

Основи на атомната физика и квантовата механика

Топлинно излъчване



Топлинно излъчване

Нагрети са всички тела с температура $T > -273 \text{ K}$

Топлинното лъчение е резултат от превръщането на различни видове енергия в енергия на електромагнитно лъчение.

Различава се от:

- хемилуминесценцията
- катодолуминесценцията
- рекомбинационното излъчване и др.

Основни величини

Спектрална
емисионна
способност

$$e_{\lambda,T} = \frac{dE}{d\lambda}$$

$$E_T = \int_0^{\infty} e_{\lambda,T} d\lambda$$

- интегрална
светимост

Спектрална
абсорбционна
способност

$$a_{\lambda,T} = \frac{W'_{\lambda,T}}{W_{\lambda,T}}$$

$$0 \leq a_{\lambda,T} \leq 1$$

• Абсолютно
бяло тяло

$$a_{\lambda,T} = 0$$

• Сиво тяло

$$a_{\lambda,T} = \text{const}$$

• Абсолютно
черно тяло

$$a_{\lambda,T} = 1$$



*Топлинното излъчване е в термодинамично равновесие с
нагретите тела.*

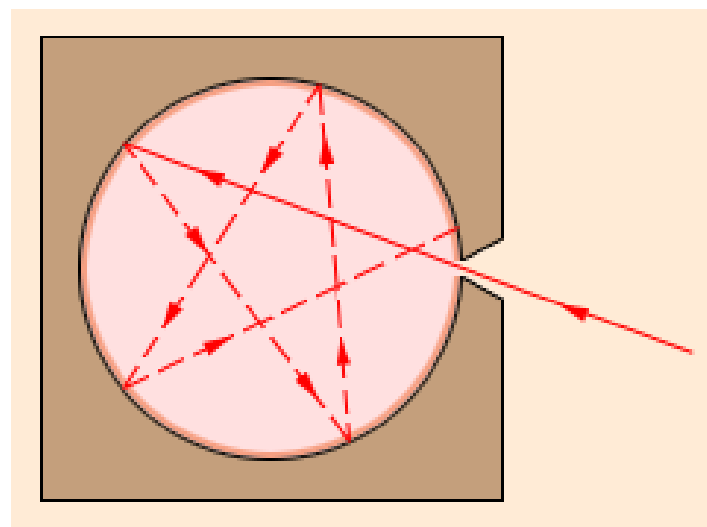
Ако в затворена повърхност с огледално отразяващи стени сложим няколко нагрети до различна температура тела, с течение на времето такава система ще дойде в състояние на ТДР, при което всички тела ще имат еднаква температура.

При ТДР всяко тяло излъчва толкова енергия, колкото поглъща.

Телата обменят енергия единствено чрез изпускане и поглъщане на лъчиста енергия и в пространството между тях плътността на енергията на излъчването достига стойност, зависеща единствено от установената температура на телата.

Това излъчване се нарича **равновесно** (чернотело).
Неговата плътност и спектрален състав зависят единствено от температурата.

Абсолютно черно тяло



Модел на АЧТ

Тъй като при ТДР всяко тяло излъчва толкова енергия, колкото поглъща, а за АЧТ $a_{\lambda,T} = 1$, следва, че:

Емисионната способност на АЧТ при дадена температура е най-голяма!

Закон на Кирхоф.

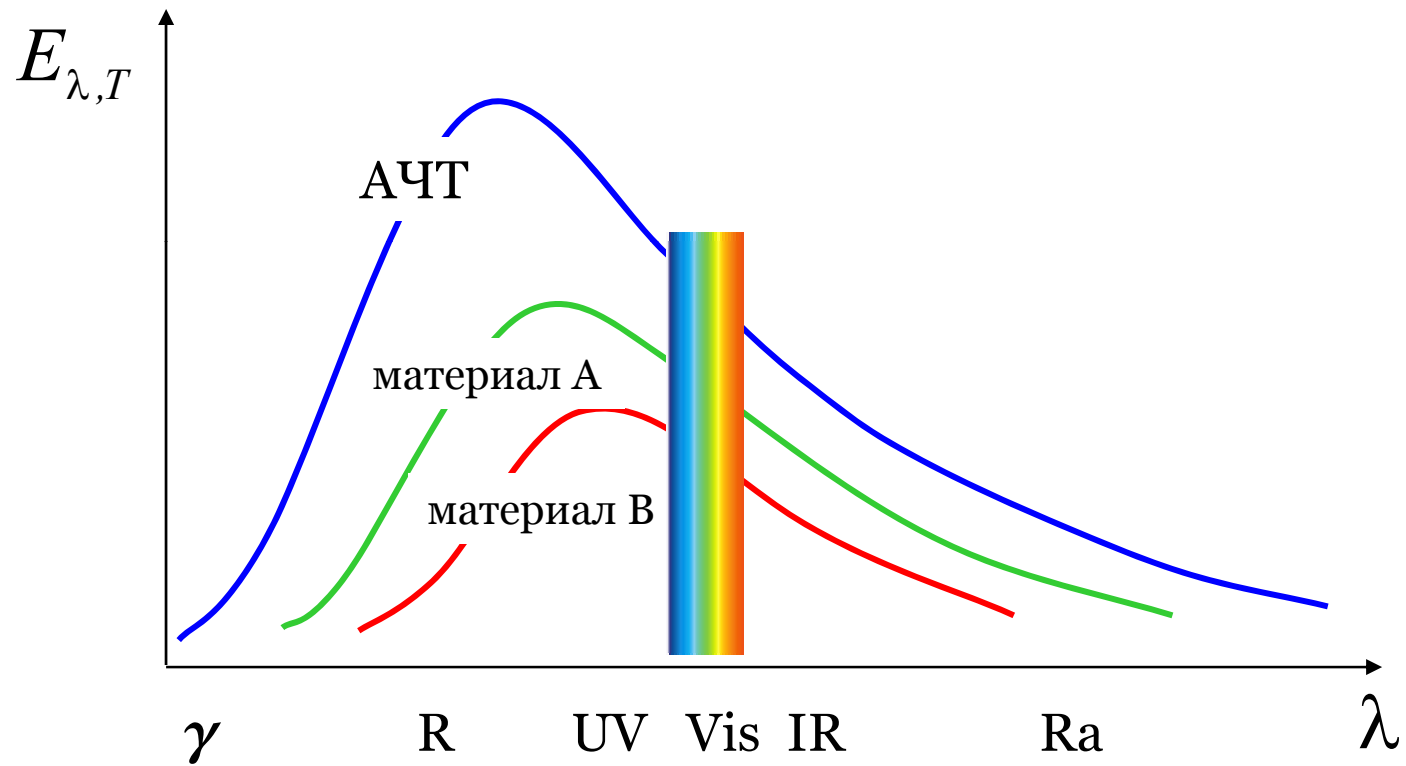
- При излъчване, енергията на топлинно движение преминава в енергия на ЕМ вълни.
- При поглъщане на ЕМ вълни енергията се превръща в енергия на топлинното движение.

И в двата случая взаимните превръщания на енергията преминава през трептене на електричните заряди. Затова емисионната и абсорбционната способност са тясно свързани.

$$\frac{e_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} = f(\lambda, T) \text{ - универсална функция на } \lambda \text{ и } T$$

$$\text{За АЧТ} \quad a_{\lambda,T} = 1; \Rightarrow e_{\lambda,T} = f(\lambda, T) = E_{\lambda,T}$$

Крива на излъчване на АЧТ



Закони на Стефан–Болцман и Вин

1879 година. **Йозеф Стефан** на основата на анализ на експериментални данни заключава, че мощността на топлинното излъчване е пропорционална на площта на излъчващата повърхност и на четвъртата степен на абсолютната температура:

$$P = e\sigma ST^4 \quad e = 0..1 \quad e = 1(АЧТ)$$

1884 година. **Л. Болцман** извежда теоретически тази зависимост от термодинамични съображения.

$$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ [W/m}^2\text{K}^4\text{]}$$

~1890 година. От принципите на термодинамиката **Вин** получава, че с увеличаване на температурата максимумът на излъчване се измества към по-късите дължини на вълната:

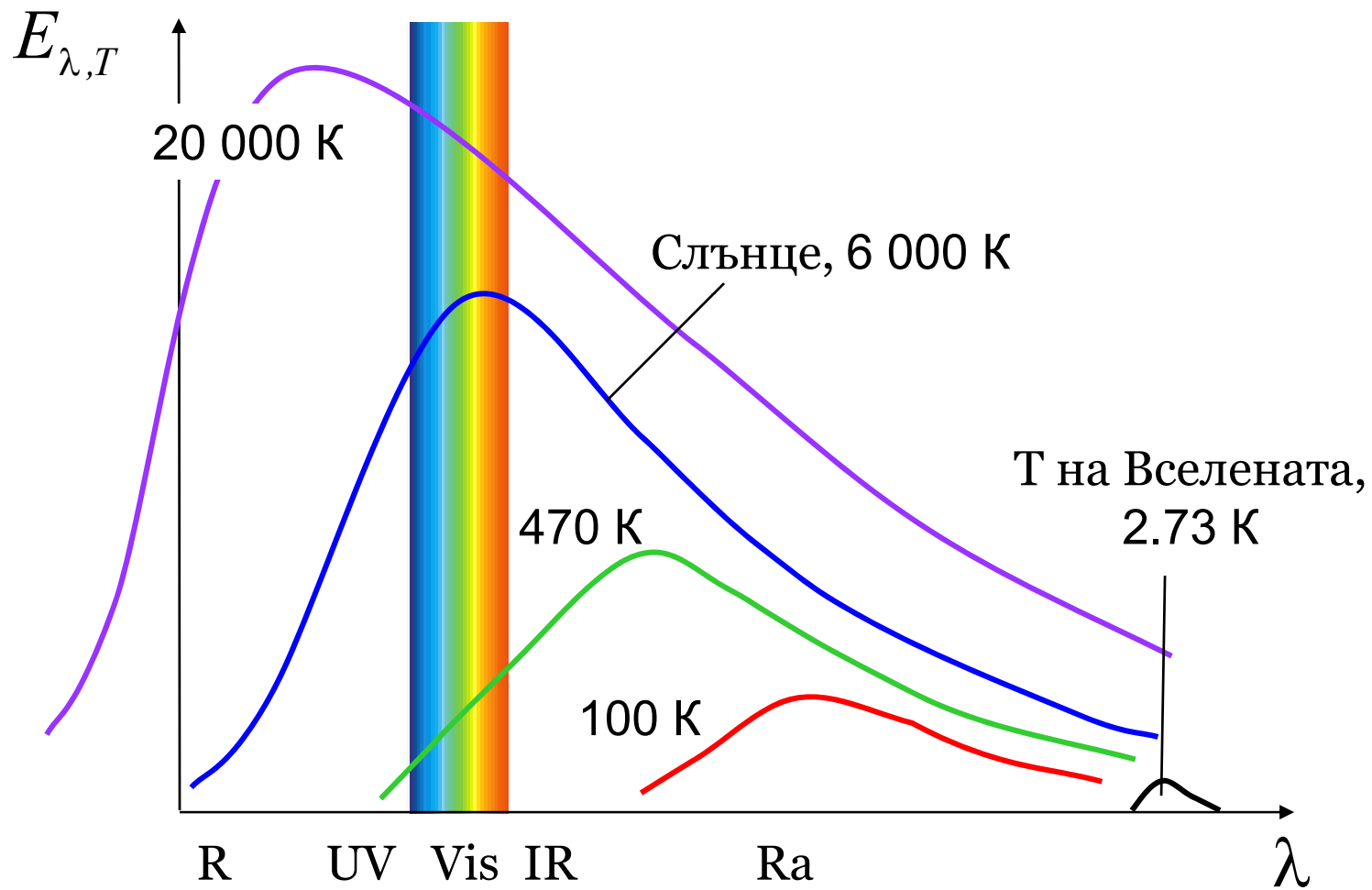
$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}$$

$$E_{\lambda,T} = \frac{f(\lambda T)}{\lambda^5}$$

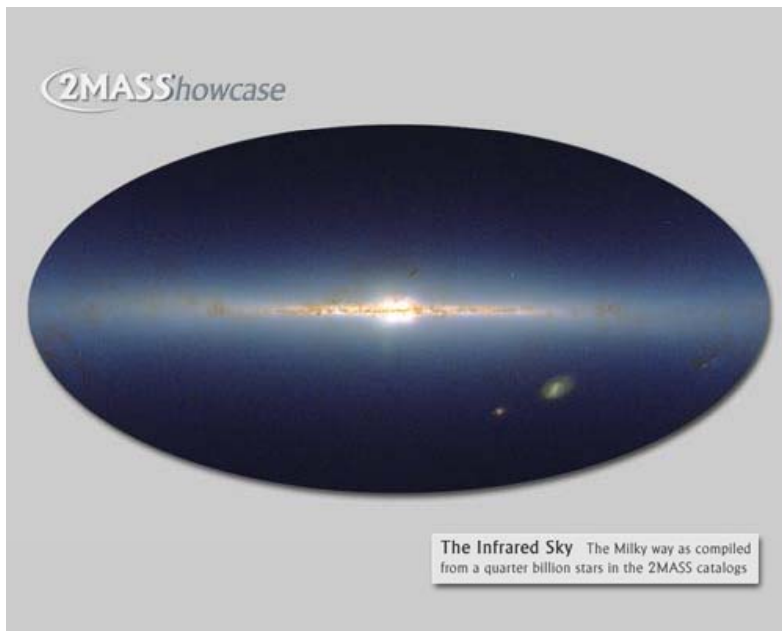
Описва добре късовълновата част на кривата на излъчване на АЧТ, но не и дълговълновата.

$$b = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ [mK]}$$

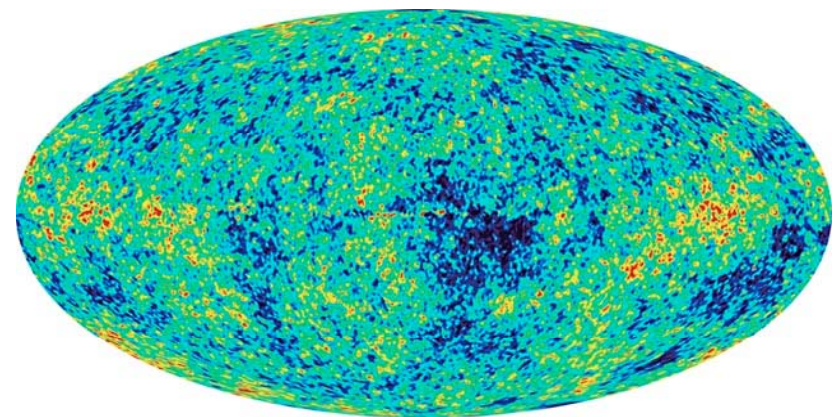
Примери



Примери



Млечният път



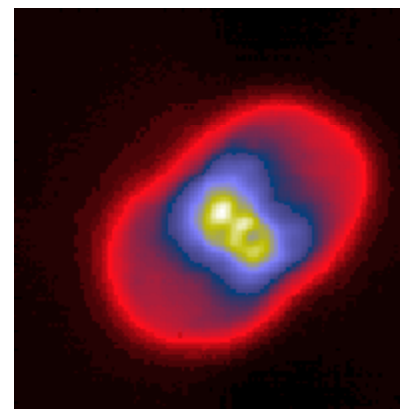
Топлинно излъчване на Млечния път



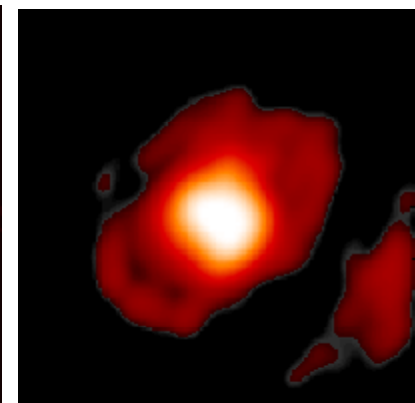
Прахови облаци, нагreti от млади звезди



Eta Carina-Vis



Eta Carina-IR



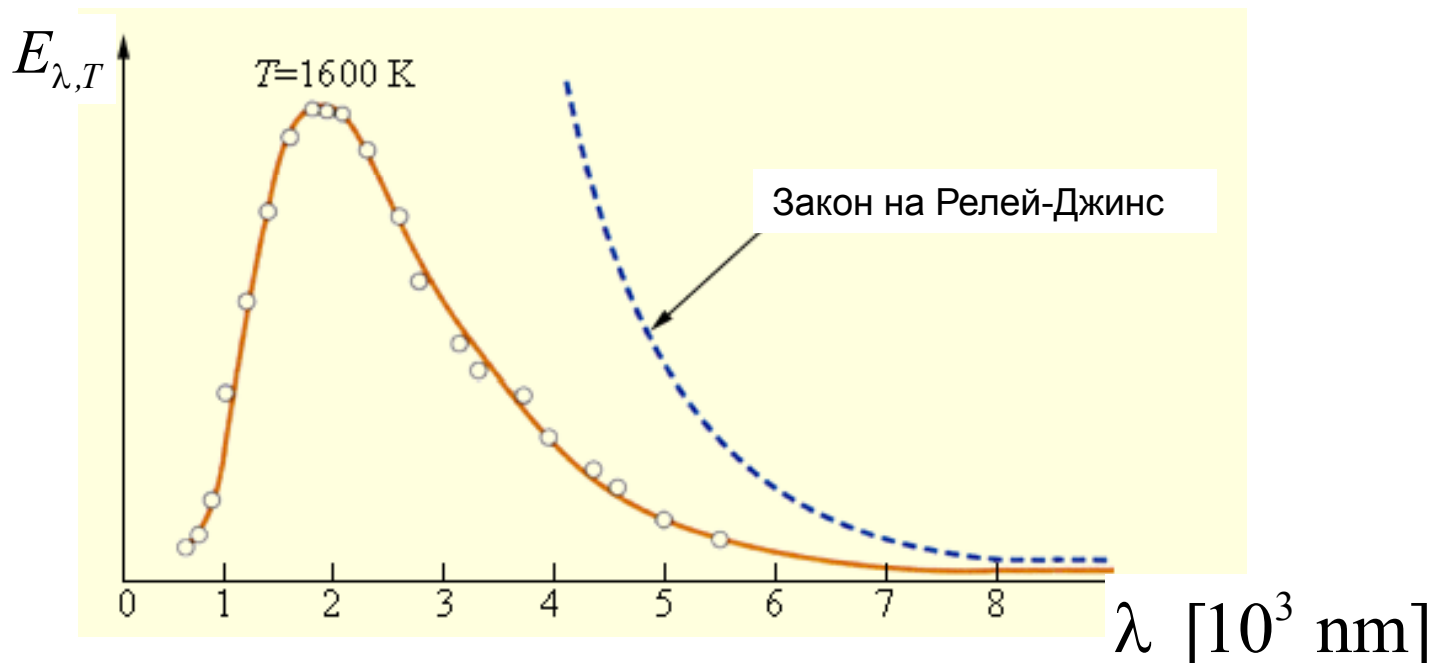
Eta Carina-Ra

Закон на Релей-Джинс

1900 година. Д. Релей, прилага теоремата от МКТ за равномерно разпределение на енергията по степените на свобода при ТДР към равновесното излъчване в кухина. Подробно тази идея е развита по-късно от Джинс. Така е получена зависимостта:

$$E_{\lambda,T} = 8\pi kT\lambda^{-4}$$

Описва добре дълговълновата част на кривата на излъчване на АЧТ, но не и късовълновата.



Ултравioletова катастрофа!

Закон на Планк

Хипотеза:

Излъчването и поглъщането на електромагнитните вълни става на порции (кванти) с енергия

$$E = h\nu$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ [J.s]}$$


- квант действие

$$E(\nu) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(h\nu / kT) - 1}$$

Следствия:

$\lambda \rightarrow 0$ – закон на Вин

$\lambda \rightarrow \infty$ - закон на Релей - Джинс



Основи на атомната физика и квантовата механика

Фотоелектричен ефект



Г. Херц

1887 година – Г. Херц установява, че металите се зареждат положително под действие на ултравиолетова светлина.

1888 г. Столетов изследва основните закономерности



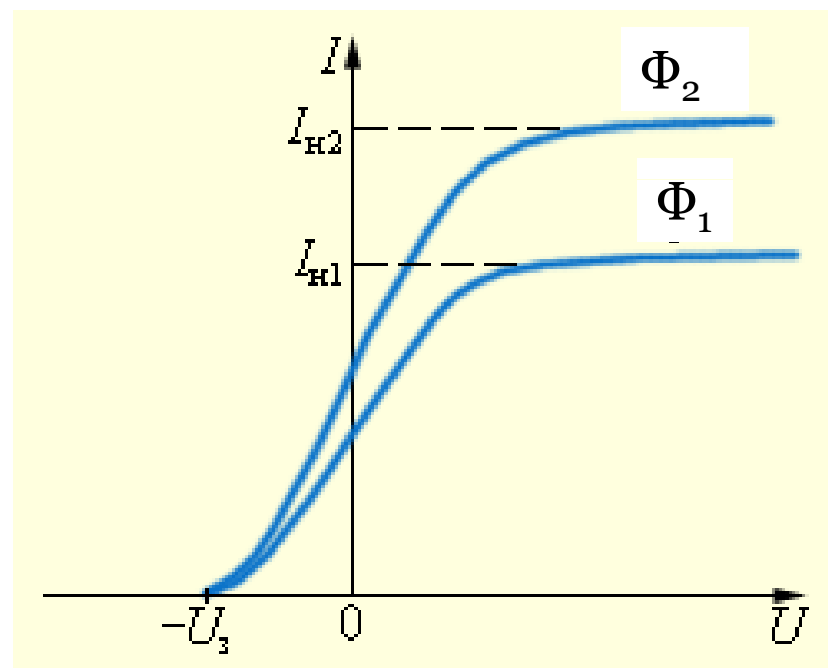
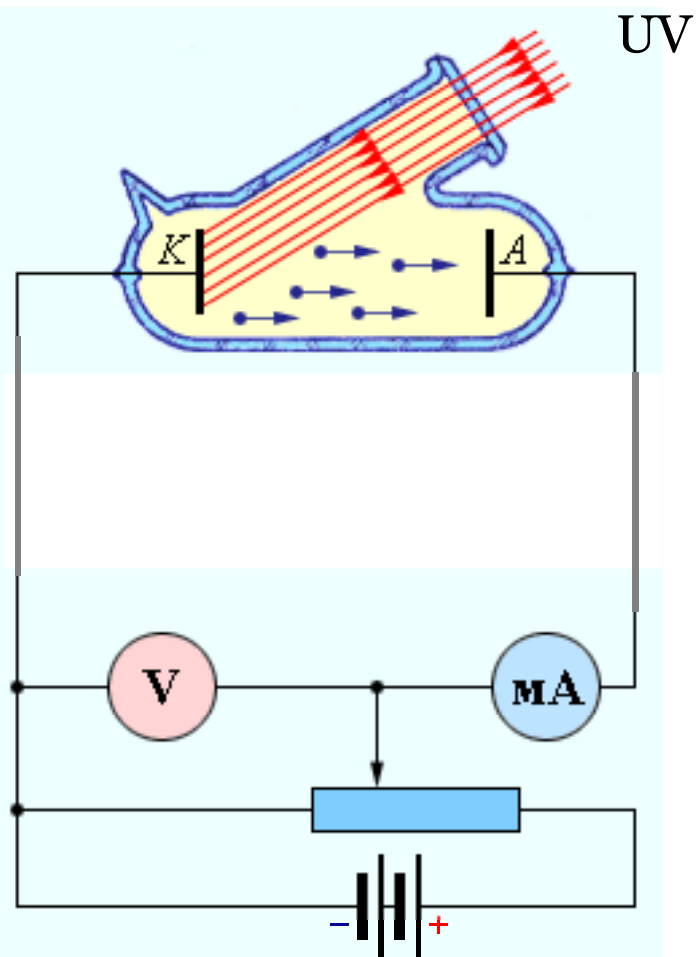
А. Столетов

Ленард и Томсон измерват специфичния заряд на напускащите частици и установяват, че това са електрони.

Видове:

- Външен
- Вътрешен
- Галваничен
- Фотойонизация

Изследване

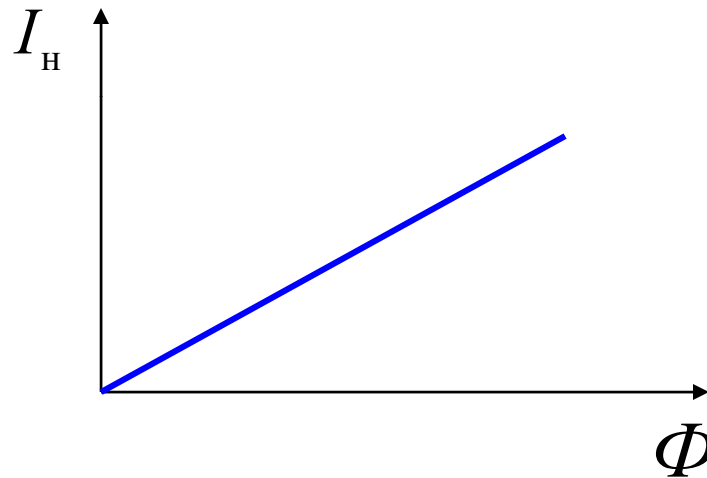


Волт-амперна характеристика

Основни закономерности

I. Наситеният фототок е пропорционален на светлинния поток.

$$I = \gamma \Phi$$



Светлинна характеристика на катода

γ [$\mu\text{A/Lm}$] - **чувствителност на катода**: спектрална – за дадена λ
интегрална – за бяла светлина

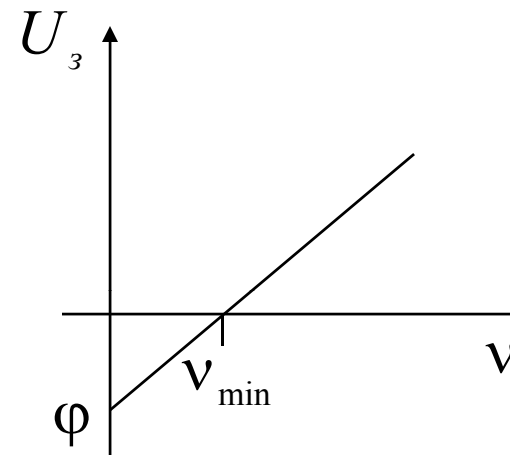
II. Задържащото напрежение е пропорционално на честотата на светлината и не зависи от светлинния поток.

a - универсална константа

φ - характеризира катода

$$E_{k,\max} = eU_3$$

$$U_3 = a\nu - \varphi$$



Максималната кинетична енергия на електроните е пропорционална на честотата на светлината и не зависи от светлинния поток.

III. Съществува “червена граница” за веществото на катода:

$$\lambda_{\max} ; \nu_{\min}$$

IV. Явлението е безинерционно.

за $\nu < \nu_{\min}$ няма
 $\lambda > \lambda_{\max}$ фотоефект



А. Айнщайн

Обяснение на фотоефекта

Електромагнитните вълни се излъчват, разпространяват и поглъщат на порции с енергия $h\nu$.

Уравнение на Айнщайн:

$$h\nu = A + \frac{mV_{max}^2}{2}$$

A – отделителна работа; $h\nu$ - енергия на фотона; $\frac{mV_{max}^2}{2}$ - енергия на свободния електрон;

Всеки електрон поглъща мигновено и изцяло точно един фотон. \Rightarrow IV закон: $\tau \sim 10^{-9} s$

\Rightarrow I закон: Броят на отделените електрони е пропорционален на светлинния поток (\sim броя на фотоните).

$$I = ne = \gamma\Phi$$

$$\frac{mV_{max}^2}{2} = h\nu - A$$

$$\Rightarrow \text{II закон: } eU_3 = eav - e\varphi$$

$$a = \frac{h}{e} \text{ - универсална константа} \quad \varphi = \frac{A}{e} \text{ - отделителен потенциал на катода}$$

За да има фотоефект, енергията на фотона трябва да е равна най-малко на отделителната работа.

$$\frac{mV_{max}^2}{2} = 0; \quad h\nu \geq A \quad \Rightarrow \text{III закон: } \nu \geq \frac{A}{h} = \nu_{min}$$

Приложения на фотоефекта




Международната космическа станция

Фотоелектронни прибори - основани са на превръщане на светлинния сигнал в електрически:

- Електричното съпротивление на полупроводника пада при осветяване (**вътрешен фотоефект**) – създават се фотосъпротивления;
- **Галваничният фотоефект**, при който възниква фотоелектродвижещо напрежение позволява да се преобразува светлинната енергия в електрическа в слънчевите батерии;
- **Фотоелектронните умножители** позволяват да се регистрират много слаби излъчвания, дори отделни фотони;
- Анализът на енергиите и ъглите на излитане на фотоелектроните позволява да се изследва повърхността на материалите.

През 2004 г. японските изследователи създадоха нов тип полупроводников прибор - **фотокондензатор**, съединяващ в себе си фотоелектричен преобразовател и средство за съхранение на енергията - два пъти по-ефективен от обикновените силициеви слънчеви батерии.



Основи на атомната физика и квантовата механика

Строеж на атома

Предпоставки за създаване на модел на атома

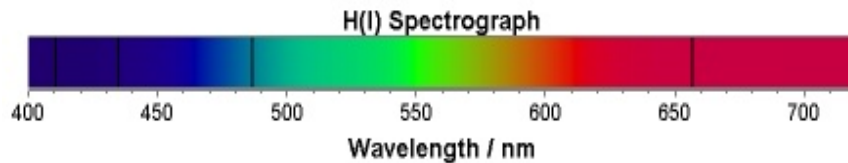
1. Топлинно лъчение.

$$E(\nu) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1}$$

2. Фотоелектричен ефект.

$$h\nu = A + \frac{mV_{\max}^2}{2}$$

3. Линейни спектри на атомите.



Линии на водорода във видимата част на спектъра

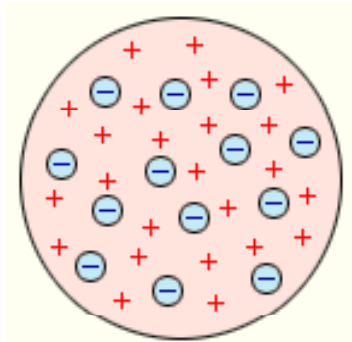
Серия на Балмер

$$\nu_n = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right); \quad n = 3, 4, \dots$$

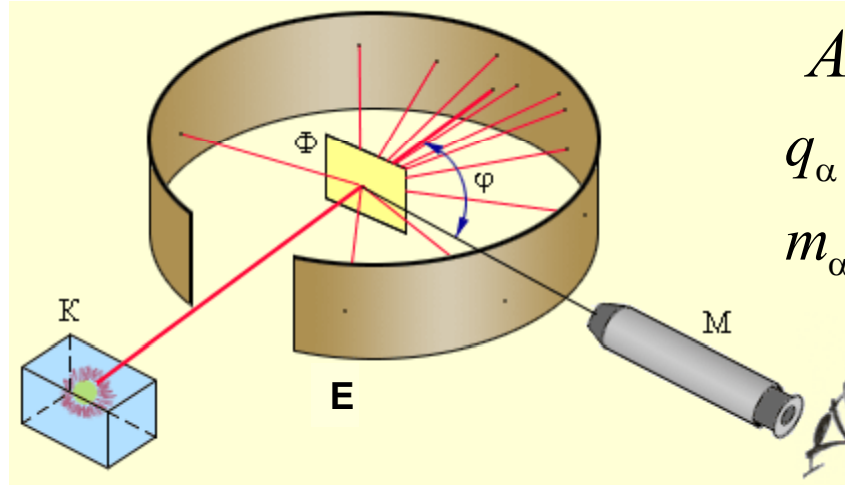
формула на Ритц $\nu_{n,k} = R \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right); \quad n = k + 1, k + 2, \dots$ $R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ - константа на Ридберг

$k = 1$ – Лайман; $k = 2$ – Балмер; $k = 3$ – Пашен; $k = 4$ – Брякет, $k = 5$ – Пфунт и т.н.

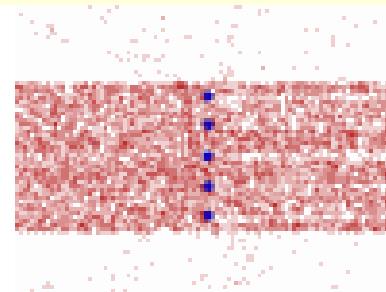
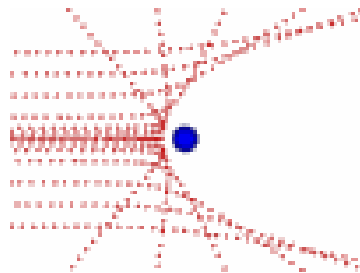
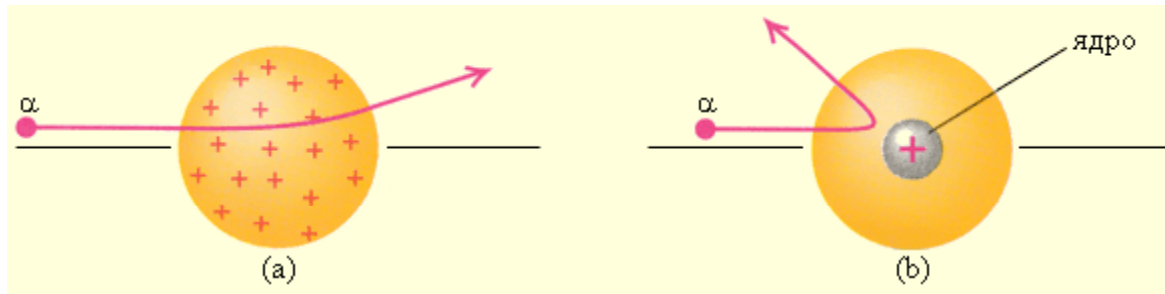
5. Модел на атома от Дж. Томсон (1903 г).

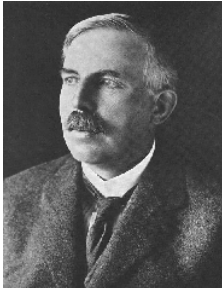
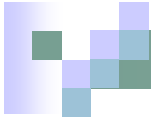


6. Опит на Ръдърфорд по разсейване на алфа-частици върху златно фолио.



Разсейване на алфа-частици в моделите на Томсон (а) и Ръдърфорд (б).

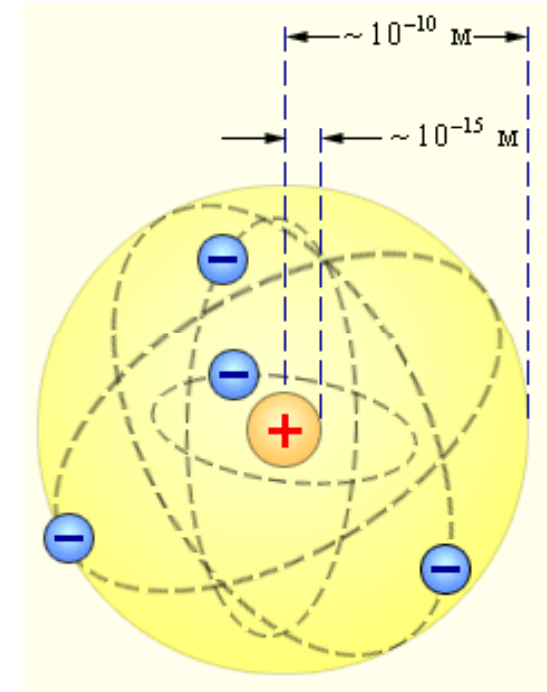




Планетарен модел на Ръдърфорд

(класически)

1. Почти цялата маса на атома е съсредоточена в ядро с размери $R_{\text{я}} \sim 10^{-15} \text{ m}$;
2. Ядрото има електричен заряд $Q_+ = Z.e$.
3. Електроните образуват външна обвивка с размер $R_{\text{а}} = 10^{-10} \text{ m}$ и заряд $Q_- = -Z.e$. (Z – номер на елемента = броя на електроните в обвивката)
4. Атомът като цяло е електронеутрален. Между електроните и ядрото действуват кулонови сили, които са центростремителни.



$$\frac{mV^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$



Моделът не обяснява защо електроните въпреки че се движат ускорително, не излъчват.

От закона за запазване на момента на импулса следва, че когато

$$L = m\omega^2 r^2 = \text{const}$$

$$r \downarrow \quad \omega \uparrow$$



следователно излъчването трябва да има непрекъснат спектър, а се наблюдава прекъснат.



Атом на Бор

(полукласически)

ПОСТУЛАТИ:

1. Атомите и молекулите могат да съществуват само в определени енергетични състояния (стационарни), в които те не поглъщат и не излъчват енергия.

2. При преход между две стационарни състояния E_k и E_n се поглъща или излъчва електромагнитна вълна чрез цели кванти с енергия

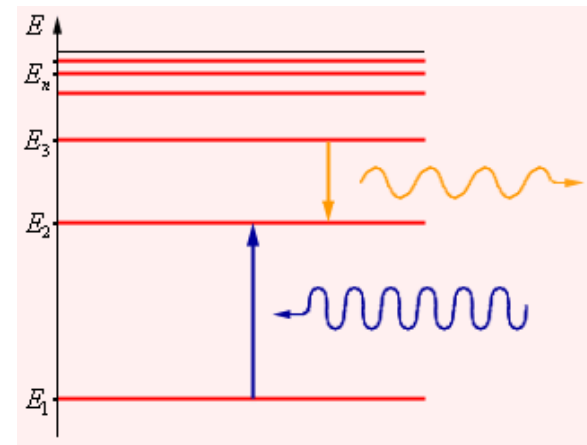
$$h\nu = E_n - E_k$$

3. Стационарните състояния се определят от условието:

“Орбиталният момент на импулса на електрона да е квантуван.”

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

$n = 1, 2, 3, \dots$ - **КВАНТОВО ЧИСЛО**



Модел на водородния атом

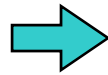
(полукласически)

Стационарно състояние:

$$mV_n^2 r_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$$

$$\frac{mV_n^2}{r_n} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}$$

Кръгова орбита



$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m Z e^2} n^2$$

- радиус на орбитата

$$V_n = \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 h} \cdot \frac{1}{n}$$

- скорост

$$E_k = \frac{mV_n^2}{2} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} \quad E_p = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$$

пълна
механична
енергия

$$E = E_k + E_p = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -E_k$$

$$E = -\frac{Z^2 e^4 m}{8h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$



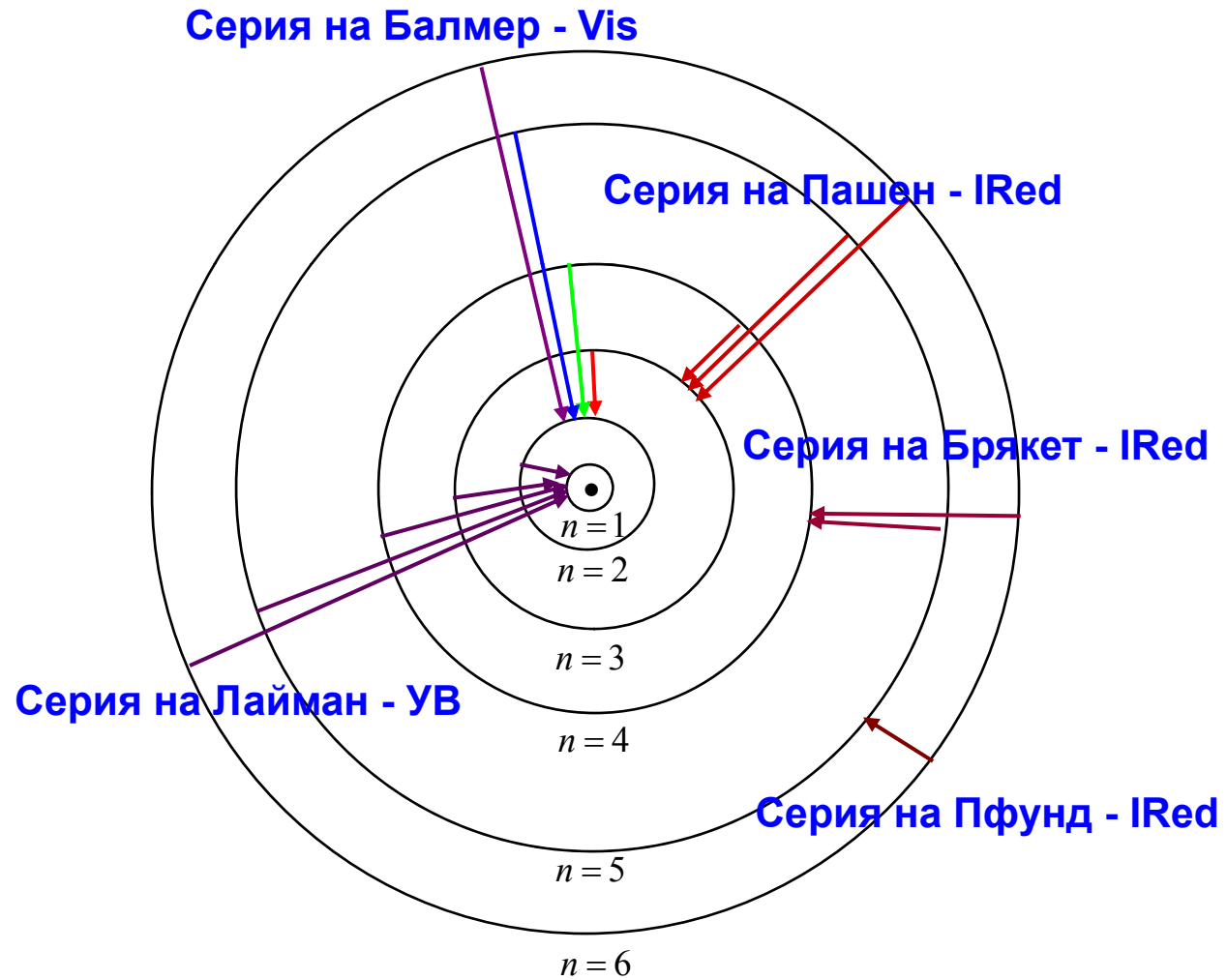
Пълната енергия на електрона в атома е отрицателна!


Радиусът на орбитата, скоростта и енергията на електрона са квантувани!

Линеен спектър на водорода

$$\nu = \frac{E_n - E_k}{h}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$





Основи на атомната физика и квантовата механика

Корпускулярно-вълнов
дуализъм



Електромагнитни вълни

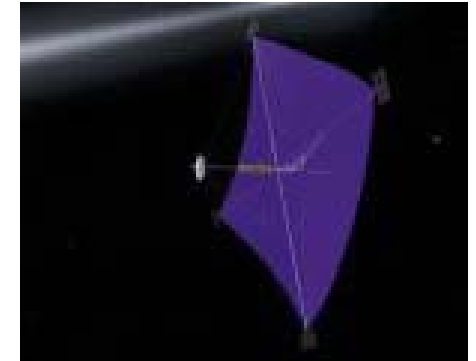
Вълнови свойства:

Енергия на един фотон:

$$E = h\nu$$

Уравнение на Айнщайн:

$$E = mc^2$$



Следователно, светлината може да упражнява налягане!

Корпускулярни свойства:



Маса на фотона

$$m = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{c\lambda}$$

Импулс на фотона

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



Проявяват вълнови свойства при:	Проявяват корпускулярни свойства при
Рефракция	Топлинно излъчване
Интерференция	Фотоелектричен ефект
Дифракция	Комптънов ефект
Поляризация	Рентгенови лъчи
	Линейни атомни спектри

Микрочастици

1923 г. **ХИПОТЕЗА** на дьо Бройл:

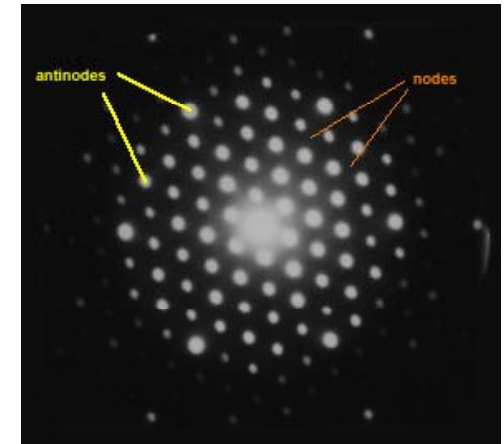
“**С всеки микрообект са свързани от една страна корпускулярни характеристики – енергия и импулс, а от друга – вълнови – честота и дължина на вълната.**”

На всяка микрочастица с импулс
се приписва дължина на вълната

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

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}$$
$$\lambda_e = \frac{12,3}{\sqrt{U}} \cdot 10^{-10} [\text{m}]$$

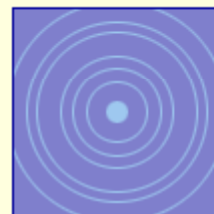
ПОТВЪРЖДЕНИЕ: 1927 г. Дейвисън и Джермер наблюдават дифракция на електронен сноп върху никелов кристал, а Томсон през 1928г. - през златно фолио.



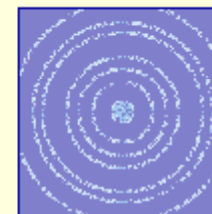
При ниски честоти, когато размерите на препятствията са сравними с дължината на вълната (например в радиодиапазона) доминират вълновите свойства.

Когато честотата на вълната е по-висока от тази на **UV**, вълновите свойства са по-трудно наблюдаеми и започват да доминират корпускулярните свойства.

През кристал електроните преминават като вълна, а с фотоемулсията взаимодействуват като частици.



(a)



(b)

Дифракция на електрони:

(a) дълга, (b) къса експозиция



1500 kg, 5 km/h

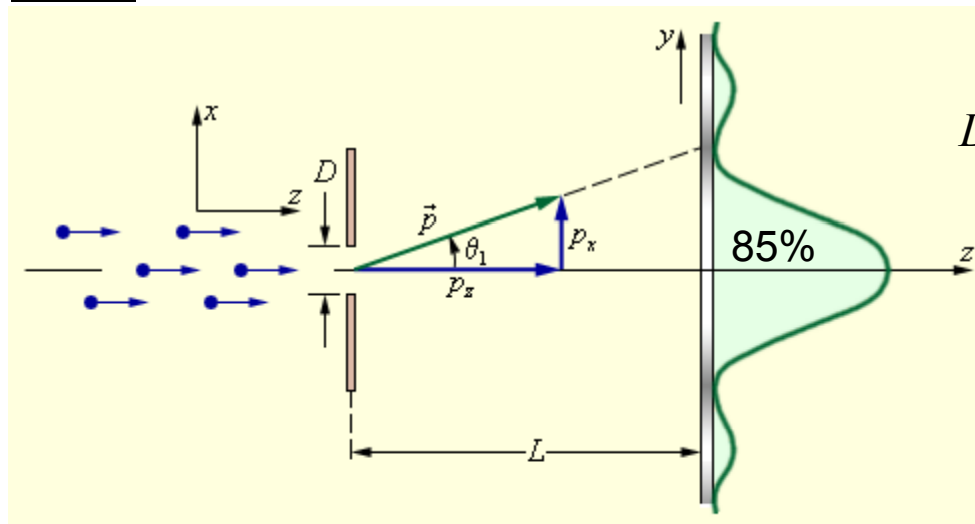
$$\lambda_{\text{слон}} = 8,8 \cdot 10^{-42} [\text{m}]$$

Не съществуват кристали с такива размери, може би затова слонът не проявява в ежедневието вълновата си природа.

Принцип на Хайзенберг

модел

фотоплака



Дифракция на електронен сноп през един
процеп

$$D \sin \theta_1 = \lambda \quad p_y = p \sin \theta_1 = \frac{h}{\lambda} \sin \theta_1$$

$$p_y = \frac{h}{D}$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq h$$

Не е възможно едновременно и точно да
се определят координатите и импулса.

Вълнова функция

$\Psi(x, t)$ Характеризира вълновия процес

$|\Psi|^2$ Определя вероятността микрочастицата в момента t да има координата x .

$|\Psi|^2 \Delta V$ Определя вероятността микрочастицата в момента t да се намира в обема ΔV

$$\int_0^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1 \quad \text{Частицата съществува!}$$

Конкретният вид на вълновата функция се определя от характера на движението и взаимодействието с други частици.

Основно уравнение на квантовата механика

Уравнение на Шрьодингер

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - U)\Psi = 0$$

В едномерния случай:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - U)\Psi = 0$$


Решението му е **вълнова функция**, $\Psi(x, t)$

Уравнението има решение $\forall E \geq 0$

и за дискретни стойности на E , когато $E < 0$

Собствени стойности E

Собствени функции $\Psi(E)$



Основи на атомната физика и квантовата механика

Квантовомеханичен модел на
атома

Квантови числа.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \Psi = 0 \quad E = -\frac{Z^2 e^4 m}{8h^2 \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Състоянията се различават по енергия, размер, форма и ориентация на орбитата.

$\forall n \exists n^2 \Psi(x,t)$ - n^2 състояния за електрона в атома

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

главно кв. число - определя размера на орбитата.

Квантуване на орбиталния момент на импулса:

$$L = \frac{h}{2\pi} \sqrt{l(l+1)}$$

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

орбитално кв. число - определя формата на орбитата.

$$a_n \sim n^2; \quad b_{n,l} = \frac{l+1}{n} a_n; \quad \text{при } l = n-1 \text{ орбитата е окръжност}$$

Квантуване на магнитния момент:

$$M_L = \frac{e}{2m} \cdot \frac{h}{2\pi} \cdot m$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

магнитно кв. число - определя ориентацията на голямата полуос.

$$\Psi_{n,l,m}$$

Определя състоянието на електрон с енергия E , момент на импулса L и проекцията му L_x в магнитно поле, зададени от (n, l, m)

Многоелектронни атоми.

Квантуване на спиновия магнитен момент:

$$M_s = \frac{ge}{2m} \frac{h}{2\pi} \cdot s$$

$$s = \pm \frac{1}{2}$$

СПИНОВО КВ. ЧИСЛО

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

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

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$$s = \pm \frac{1}{2}$$

Съвкупността от четирите квантови числа **(*n, l, m, s*)** напълно определя състоянието на електрона в атома.

Принцип на Паули:

“В една квантова система не може да съществуват две частици с четири еднакви квантови числа.”

Електронна обвивка

Слой се нарича съвкупността от състояния с еднакво n .

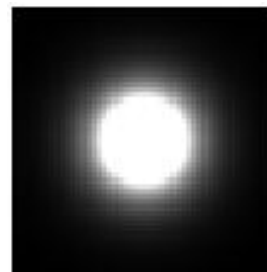
- $n = 1$ K
- $n = 2$ L
- $n = 3$ M
- $n = 4$ N
- $n = 5$ O
- $n = 6$ P
- $n = 7$ Q

Подслой е съвкупността от състояния с еднакво l .

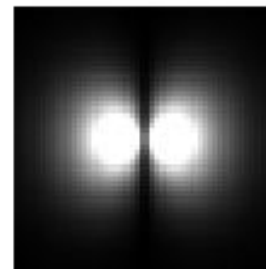
- $l = 1$ s
- $l = 2$ p
- $l = 3$ d
- $l = 4$ f

Общ брой състояния в слой n :

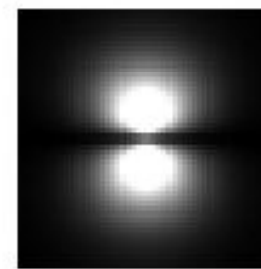
$$Z_n = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$



$n=1$



$n=2, l=1, m=0$



$n=2, l=1, m=1$

$n = 1$	$l = 0$	$m = 0$	$s = 1/2$ $s = -1/2$	2
$n = 2$	$l = 0$	$m = 0$	$s = 1/2$ $s = -1/2$	2
$n = 2$	$l = 1$	$m = -1$	$s = 1/2$ $s = -1/2$	2
$n = 2$	$l = 1$	$m = 0$	$s = 1/2$ $s = -1/2$	2
$n = 2$	$l = 1$	$m = 1$	$s = 1/2$ $s = -1/2$	2

Периодична система

Група	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
Период																			
1	1 <u>H</u>																		2 <u>He</u>
2	3 <u>Li</u>	4 <u>Be</u>											5 <u>B</u>	6 <u>C</u>	7 <u>N</u>	8 <u>O</u>	9 <u>F</u>	10 <u>Ne</u>	
3	11 <u>Na</u>	12 <u>Mg</u>											13 <u>Al</u>	14 <u>Si</u>	15 <u>P</u>	16 <u>S</u>	17 <u>Cl</u>	18 <u>Ar</u>	
4	19 <u>K</u>	20 <u>Ca</u>	21 <u>Sc</u>	22 <u>Ti</u>	23 <u>V</u>	24 <u>Cr</u>	25 <u>Mn</u>	26 <u>Fe</u>	27 <u>Co</u>	28 <u>Ni</u>	29 <u>Cu</u>	30 <u>Zn</u>	31 <u>Ga</u>	32 <u>Ge</u>	33 <u>As</u>	34 <u>Se</u>	35 <u>Br</u>	36 <u>Kr</u>	
5	37 <u>Rb</u>	38 <u>Sr</u>	39 <u>Y</u>	40 <u>Zr</u>	41 <u>Nb</u>	42 <u>Mo</u>	43 <u>Tc</u>	44 <u>Ru</u>	45 <u>Rh</u>	46 <u>Pd</u>	47 <u>Ag</u>	48 <u>Cd</u>	49 <u>In</u>	50 <u>Sn</u>	51 <u>Sb</u>	52 <u>Te</u>	53 <u>I</u>	54 <u>Xe</u>	
6	55 <u>Cs</u>	56 <u>Ba</u>	* 71 <u>Lu</u>	72 <u>Hf</u>	73 <u>Ta</u>	74 <u>W</u>	75 <u>Re</u>	76 <u>Os</u>	77 <u>Ir</u>	78 <u>Pt</u>	79 <u>Au</u>	80 <u>Hg</u>	81 <u>Tl</u>	82 <u>Pb</u>	83 <u>Bi</u>	84 <u>Po</u>	85 <u>At</u>	86 <u>Rn</u>	
7	87 <u>Fr</u>	88 <u>Ra</u>	* * 103 <u>Lr</u>	104 <u>Rf</u>	105 <u>Db</u>	106 <u>Sg</u>	107 <u>Bh</u>	108 <u>Hs</u>	109 <u>Mt</u>	110 <u>Ds</u>	111 <u>Rg</u>	112 <u>Uub</u>	113 <u>Uut</u>	114 <u>Uuq</u>	115 <u>Uup</u>	116 <u>Uuh</u>	117 <u>Uus</u>	118 <u>Uuo</u>	

*Лантаниди	*
**Актиниди	*

57 <u>La</u>	58 <u>Ce</u>	59 <u>Pr</u>	60 <u>Nd</u>	61 <u>Pm</u>	62 <u>Sm</u>	63 <u>Eu</u>	64 <u>Gd</u>	65 <u>Tb</u>	66 <u>Dy</u>	67 <u>Ho</u>	68 <u>Er</u>	69 <u>Tm</u>	70 <u>Yb</u>
89 <u>Ac</u>	90 <u>Th</u>	91 <u>Pa</u>	92 <u>U</u>	93 <u>Np</u>	94 <u>Pu</u>	95 <u>Am</u>	96 <u>Cm</u>	97 <u>Bk</u>	98 <u>Cf</u>	99 <u>Es</u>	100 <u>Fm</u>	101 <u>Md</u>	102 <u>No</u>

Изграждане на периодичната система

1. Принцип на Паули.
2. Принцип за минималната пълна енергия на системата.

Броят на електроните расте с атомния номер.

Изграждането на слоевете започва от К слоя с $n = 1$ - H и He.

В границите на всеки слой се запълват подслоеве с нарастване на l .

Броят на електроните в последния незапълнен слой (валентен), определя номера на групата.

