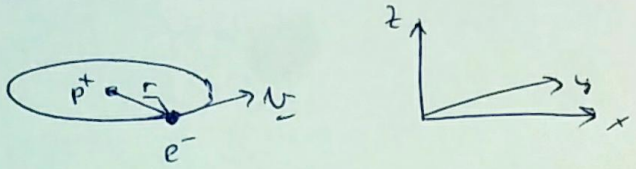


I/E A klasszikus Rutherford-modell neu magyarázta

az atomok vander Waals-erőit

Ⓜ R-modell: p⁺ rögzített, e⁻ körpályán mozog egyenletesen, Coulomb-erő határolja



Ⓜ feladat: r = 0,2 Å (1 Å = 10⁻¹⁰ m = 10⁻¹ nm)

a) v = ? $\frac{m}{s}$, v = ? c

b) $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} = ?$

c) E_{mozg} = ? E_{helyzet} = ? E_{teljes} = E_{mozg} + E_{helyzet} = ?

d) E_{teljes}(L_z) = ?

Megoldás: a) $v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e r}} \approx 3,6 \times 10^6 \frac{m}{s} \approx 0,012 c$

b) $\underline{L} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ L_z \end{pmatrix} = L_z \underline{e}_z = \sqrt{\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0}} \underline{e}_z$

$L_z = 6,5 \times 10^{-35} \text{ kg } \frac{m^2}{s} = 0,61 \text{ h}$

c) $E_{mozg} = \frac{1}{2} m_e v^2 \approx 36 \text{ eV}$

$E_{helyzet} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \approx -72 \text{ eV}$

$E_{teljes} \approx -36 \text{ eV}$

d) $E(L_z) = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 L_z^2}$

| | |
|-----------------------------------------------------------------|--------------------------|
| $e \approx 1,6 \times 10^{-19} \text{ As}$ | — e ⁻ töltése |
| $m_e \approx 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ | — e ⁻ tömege |
| $\epsilon_0 \approx 8,9 \times 10^{-12} \frac{s^4 A^2}{kg m^3}$ | — vákuum permittivitása |

③ liba 1: r tetraedleges \rightarrow E tetraedleges \rightarrow Rutherford-atom
absorpciójához energiájához folytonos \rightarrow nincs vonalozás
szület \rightarrow γ kísérlet

④ liba 2: R-atom e^- -ja hőpályán mozg \rightarrow sugároz \rightarrow
 e^- energiát veszít \rightarrow H-atom nem stacionárius \rightarrow
 γ a megfigyelésnek

1/F A félklasszikus Bohr-modell megmagyarázza a vonal-
símképet

① Bohr-modell: Rutherford-modell

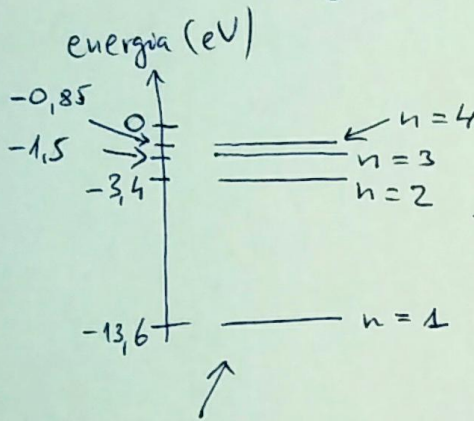
+

t.f.h. L_z kvantált, $L_z = n \cdot h$ $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$

② következmény: L_z kvantált } E kvantált, "diszkrét"
 energia $E = E(L_z)$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

$\approx 13,6 \text{ eV} = 1 \text{ Ry}$ (rydberg)



elnevezésed:

n -ik főkvantumszámú

"energiaszint", "nívó", "elektronállapot"

"aláállapot"

③ $E_3 - E_2 = 1,9 \text{ eV}$ ← Balmer- α } Bohr-modell
 $E_4 - E_2 = 2,55 \text{ eV}$ ← Balmer- β } megmagyarázza a H-atom
 vonal-
 símképet

④ de: Bohr-modell nem magyarázza meg

- a periódusos rendszer szabályosságait

- mágnes térbe helyezett H-gáz ~~abszorpció~~ abszorpció spektrumát

- stb...

I/6 A H-atom energiápoltszám és energiasajátállapotai

① klasszikus mechanikában (is) léteznek kötétt állapotok és szórás állapotok

pl: golyós labda + gödör

helyzeti energia:

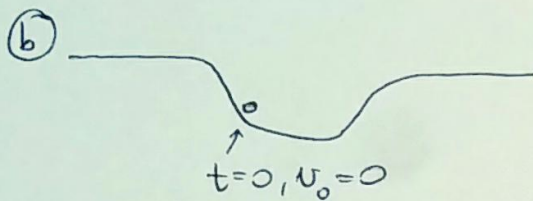
$$V(x) = -V_0 e^{-x^2/2l^2}$$



$$E = E_m + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$E(t=0) = \frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{p_0^2}{2m} > 0 \quad \text{"szórás állapot"}$$

kijut a gödörből



"kötétt állapot"
rezeg a gödörben

$$E(t=0) = -V_0 e^{-\frac{x_0^2}{2l^2}} \leftarrow E(t=0) \in [-V_0, 0]$$

② kvantummechanika: labda $\rightarrow e^-$
(H-atom)

gödör $\rightarrow p^+$ által képzett elektronszűrő
potenciálgödör

③ H-atom minimál-modellje 1D-ben:

$$V(x) = -V_0 e^{-x^2/2l^2} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

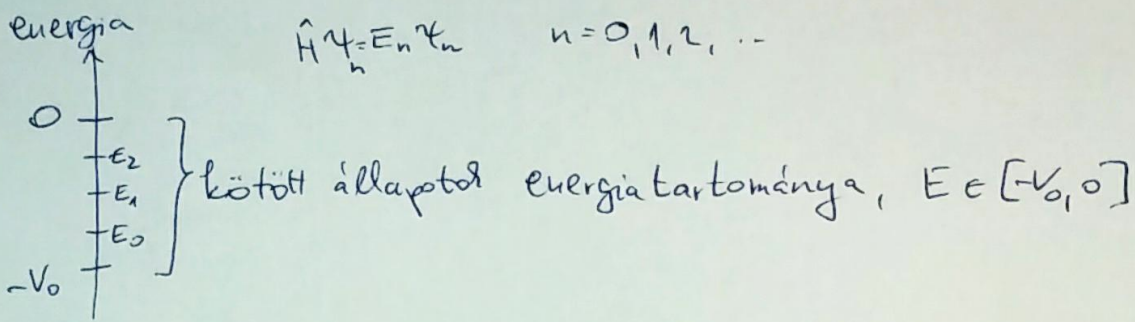
stacionárius megoldásokat (állapotokat) keressük

időfüggetlen Schr-egyenlet: $\hat{H}\psi = E\psi$, azaz

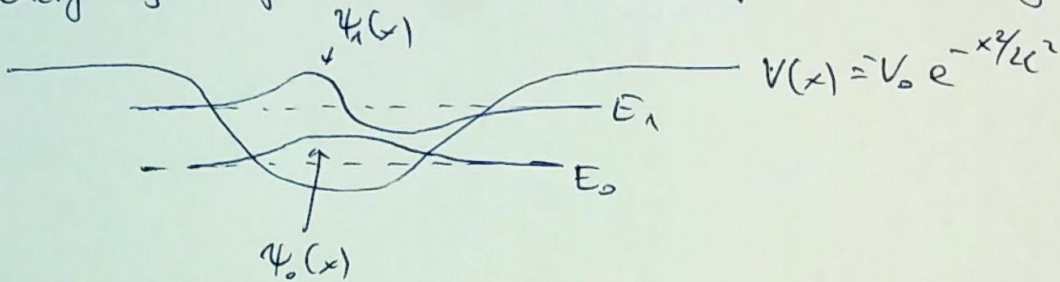
$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \psi''(x) - V_0 e^{-x^2/2l^2} \psi(x) = E\psi(x) \leftarrow$$

kérdés: melyek azok az (E, ψ) párok, melyek megoldják ezt az
egyenletet úgy, hogy ψ normált? Ezek az ún. "stacionárius
állapotok".

④ def: kötött állapotok energiaspektruma diszkrét



⑤ energiasajátállapotok (= stationárius állapotok) kb. alakja:

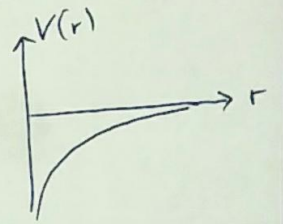


⑥ H-atom valódi (3D) modellje: p^+ Coulomb-potenciálja:

klasszikus energia:

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

→ Hamilton-operátor: $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

→ időfüggetlen Sch-eg.:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) \psi(x,y,z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(x,y,z) = E \psi(x,y,z)$$

Δ (Laplace-operátor)

kötött állapotok: $E \in [-\infty, 0]$

kötött állapotok energiaspektruma diszkrét:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (n=1,2,3,\dots)$$

ugyanaz, mint a Bohr-modellben!

1/H Elektronállapotok hidrogénatomban

1 H-atom: $1e^-$ (rögtitkelt p^+), időfüggtl SE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(r) = E \psi(r)$$

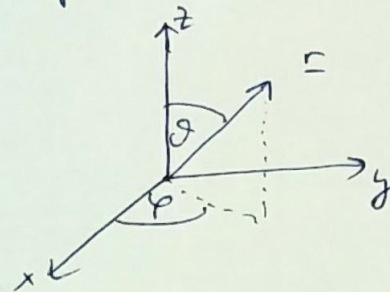
2 keressük (E, ψ) megoldásokat, melyek rögtitkelt állapotok $(E \in]-\infty, 0])$

és ψ normált (elkelt súlyképes hogy $\psi(r \rightarrow 0) = 0$)

3 gömbszimmetria: érdemes gömbi polárkoordinátákat használni:

$$(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \varphi)$$

$$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$



4 ψ -t szorzatalakban keressük: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$

5 áll.: megoldásokat (n, l, m) egész számok indexelik:

$n \in \{1, 2, 3, \dots\}$ "főkvantumszám"

$l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$ "mellékkvantumszám"

$m_l \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ "mágneses kvantumszám"

$$E_{n, l, m_l}(r, \theta, \varphi) = R_{n, l}(r) Y_{l, m_l}(\theta, \varphi)$$

"gömbfüggvények"

⑥ pályák listája

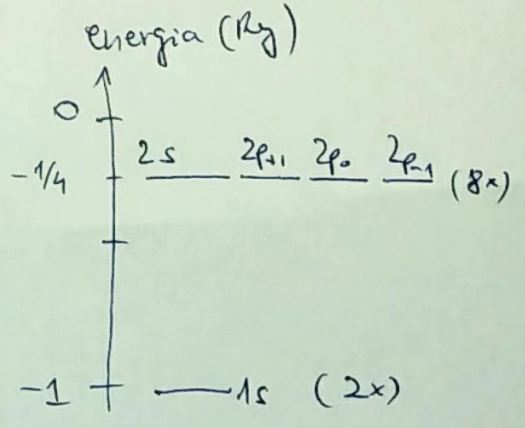
| "név" | n, l, m_l | "energiaszint", "szint", "név" E_{nlm_l} | "stationárius állapot", "állapot", "név" "atomipálya" $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$ |
|-------|------------------|-----------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1s | 1, 0, 0 | $-1 R_y$ | $R_{10}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ |
| 2s | 2, 0, 0 | $-\frac{1}{4} R_y$ | $R_{20}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ |
| 2p | 2p ₋₁ | $-\frac{1}{4} R_y$ | $R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi}$ |
| | 2p ₀ | $-\frac{1}{4} R_y$ | $R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$ |
| | 2p ₊₁ | $-\frac{1}{4} R_y$ | $R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta e^{i\varphi}$ |
| ⋮ | | | |

⑦ "degenerált szint": az $n=2$ főkvantumszámú pálya "négyzetesen degenerált", mert négy különböző pálya tartozik hozzá.

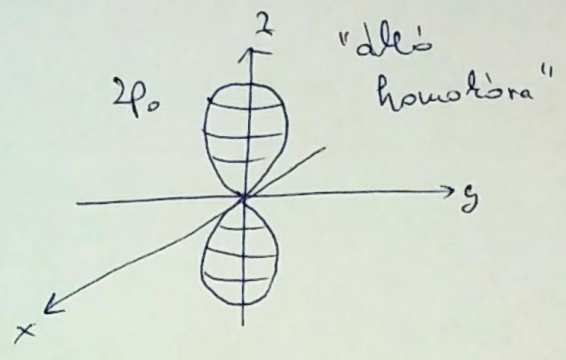
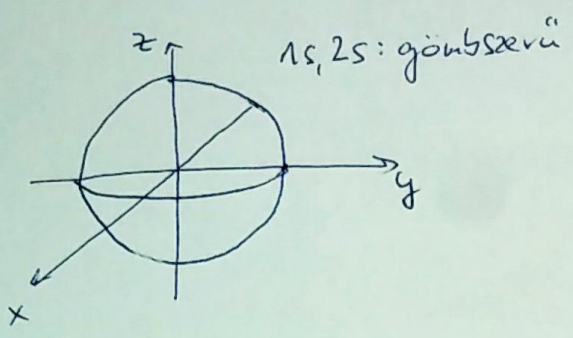
⑧ hányszorosan degenerált az $n=3$ szint?

⑨ minden pályához két spinállapot (↑, ↓) tartozik

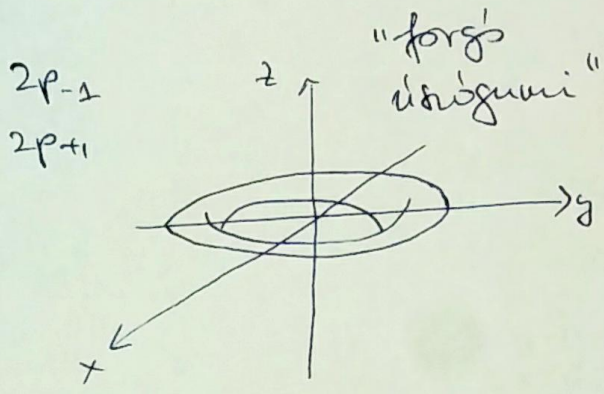
⑩ spin: $n=1$ szint $2 \times$ degenerált
 $n=2$ szint $8 \times$ degenerált
 stb...



11) elektronfelhő alakja



hasznos, mint a Rutherford- és Bohr-modellben →



12) $2p_{-1}, 2p_{+1}$: stacionárius pályák, mégis "forgóak"?

$$\frac{\hbar}{i} \dot{\Psi}(\mathbf{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

$$\rightarrow \dot{S}(\mathbf{r}, t) + \text{div } \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{kontinuitási egyenlet})$$

ahol $S(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ és $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)] = \text{Re} \left\{ \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hat{p}}{m} \Psi(\mathbf{r}, t) \right\}$

↑ "részesűrűség" ↑ "részesáram-sűrűség"

stacionárius állapotban $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r})$,
de lehet hogy $\mathbf{j}(\mathbf{r}) \neq 0$, pl. $2p_{-1}, 2p_{+1}$ pályák.