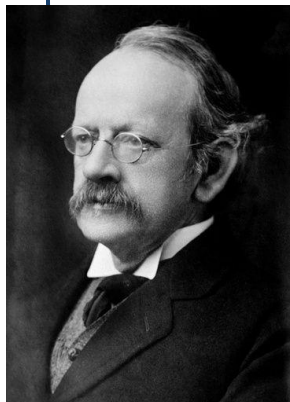


# FIZYKA Z ELEMENTAMI FIZYKI RADIACYJNEJ II | WYKŁAD 6

**Model atomu**

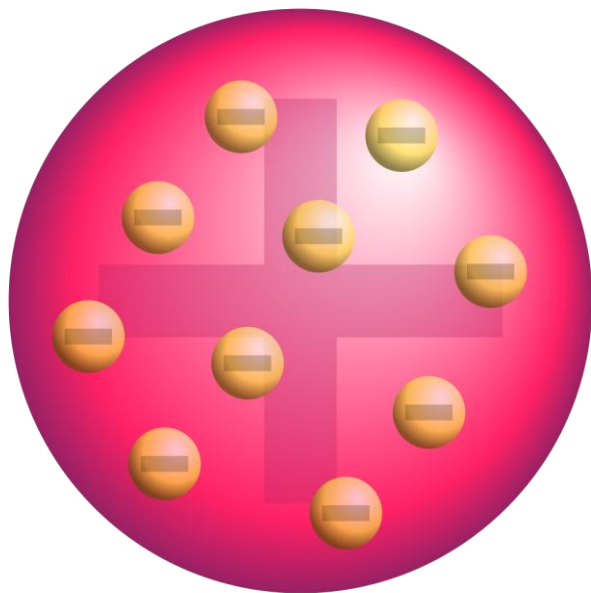
dr inż. Katarzyna Gwóźdź

# Model atomu Thompsona (1904 r.)



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  $\alpha$ -, „nie-” +  $\tau\acute{\epsilon}\mu\nu\omega$   
– temno, „ciąć”), oznaczającego coś,  
czego nie da się przeciąć ani podzielić



Pierwszy model atomu

„Ciasto z rodzynkami”

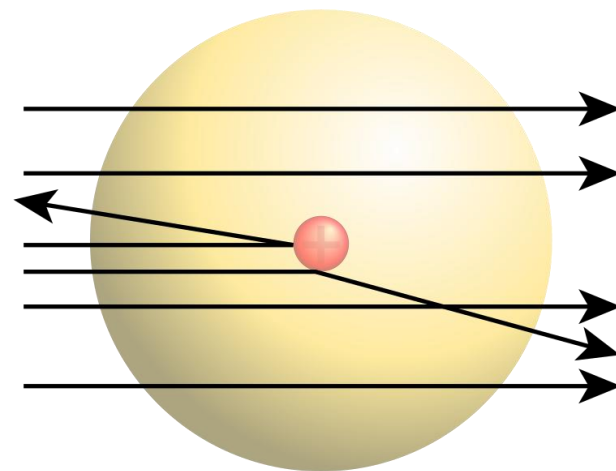
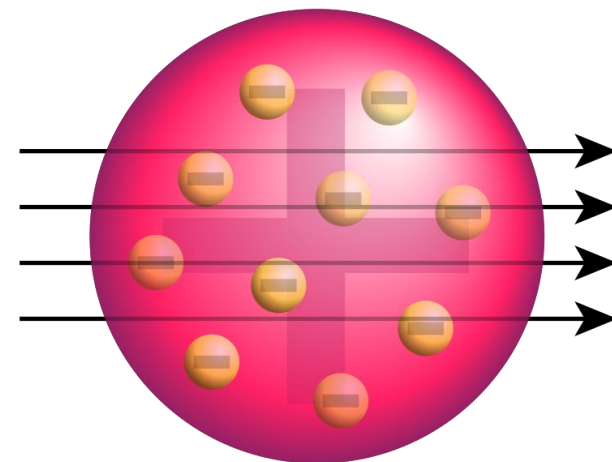
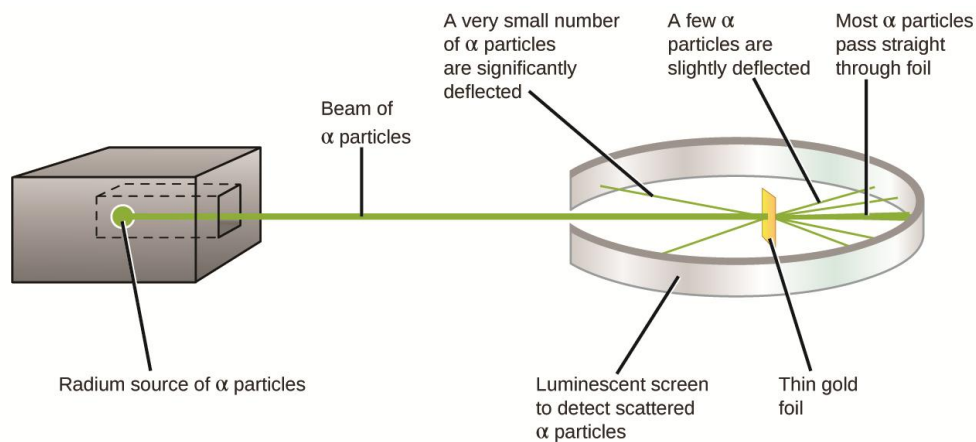
Atom został podzielony

# Doświadczenie Rutherforda (1909 r.)

Atomy helu (cząstki  $\alpha$ ) uderzają w złotą folię

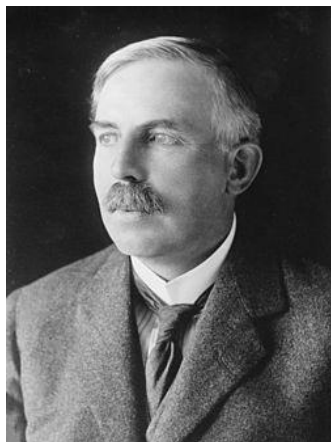
Wg modelu Thompsona powinny przejść bez zmiany kierunku

Część zmieniała kierunek, część się odbijała

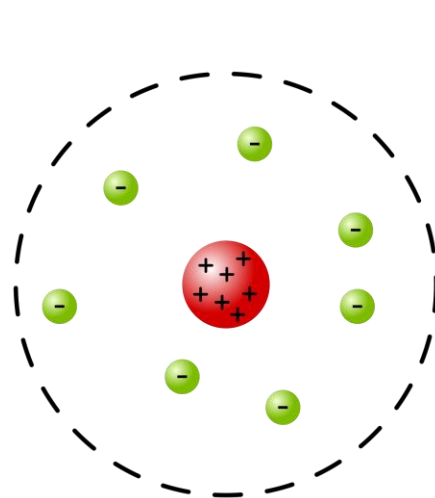


Autorstwa Drawn by User:Fastfission in Illustrator and Inkscape. --Fastfission 15.04, 14 April 2008 (UTC) - Praca własna, Domena publiczna, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=486528>

# Model atomu Ruthenforda

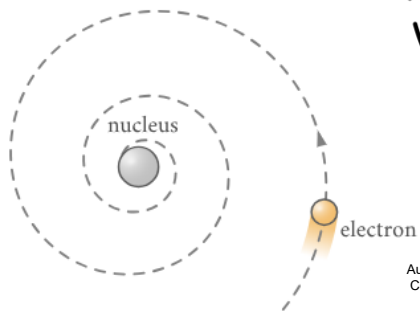


Ernest Rutherford (1871-1937) Nagroda Nobla z chemii w 1908 za badania rozpadu promieniotwórczego pierwiastków



Ładunek dodatni zgromadzony w gęstym jądrze w środku atomu

Ładunki ujemne są rozproszone i okrążają jądro



Autorstwa Benstele1995 - Praca własna, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=21332267>

Elektron przyspiesza

Emituje promieniowanie elektromagnetyczne  
 $e$

Traci energię

Spada na jądro

Atom przestaje istnieć

# Model atomu Bohra (1913 r.)

Łączy postulaty klasyczne i kwantowe

Klasyczne

Elektron utrzymuje się na orbicie kołowej dzięki sile elektrostatycznej jądra

Całkowita energia elektronu to suma energii kinetycznej i potencjalnej

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

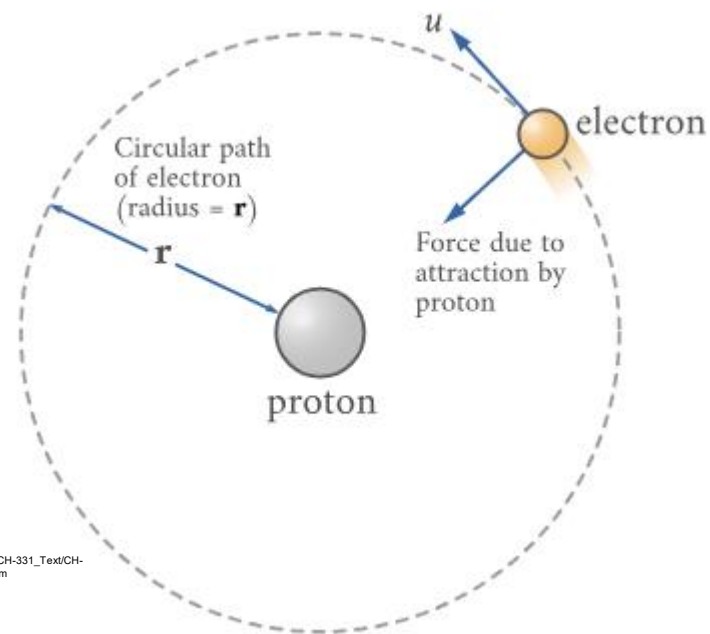
# Model atomu Bohra

Klasyczne

Elektron utrzymuje się na orbicie kołowej dzięki sile elektrostatycznej jądra

Całkowita energia elektronu to suma energii kinetycznej i potencjalnej

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

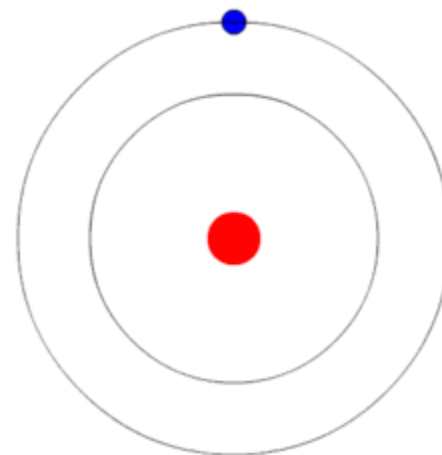


# Model atomu Bohra

## Kwantowe

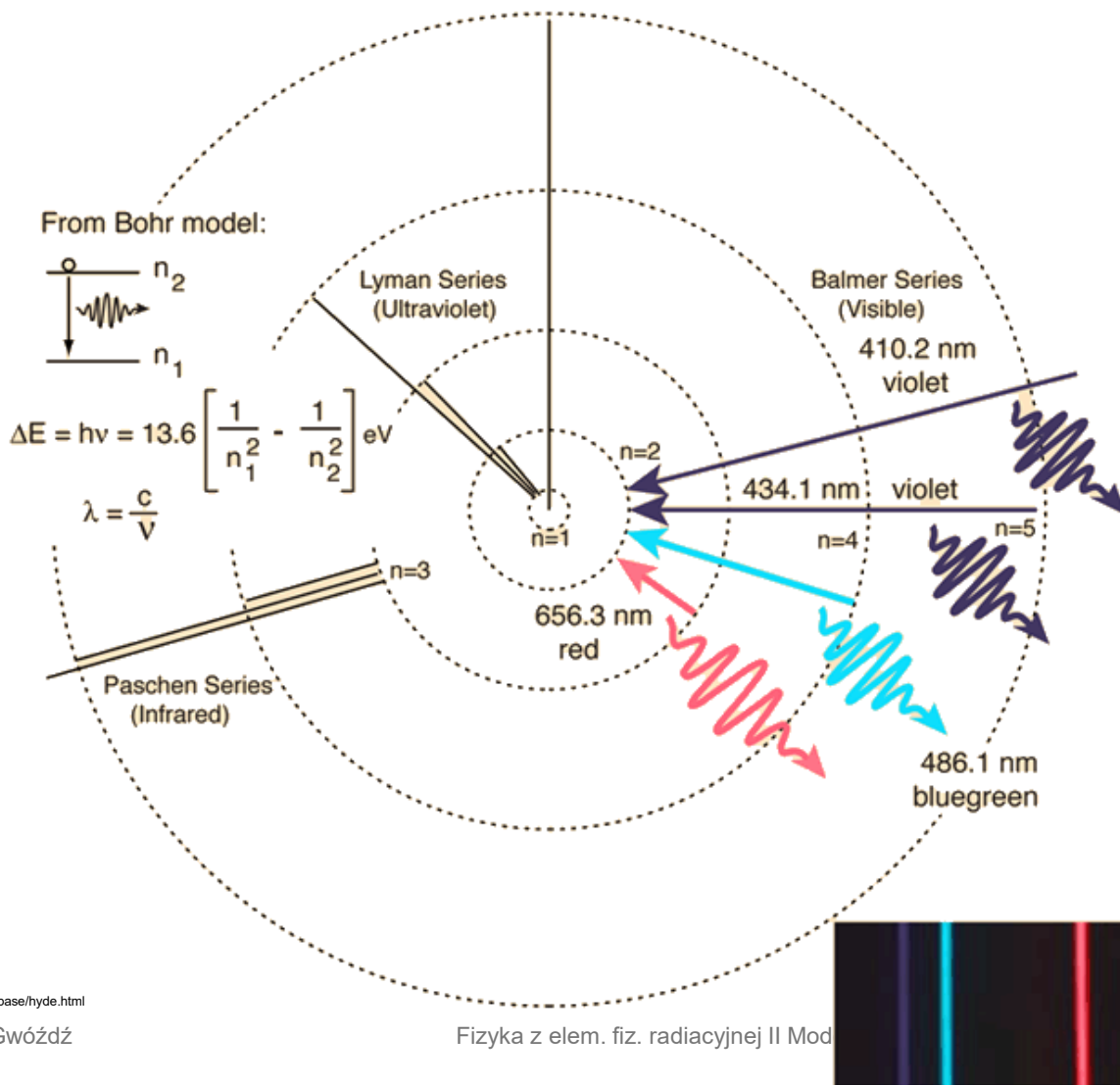
Elektron może poruszać się tylko po określonych orbitach

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

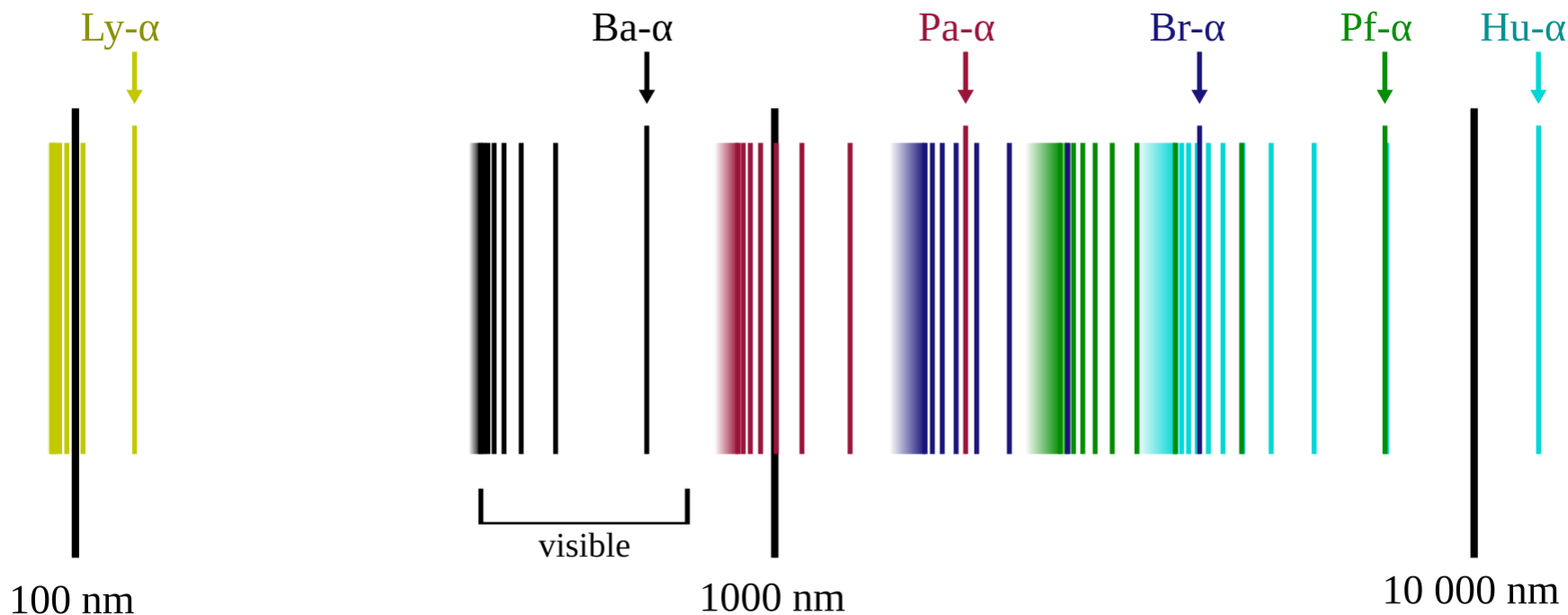


Autorstwa Kurzon - Praca własna, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=32177429>

# 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

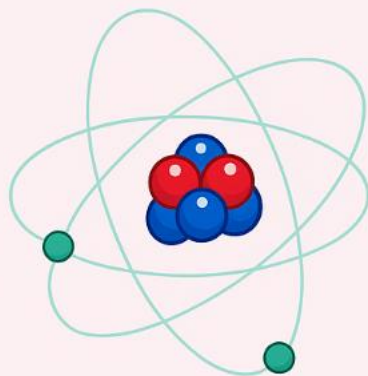
Nie rozważa interakcji między elektronami

Nie uwzględnia spinów elektronowych

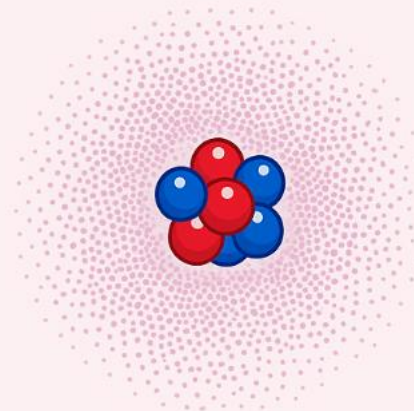
Nie uwzględnia zasady nieoznaczoności Heisenberga

# Mechanika kwantowa

Fundamentalna teoria fizyczna opisująca przyrodę w skalach atomowych i subatomowych. W przeciwieństwie do mechaniki klasycznej, opiera się na dualizmie korpuskularno-falowym i rezygnuje z pojęcia deterministycznej trajektorii na rzecz prawdopodobieństwa.



**Bohr Model**  
Electron Orbits



**Quantum Mechanical**  
Electron Clouds (Orbitals)

<https://kingofthecurve.org/blog/nclex-carpal-tunnel-palmar-view-5acne-kb4yp>

# Postulaty mechaniki kwantowej

1. Kwantyzacja energii

2. Funkcja falowa i równanie Schrödingera

3. Zasada nieoznaczoności Heisenberga

4. Superpozycja stanów

5. Kolaps funkcji falowej

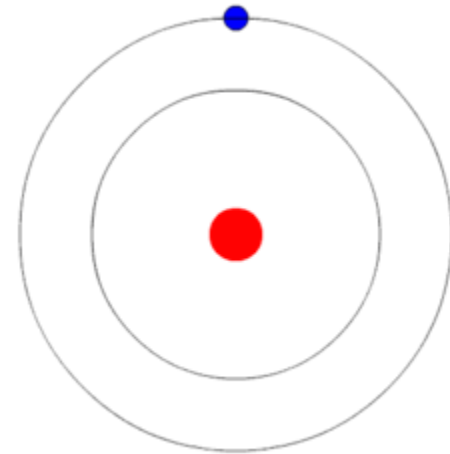
6. Dualizm korpuskularno-falowy

7. Nieodwracalność w czasie

# Postulaty mechaniki kwantowej

## 1. Kwantyzacja energii

$$\Delta E = h\nu$$



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

# 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:

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

$\hat{H}$  – 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

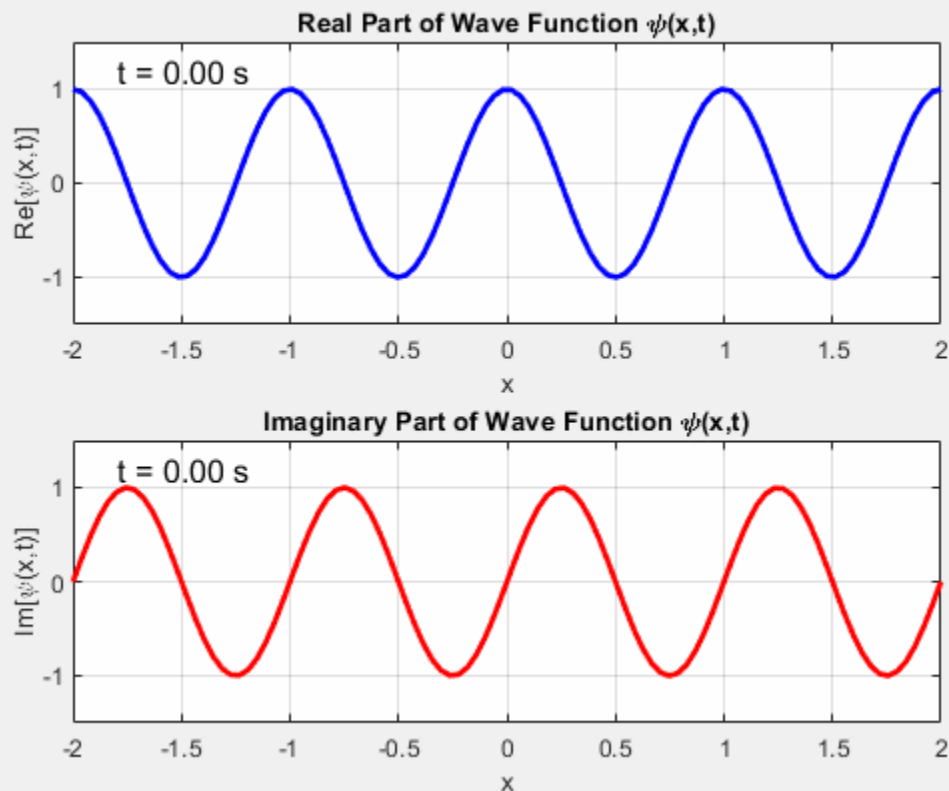
Model cząstki swobodnej:

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

Funkcja jest niekwadratowalna:

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

Nie można wyznaczyć gęstości prawdopodobieństwa.



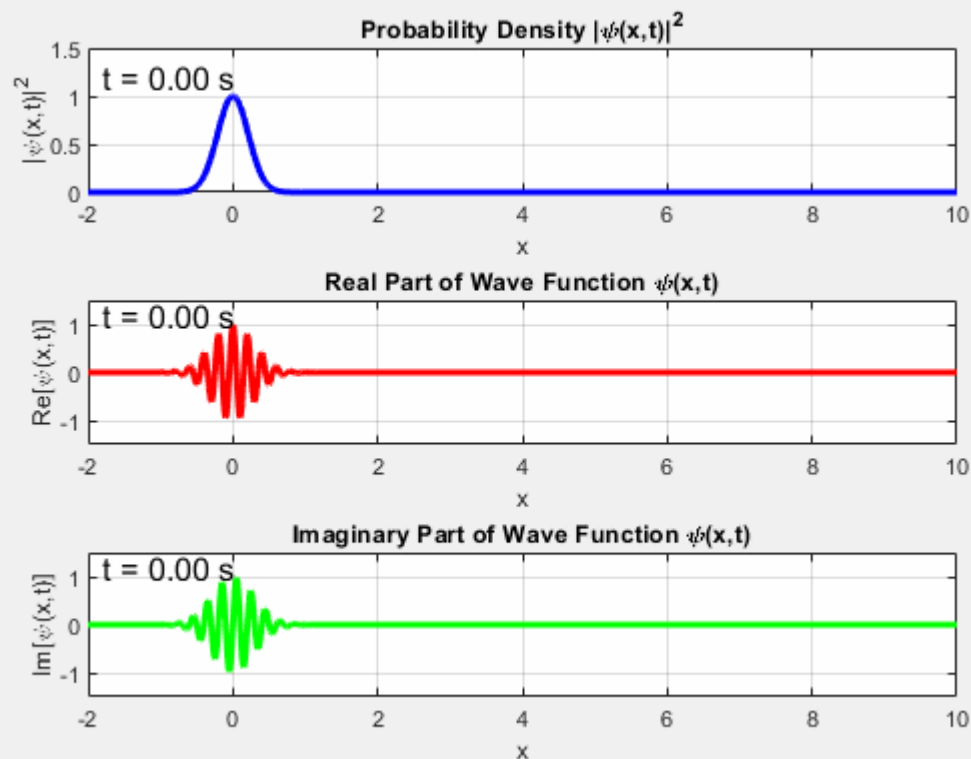
# Postulaty mechaniki kwantowej

## 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

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

# Postulaty mechaniki kwantowej

## 4. Superpozycja stanów

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

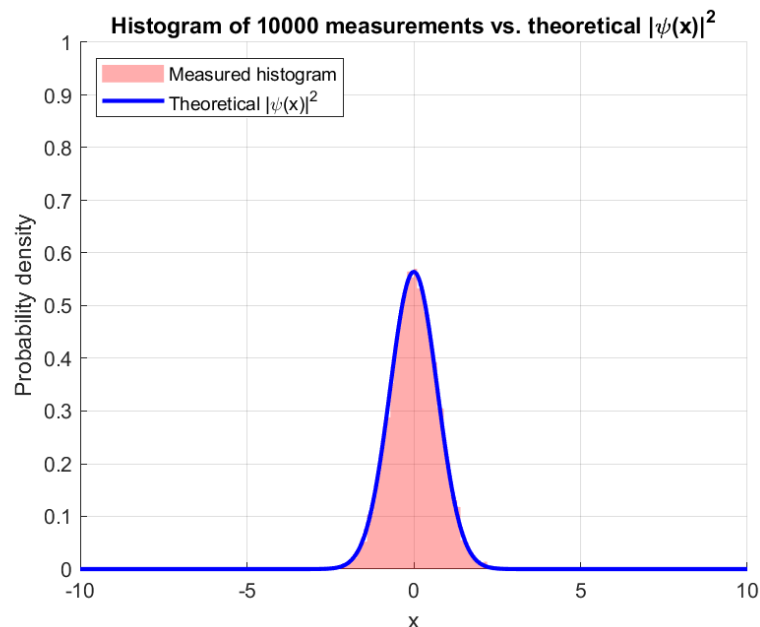
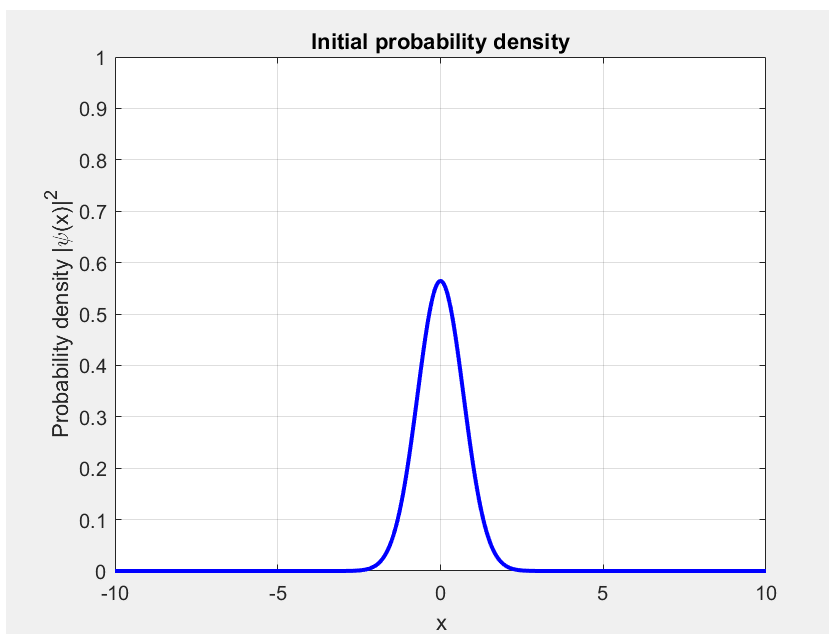


<https://depositphotos.com/pl/vector/life-death-schrodinger-cat-vector-illustration-schrodinger-famous-thought-experiment-428203506.html>

# 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

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

# Postulaty mechaniki kwantowej

## 7. Nieodwracalność w czasie

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

# 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:

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

# Zakaz Pauliego

W układzie kwantowym (np. w atomie) dwa elektrony nie mogą znajdować się w tym samym stanie kwantowym jednocześnie. W praktyce oznacza to, że w jednym atomie nie mogą istnieć dwa elektrony opisane tym samym zestawem czterech liczb kwantowych.

Liczby kwantowe dla równych stanów elektronu w atomie wodoru:

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

# Stany elektronowe

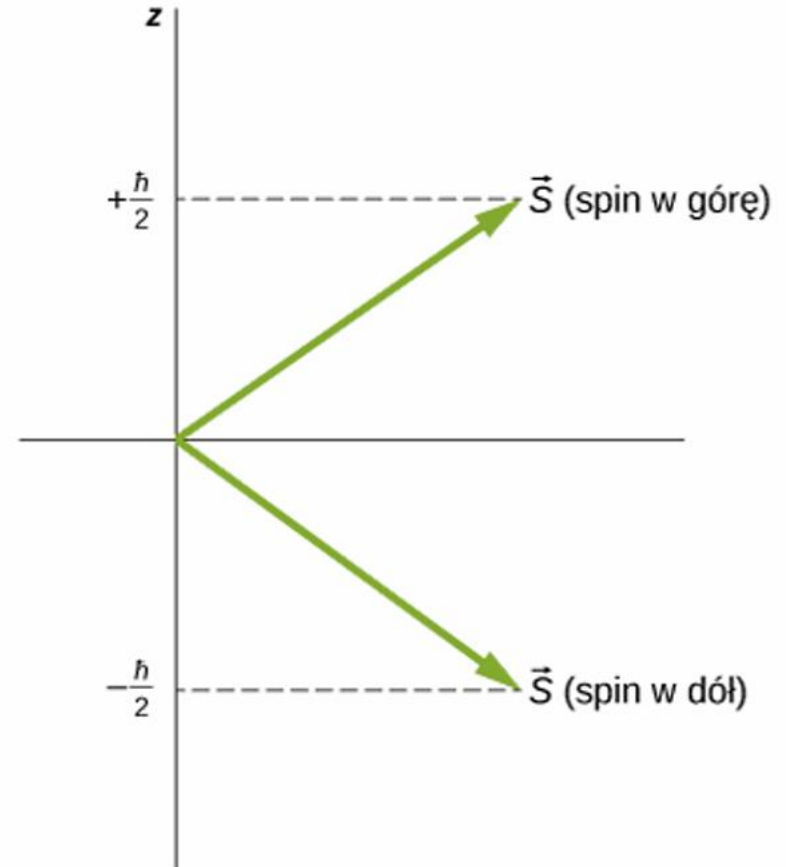
$n$	$l$	$m_l$	$m_s$	Symbol podpowłoki	Liczba elektronów na podpowłoczce	Liczba elektronów na powłoczce
1	0	0	1/2	1s	2	2
1	0	0	-1/2			
2	0	0	1/2	2s	2	8
2	0	0	-1/2			
2	1	-1	1/2	2p	6	
2	1	-1	-1/2			
2	1	0	1/2			
2	1	0	-1/2			
2	1	1	1/2			
2	1	1	-1/2			

# Stany elektronowe

3	0	0	1/2	3s	2	18
3	0	0	-1/2			
3	1	-1	1/2	3p	6	
3	1	-1	-1/2			
3	1	0	1/2			
3	1	0	-1/2			
3	1	1	1/2			
3	1	1	-1/2			
3	2	-2	1/2	3d	10	
3	2	-2	-1/2			
3	2	-1	1/2			
3	2	-1	-1/2			
3	2	0	1/2			
3	2	0	-1/2			
3	2	1	1/2			
3	2	1	-1/2			
3	2	2	1/2			
3	2	2	-1/2			

# Spin

Spin to fundamentalna, niezmienna cecha cząstek elementarnych oraz układów złożonych (takich jak jądra atomowe), która stanowi ich wewnętrzny moment pędu. W ujęciu fizycznym oznacza to, że cząstka posiada wrodzony „moment obrotowy”, który nie wynika z jej ruchu w przestrzeni, lecz jest jej cechą stałą – tak samo jak masa czy ładunek elektryczny. Spin mówi, jak cząstka reaguje na zewnętrzne pole magnetyczne.



# Orbitale atomowe

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

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

$$m_l = -l \dots +l$$

$$1, 0, 1 \dots l$$

[https://www.reddit.com/r/dataisbeautiful/comments/hqb8fd/oc\\_hydrogen\\_electron\\_clouds\\_in\\_2d/#lightbox](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

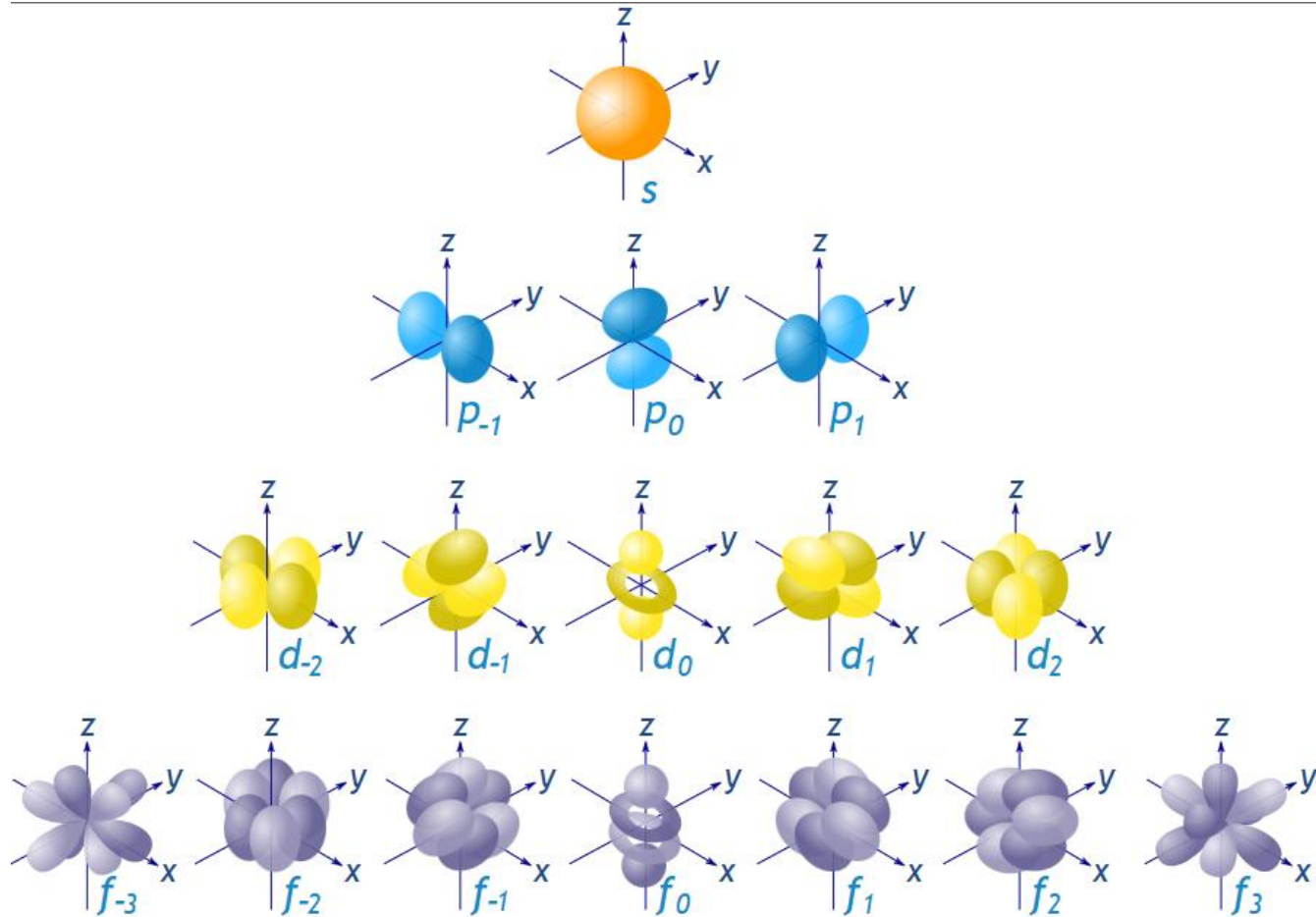
1 nm

4,2,2

Labels:  $n, l, m$

1  
Density is scaled to the maximum value in each distribution.  
0

# Orbitale atomowe



# Orbitale atomowe

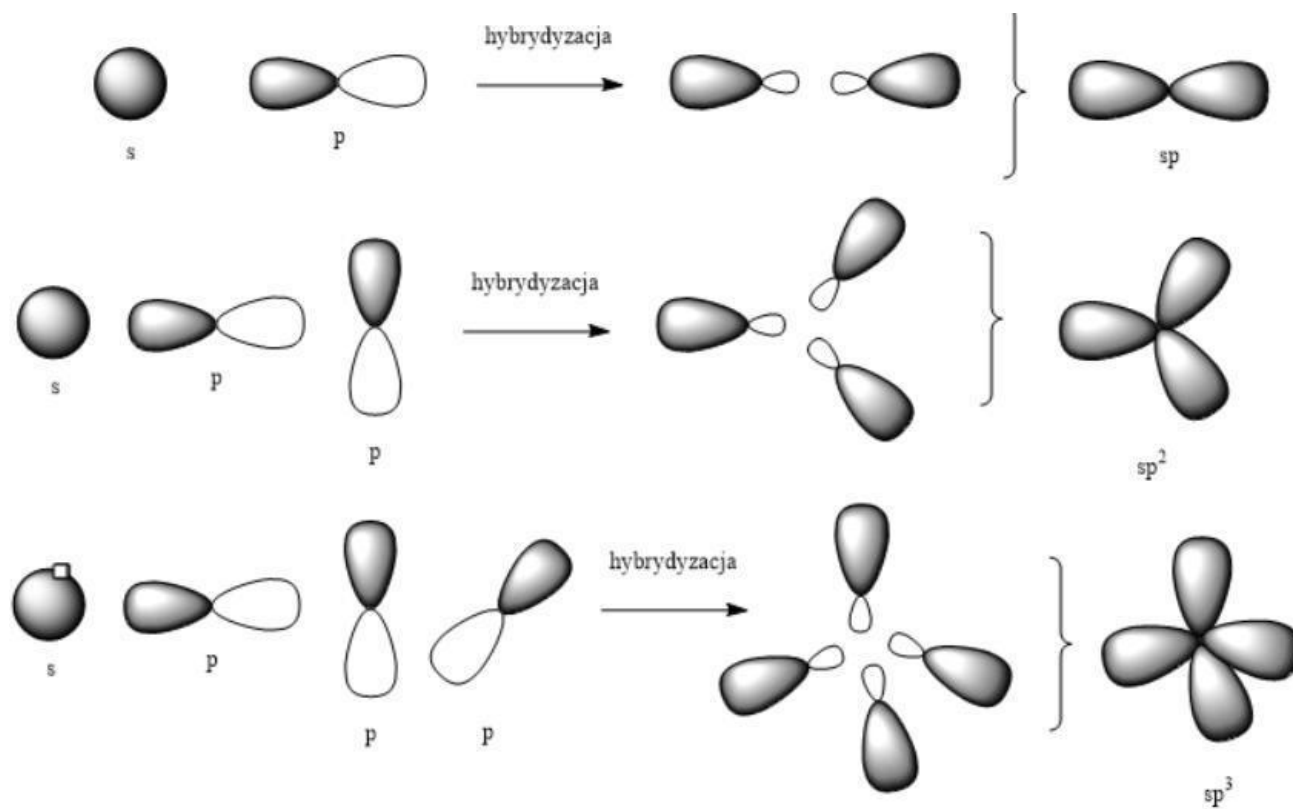
[https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/transcoded/6/61/Atomic\\_orbitals\\_and\\_periodic\\_table\\_construction.ogv/Atomic\\_orbitals\\_and\\_periodic\\_table\\_construction.ogv.720p.vp9.webm](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/transcoded/6/61/Atomic_orbitals_and_periodic_table_construction.ogv/Atomic_orbitals_and_periodic_table_construction.ogv.720p.vp9.webm)

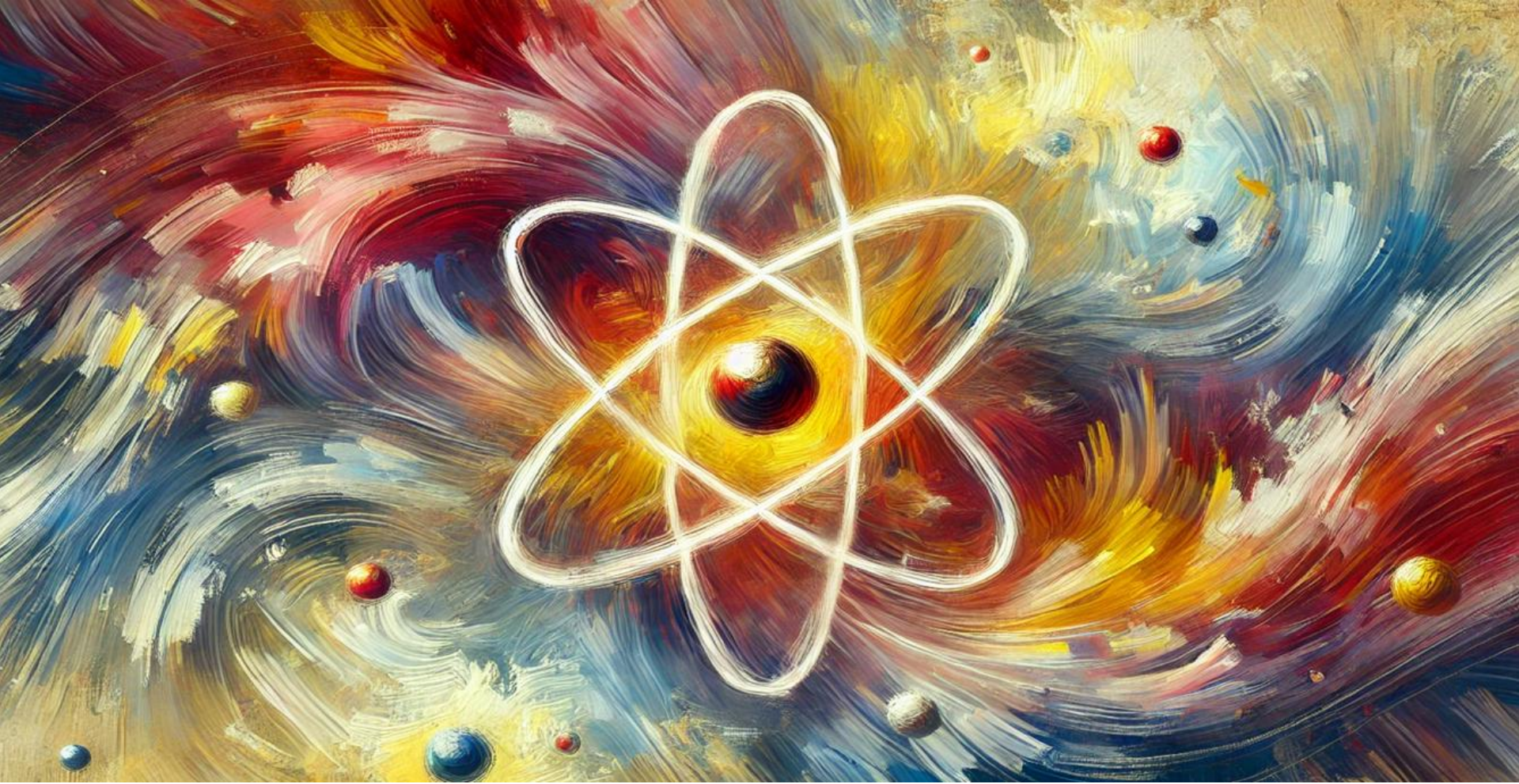
**ATOMS**

All the animations and explanations on  
[www.toutestquantique.fr](http://www.toutestquantique.fr)

# Hybrydyzacja

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





# FIZYKA Z ELEMENTAMI FIZYKI RADIACYJNEJ II | WYKŁAD 6

**Dziękuję za uwagę!**

dr inż. Katarzyna Gwóźdź