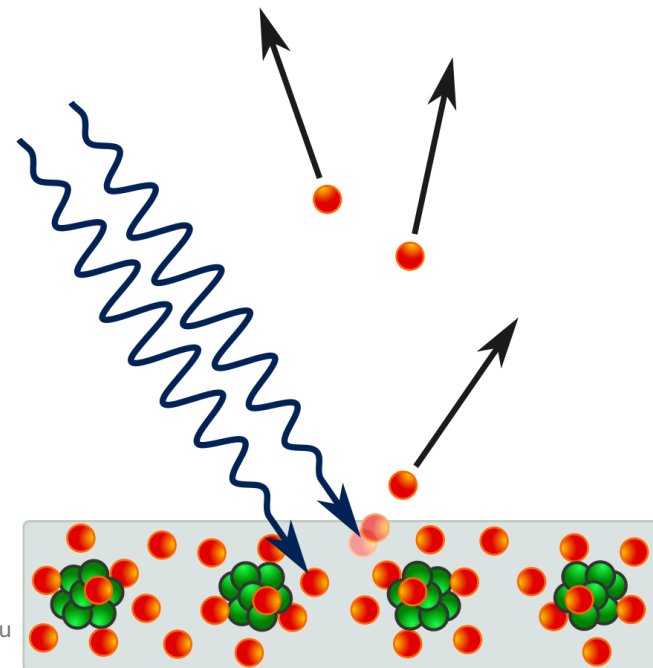
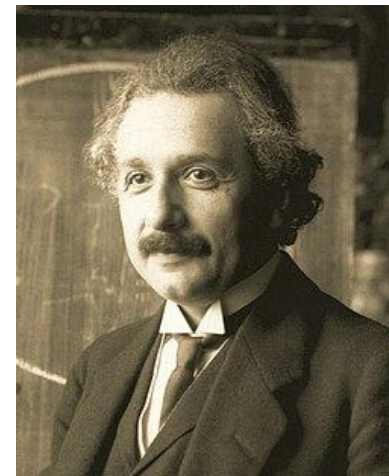
$$h\nu = W + E_k$$

W – praca wyjścia

E_k - energia kinetyczna elektronu

ν - częstotliwość fali elektromagnetycznej

Albert Einstein
(1879-1955)
nagroda Nobla z
fizyki w 1921 za
odkrycie praw
rządzących
efektem
fotoelektrycznym



Postulaty mechaniki kwantowej

1. Kwantyzacja energii

Energia może być przenoszona tylko w postaci dyskretnych pakietów – kwantów – o określonych wartościach.

Postulaty mechaniki kwantowej

2. Funkcja falowa i równanie Schrödingera

Opisuje stan fizyczny układu w mechanice kwantowej. Jest funkcją zespoloną w ogólności zależną od przestrzeni i czasu - $\psi(\vec{r}, t)$.

Reguła Born'a:
 $|\psi(x, t)|^2$ jest gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie x w chwili t .

Funkcja falowa musi być kwadratowalna:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(r, t)|^2 dr = 1$$

Postulaty mechaniki kwantowej

2. Funkcja falowa i równanie Schrödingera

Równanie Schrödingera pozwala na opisanie ewolucji funkcji falowej w czasie.

Reprezentacja położeniowa:

$$\hat{H}\psi(r, t) = \frac{ih}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t)$$

$\hat{H}$ – operator Hamiltona (hamiltionian)

Erwin Schrödinger (1887-1961) nagroda Nobla z fizyki w 1933 za odkrycie nowych, produktywnych aspektów teorii atomów



Postulaty mechaniki kwantowej

2. Funkcja falowa – przykład 1

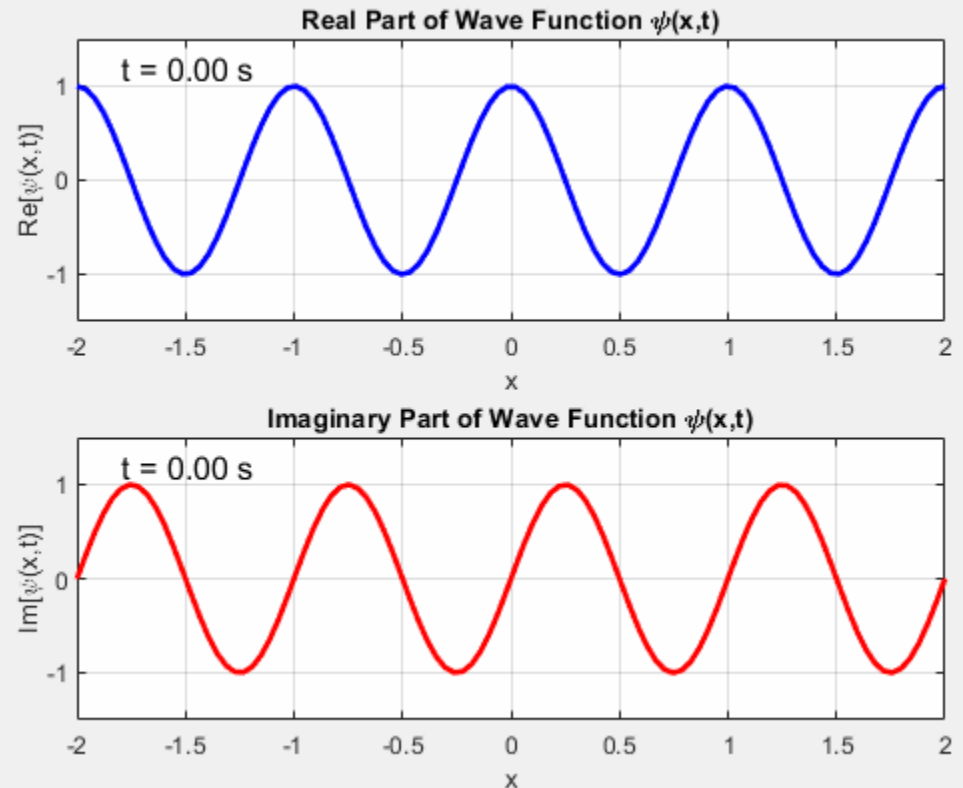
Model cząstki swobodnej:

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

Funkcja jest niekwadratowalna:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(r, t)|^2 dr = \infty$$

Nie można wyznaczyć gęstości prawdopodobieństwa.



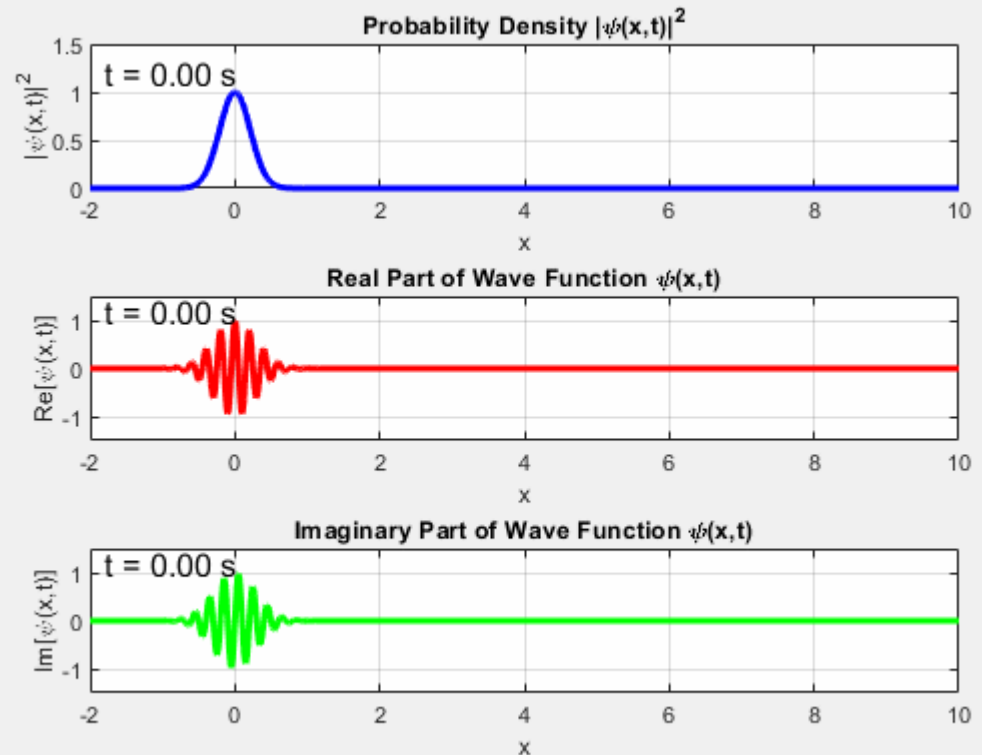
Postulaty mechaniki kwantowej

2. Funkcja falowa – przykład 2

Model cząstki swobodnej jako paczki falowej:

$$\psi(x, t) \sim e^{\frac{(x-x_0-vt)^2}{4\sigma(t)^2}} e^{i(kx-\omega t)}$$

Taki model pozwala na znalezienie gęstości prawdopodobieństwa oraz daje określone położenie z pewnym rozmyciem, co ma sens fizyczny.

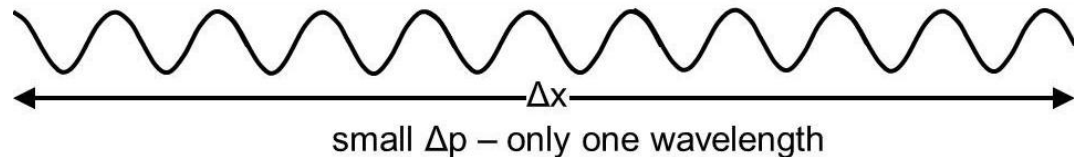


Postulaty mechaniki kwantowej

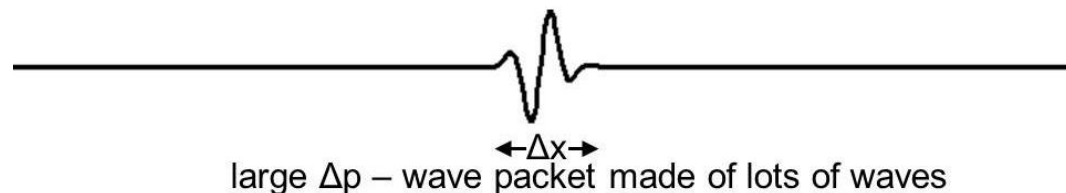
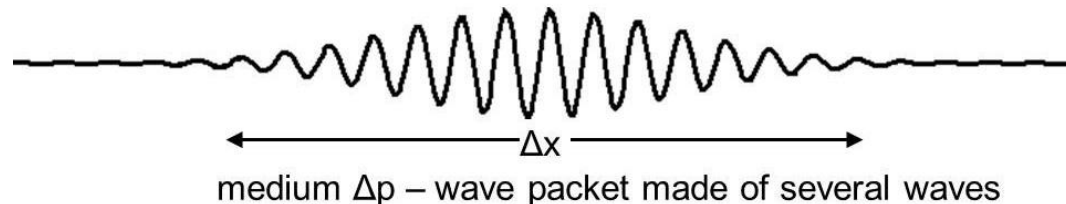
3. Zasada nieoznaczoności Heisenberga

Istnieją takie pary wielkości, których nie da się jednocześnie zmierzyć z dowolną dokładnością. Akt pomiaru jednej wielkości wpływa na układ tak, że część informacji o drugiej wielkości jest tracona.

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$$



$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$



Postulaty mechaniki kwantowej

4. Superpozycja stanów

Cząstka może być jednocześnie w kilku stanach, a jej rzeczywisty stan jest wynikiem pomiaru.

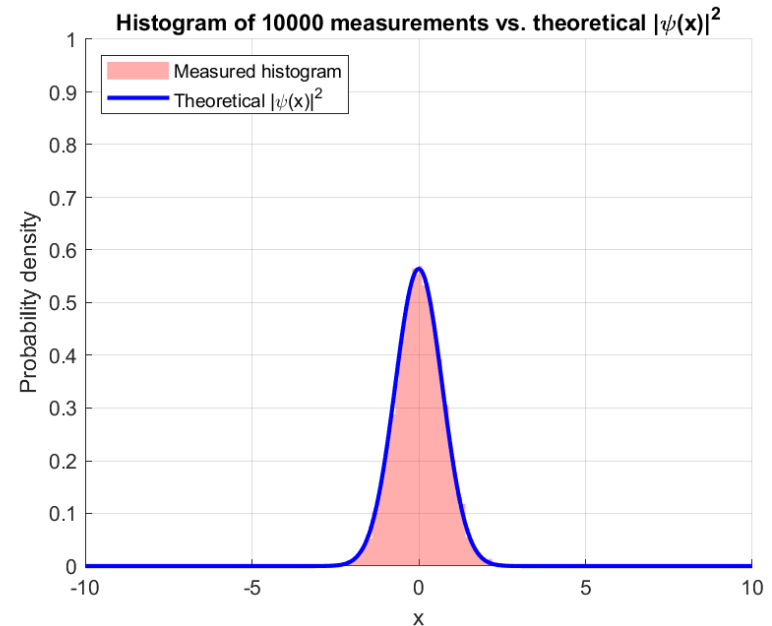
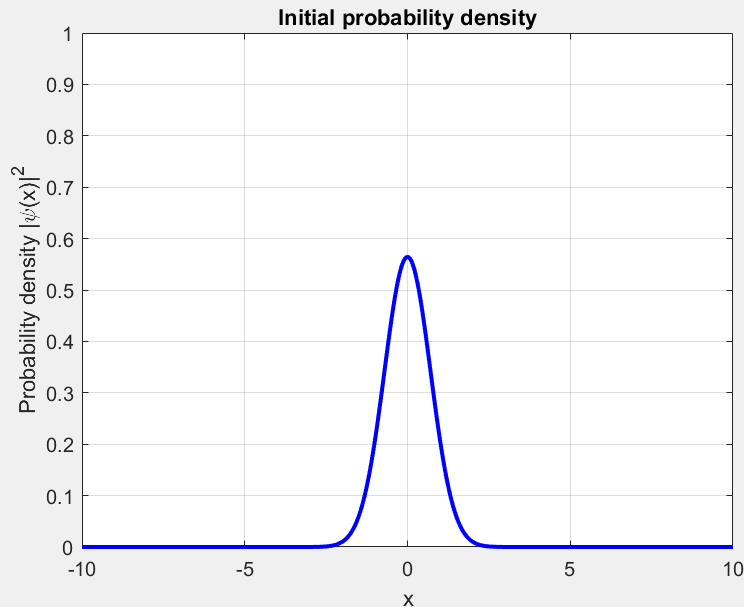


<https://depositphotos.com/pl/vector/life-death-schrodinger-cat-vector-illustration-schrodinger-famous-thought-experiment-428203506.html>

Postulaty mechaniki kwantowej

5. Kolaps funkcji falowej

Nagła zmiana stanu kwantowego układu w trakcie pomiaru. Z superpozycji stanów stan jest redukowany do jednego obserwowalnego.



Postulaty mechaniki kwantowej

6. Dualizm korpuskularno-falowy

Każdy obiekt materialny może być opisywany jednocześnie jako fala i cząstka

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

λ – długość fali de Broglie'a

Luis de Broglie (1892-1987) nagroda Nobla z fizyki w 1929 za odkrycie falowej natury elektronów



<https://vulgarisation.fr/animations/en/FveMVSUAUHtQtDh2>

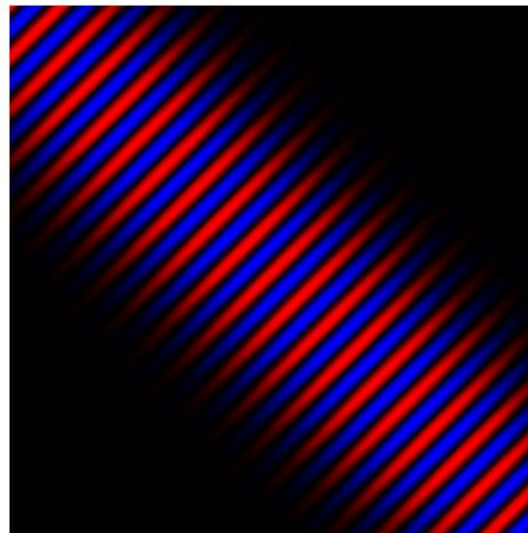
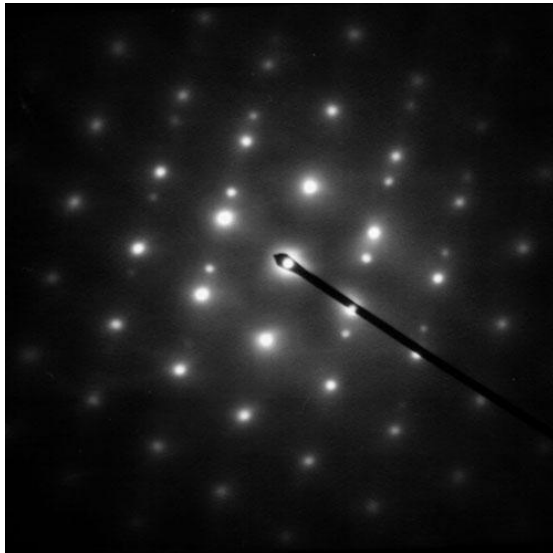
Postulaty mechaniki kwantowej

6. Dualizm korpuskularno-falowy

Doświadczenie Davissona i Germera (1927) potwierdziło hipotezę de Broglie'a. Pokazali dyfrakcję elektronów na kryształach niklu i udowodnili ich falową naturę.



Clinton Davisson (1881-1958) nagroda Nobla z fizyki w 1937 za eksperymentalne odkrycie dyfrakcji elektronów na kryształach oraz Lester Germer (1896-1971)



ki atomu

Postulaty mechaniki kwantowej

7. Nieodwracalność w czasie

Równanie Schrödingera jest odwracalne w czasie. Natomiast efekt kolapsu funkcji kwantowej – pomiar - jest nieodwracalny w skali makroświata.

Postulaty mechaniki kwantowej

1. Kwantyzacja energii

2. Funkcja falowa i równanie Schrödingera

3. Zasada nieoznaczoności Heisenberga

4. Superpozycja stanów

5. Kolaps funkcji falowej

6. Dualizm korpuskularno-falowy

7. Nieodwracalność w czasie

Orbitale atomowe

Rozwiązania równania Schrödingera dla atomu wodoru prowadzą do funkcji falowej, która opisuje orbitale atomowe. Orbitale te są regionami w przestrzeni, gdzie prawdopodobieństwo znalezienia elektronu jest największe. Stan elektronu jest opisywany przez liczby kwantowe.

Liczby kwantowe dla równych stanów elektronu w atomie wodoru:

Główna liczba kwantowa	$n = 1, 2, 3 \dots$	Numer energii elektronu
Poboczna liczba kwantowa	$l = 0, 1, 2 \dots n-1$	Podpowłoka do której przypisany jest elektron
Magnetyczna liczba kwantowa	$m_l = -l \dots -1, 0, 1 \dots l$	Rzut orbitalnego momentu pędu na dana oś
Spinowa liczba kwantowa	$s = \frac{1}{2}$	Wartość spinu
Magnetyczna spinowa liczba kwantowa	$m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	Orientacja przestrzenna spinu elektronu

Orbitale atomowe

$$n = 1, 2, 3 \dots$$

$$l = 0, 1, 2 \dots n-1$$

$$m_l = -l \dots -1, 0, 1 \dots l$$

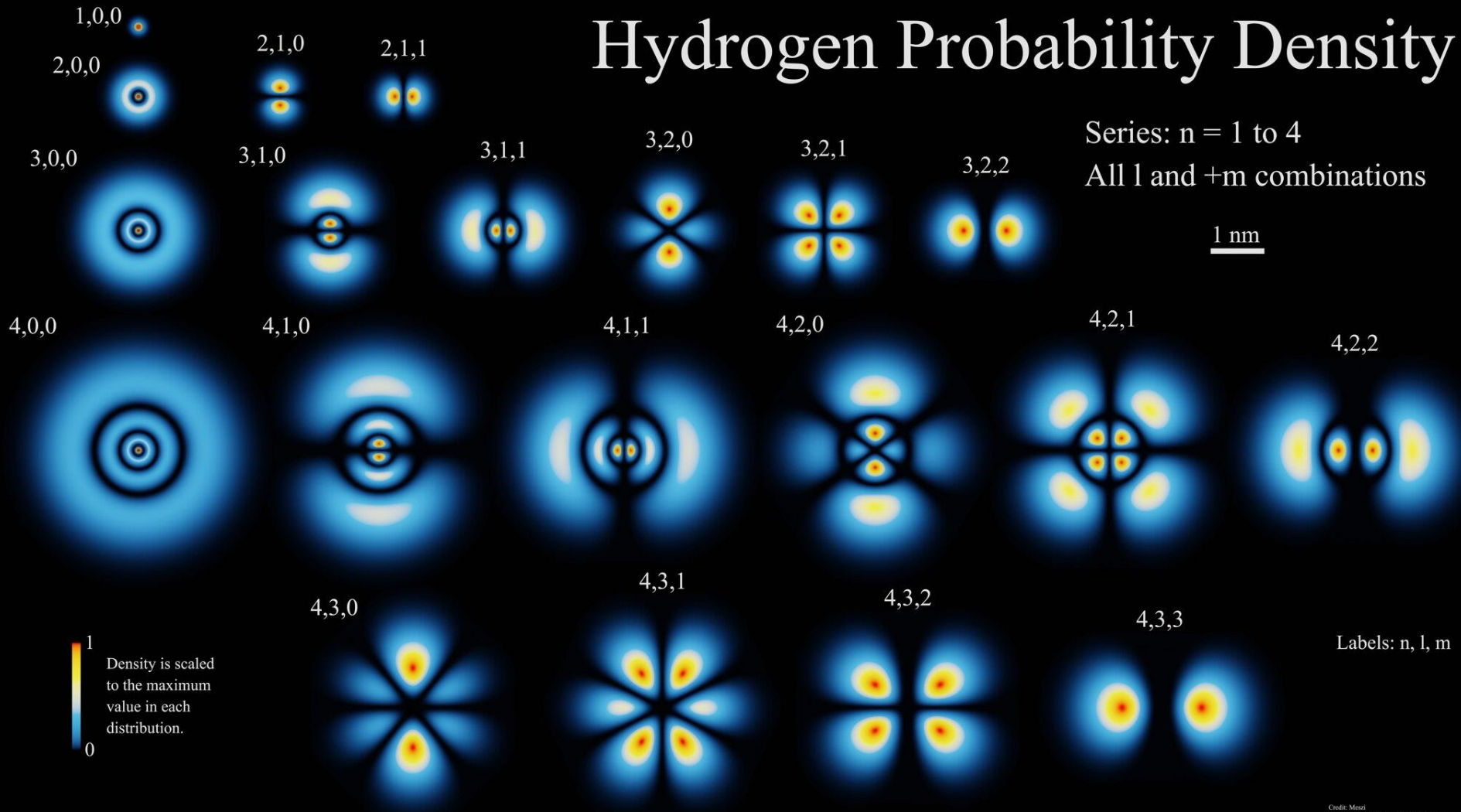
https://www.reddit.com/r/dataisbeautiful/comments/hqb8fd/oc_hydrogen_electron_clouds_in_2d/#lightbox

Hydrogen Probability Density

Series: $n = 1$ to 4

All l and $+m$ combinations

1 nm



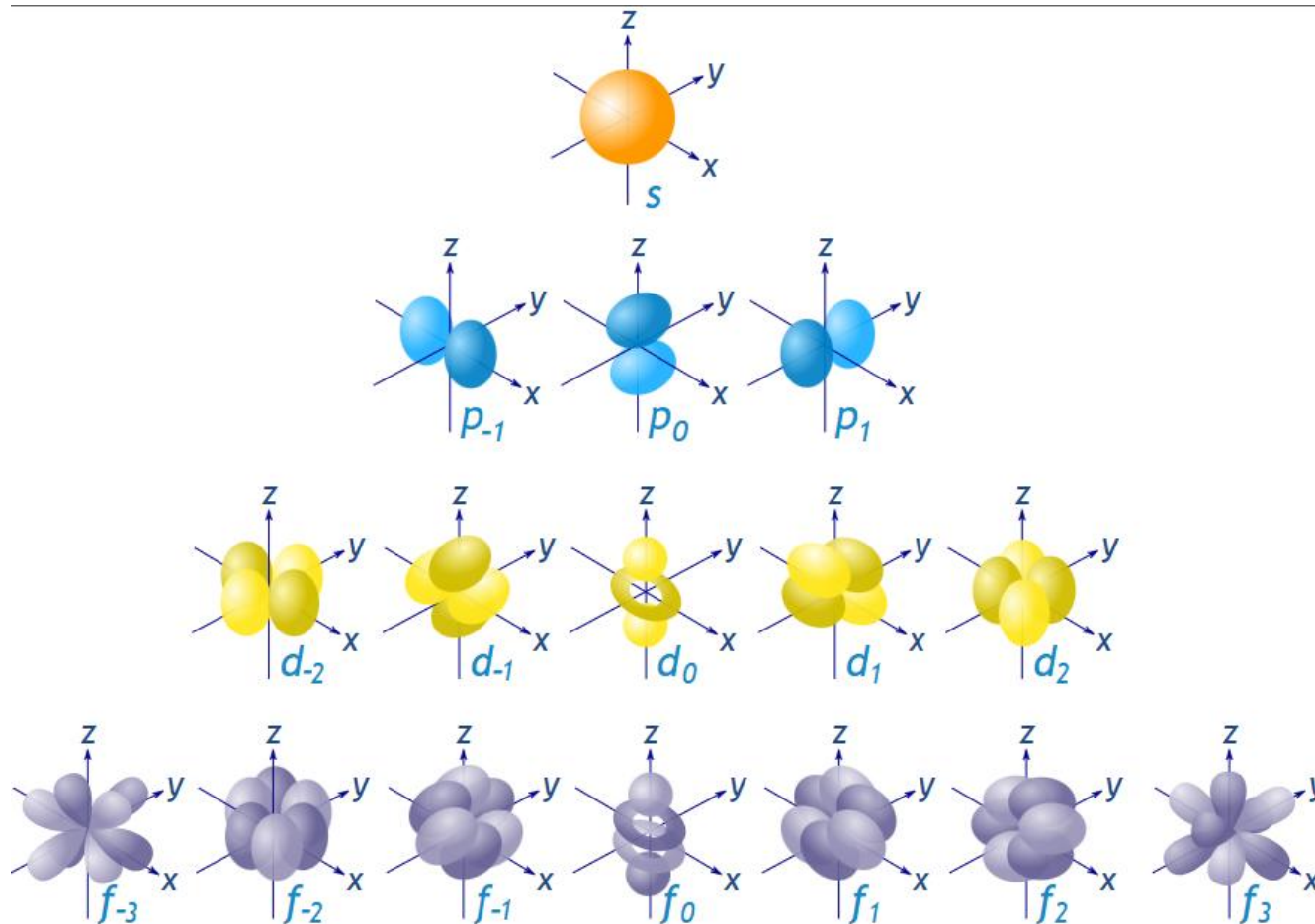
Orbitale atomowe

$$n = 1, 2, 3 \dots$$

$$l = 0, 1, 2 \dots n-1$$

$$m_l = -l \dots -1, 0, 1 \dots l$$

<https://www.mathsisfun.com/physics/images/orbitals.svg>



Orbitale atomowe

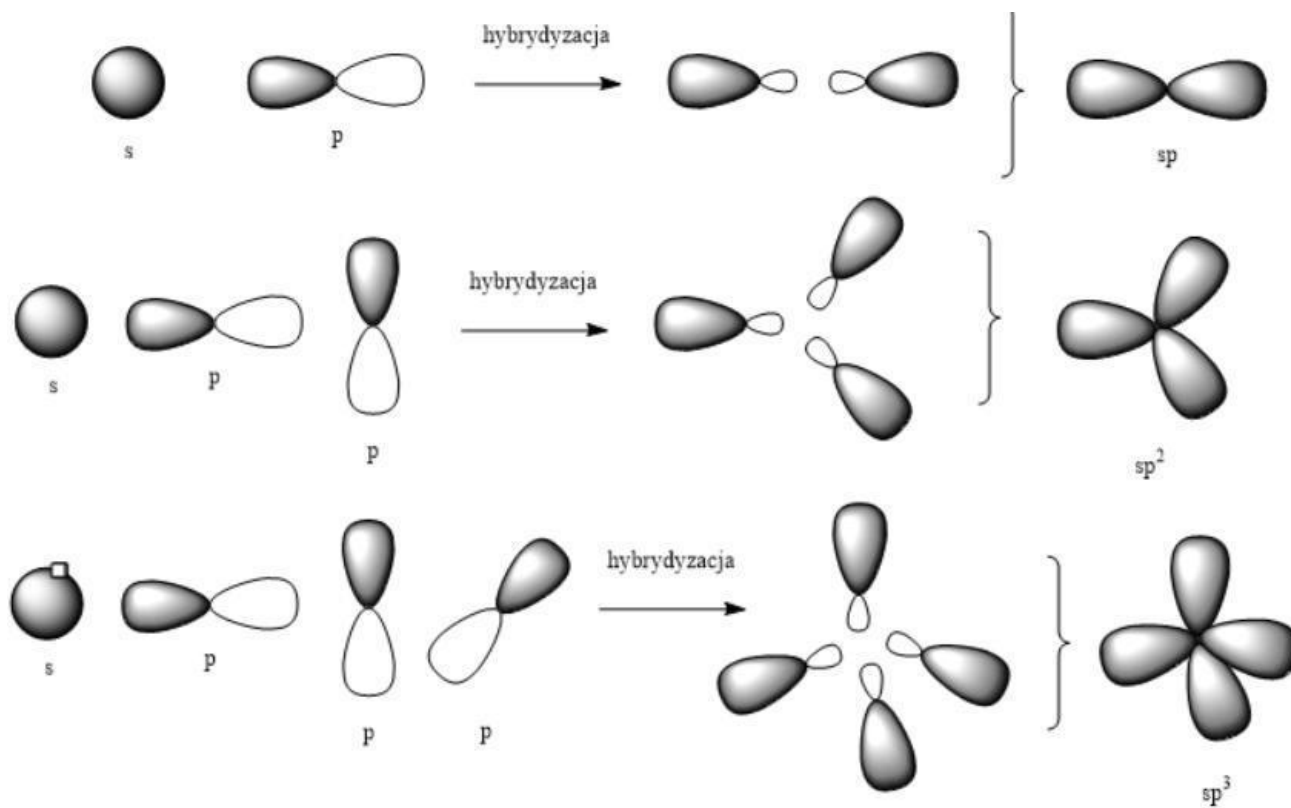
https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/transcoded/6/61/Atomic_orbitals_and_periodic_table_construction.ogv/Atomic_orbitals_and_periodic_table_construction.ogv.720p.vp9.webm

ATOMS

All the animations and explanations on
www.toutestquantique.fr

Hybrydyzacja

Mieszanie orbitali w celu utworzenia nowego zestawu orbitali opisujących wiązania cząsteczkowe.



Dalsza lektura

Model standardowy

- Opisuje cząstki elementarne, w tym budowę protonów i neutronów

Relatywistyka

- Dla ciężkich atomów konieczne jest wprowadzenie poprawek relatywistycznych do równania Schrödingera -> równanie Diraca

Spin

- Własność czysto kwantowa, którą można zastosować w naszym życiu, np.: rezonans magnetyczny czy komputer kwantowy



Dziękuję za uwagę!