

**Frumeinda- og ljósfræði:**

# **Upphaf atómeðlisfræði**

## **Kafli 1**

**Jón Tómas Guðmundsson**

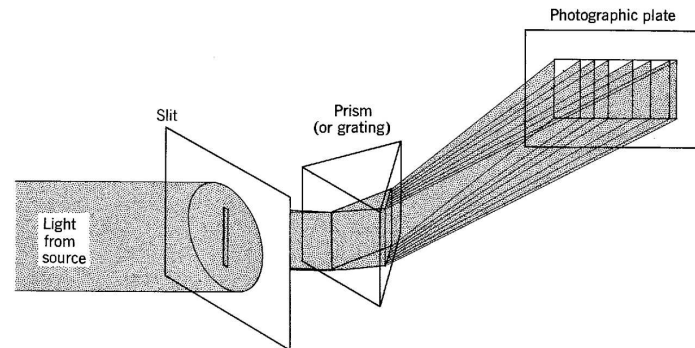
**[tumi@hi.is](mailto:tumi@hi.is)**

**1. vika vor 2020**

## Inngangur

- Upphaf atómeðlisfræði tengist þróun skammtafræðinnar frá því að fyrsta líkanið af vetnisatóminu var sett fram af Bohr
- Atómeðlisfræði er ekki bara hagnýt skammtafræði heldur leið að því markmiði að skilja niðurstöður tilrauna
- Þetta er hvað á sér raunverulega stað í rannsóknum þar sem framfarir verða vegna samspils fræðilegrar framsetningar og tilrauna

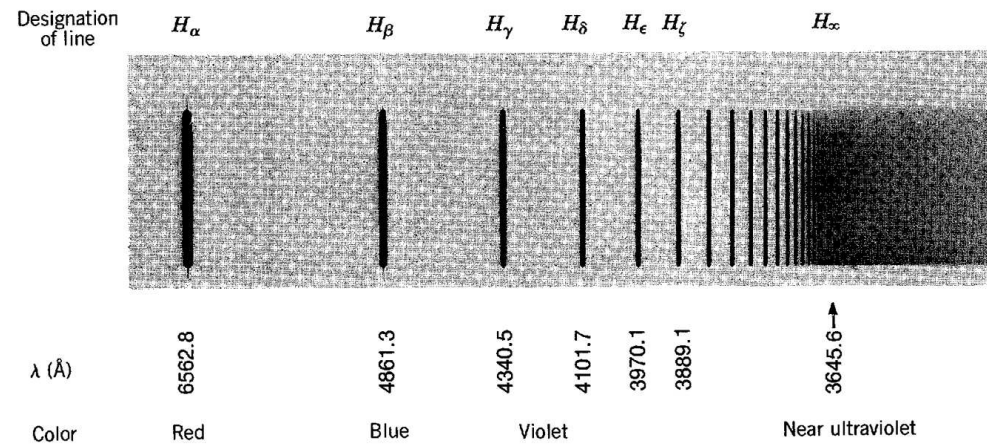
# Róf vetnisatómsins



Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Dæmigerð tilraunauppstilling til rófgreiningar
- Lindin er afhleðsla gassins sem til skoðunar er
- Vegna árekstra við rafeindir fara sum atómin í örvuð ástönd
- Þegar þau leita aftur í lægra orkustig senda atómin frá sér ljós af tilteknum bylgjulengdum
- Ljósið er formað í ljósvönd og síðan sent um prisma sem brýtur það upp í róf sem varpað er á filmu

# Róf vetnisatómsins



Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Sýnilegi hluti ljósins frá vetnisatóminu
- Balmer (1885) setti fram eftirfarandi jöfnu

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4}$$

þar sem  $n = 3$  fyrir H<sub>α</sub>,  $n = 4$  fyrir H<sub>β</sub>,  $n = 5$  fyrir H<sub>γ</sub>, ...

## Róf vetnisatómsins

- 1888 uppgötvaði svíinn Johannes Rydberg að róf vetnisatómsins uppfyllti

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

þar sem  $n$  og  $n'$  eru heilar tölur

- $R$  er fasti og þekktur sem Rydberg fastinn
- Línur rófsins þegar  $n = 2$  og  $n' = 3, 4, \dots$  eru nú kallaðar Balmer röðin og liggur hún á sýnilega rófi rófsins
- Fyrsta línan við 656 nm er kölluð Balmer- $\alpha$  (eða  $H_\alpha$ ) lína og veldur því að vetnisafhleðsla er rauðleit
- Rauð vetnisafhleðsla segir að flestar vetnissameindirnar hafi klofnað í atóm eftir árekstra við rafeindir

## Róf vetnisatómsins

- Næst kemur Balmer- $\beta$  við 486 nm og er í bláu og svo fylgja fleiri línur með styttri bylgjulengdir út í útfjólublátt
- Oft er notuð umhverfa bylgjulengdarinnar eða bylgjutalan  $\bar{\nu}$  sem hefur eingarnar  $\text{m}^{-1}$  (oftar notað sem  $\text{cm}^{-1}$ )

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

- Ljóseind með bylgjutölu  $\bar{\nu}$  hefur orku

$$E = hc\bar{\nu}$$

## Róf vetnisatómsins

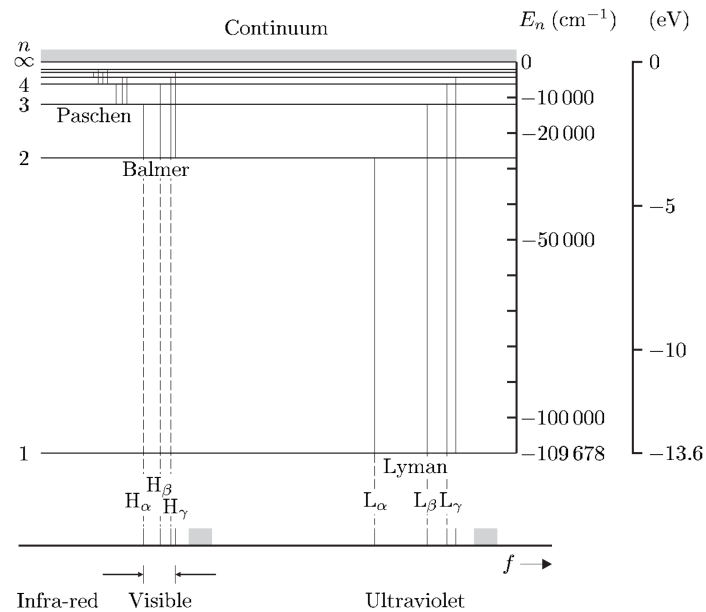
- Í Balmer jöfnunni er falið sameiningarlögmál Ritz sem segir: bylgjutölur tiltekinnna lína í rófinu má rita sem summu (eða mismun) annara lína eða

$$\bar{\nu}_3 = \bar{\nu}_1 \pm \bar{\nu}_2$$

þannig að bylgjutala Balmer- $\beta$  línunnar ( $n = 2$  til  $n' = 4$ ) er summa Balmer- $\alpha$  línunnar ( $n = 2$  til  $n' = 3$ ) og fyrstu línunnar í Paschen röðinni ( $n = 3$  til  $n' = 4$ )

- Öllum þekktum línum í vetnisatóminu má finna stoð í mismun milli orkustiga eins og sést á myndinni þar sem orkan er í réttu hlutfalli við  $1/n^2$

# Róf vetnisatómsins



Frá Foot (2005)

- Orkustig vetnisatómsins
- Færslur frá hærri hvelum  $n' = 2, 3, 4, \dots$  niður í  $n = 1$  hvel gefa Lyman röðina



## Róf vetnisatómsins

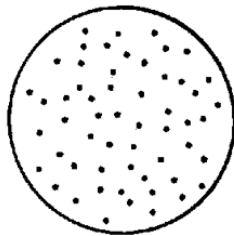
- Aðrar línur eru
  - Balmer ( $n = 2$ )
  - Paschen ( $n = 3$ )
  - Brackett ( $n = 4$ )
  - Pfund ( $n = 5$ )
- Innan hvernar raðar eru línur táknaðar með grískum bókstöfum þ.a.  $L_\alpha$  táknar  $n = 2$  í  $n = 1$ ,  $H_\alpha$  táknar  $n = 3$  í  $n = 2$  og  $H_\beta$  táknar  $n = 4$  í  $n = 2$
- Færslur upp til  $n = 1$  gefa Lyman röðina sem situr í útfjólubláu
- Línur með bylgjulengdir sem eru lengri en Balmer röðin liggja í innrauðu

## Líkan Thomson

- 1904 var ljóst frá tilraunum að atóm innihéldu rafeindir (t.d. dreifing röntgengeisla með atómum, ljósrafhrif (e. photoelectric effect))
- Þessar tilraunir gáfu líka upplýsingar um  $Z$ , fjölda rafeinda á atómi
- Sá fjöldi var nálega  $A/2$ , þar sem  $A$  er atómmassinn
- Þar sem atómin eru hlutlaus, þá hlytu þau líka að hafa jákvæða hleðslu sem væri jafnstór þeirri sem rafeindirnar hefðu
- Hlutlaust atóm hefur neikvæða hleðslu  $-Ze$ , þar sem  $-e$  er hleðsla rafeindar og jákvæða hleðslu af sömu stærð
- Vitað var að massi rafeindarinnar væri lítill miðað við massa atómsins, svo að stærstur hluti massans var tengdur jákvæðu hleðslunni

## Líkan Thomson

- Þetta vakti spurningar um dreifingu hleðslu í atóminu
- J. J. Thomson setti fram líkan sem sagði fyrir að neikvætt hlaðnar rafeindirnar væru jafndreifðar innan samfelldrar dreifingar jákvæðra hleðslna

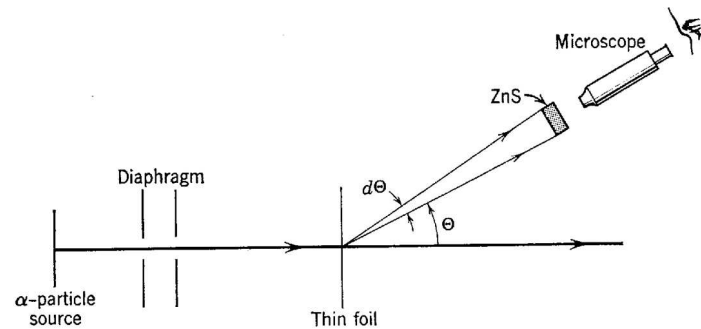


Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Gerði hann ráð fyrir að jákvæða hleðsludreifingin væri kúlulaga með radía u.þ.b.  $10^{-10}$  m
- Þetta er oft kallað plómubúðingslíkanið (e. plum pudding model)

# Líkan Rutherford

- Sönnun á því að líkan Thomson væri ekki rétt kom 1911 þegar Ernest Rutherford greindi tilraunagögn Geiger and Marsden (1909) sem mældu dreifingu  $\alpha$  agna eftir árekstur við atóm
- Greining Rutherford sýndi fram á að jákvæða hleðslan væri samþjöppuð í miðju atómsins, kjarnanum
- Þessi uppgötvun lagði grunninn að kjarneðlisfræði
- Rutherford vissi að  $\alpha$  agnir væru tvíjónað helín atóm



Frá Eisberg and Resnick (1985)

## Líkan Rutherford

- Geislalind sendir frá sér  $\alpha$  agnir sem lenda á þynnu
- Þar sem braut sérhverrar  $\alpha$  agnar er háð braut hennar um þynnunnar er stefna hverrar agnar ólík og útkomandi geisli er dreifður
- Það þarf því að mæla fjölda  $\alpha$  agna á bilinu frá  $\Theta$  til  $\Theta + d\Theta$
- Látum  $\mathcal{N}$  standa fyrir fjölda atóma sem sveigja  $\alpha$  ögn á ferð sinni um þynnuna
- Ef  $\theta$  stendur fyrir horn sveigjunnar vegna eins atóms þá er  $\Theta$  heildar sveigjan vegna ferðar um öll atómin á ferðinni um þynnuna þá er hægt að sýna fram á að

$$(\bar{\Theta}^2)^{1/2} = \sqrt{\mathcal{N}}(\bar{\theta}^2)^{1/2}$$

- Hér er  $(\bar{\Theta}^2)^{1/2}$  ferningsmeðaltal heildar sveigjunnar eða dreifing, og  $(\bar{\theta}^2)^{1/2}$  er ferningsmeðaltal dreifihorns eins atóms

## Líkan Rutherford

- Þátturinn  $\sqrt{\mathcal{N}}$  stafar af handahófseiginleikum sveigjunnar, ef þær væru allar í sömu stefnu væri þátturinn  $\mathcal{N}$
- Almennar, samkvæmt líkani Thomson, þá er horndreifingin  $\alpha$  agna

$$N(\Theta)d\Theta = \frac{2I\Theta}{(\bar{\Theta}^2)} \exp(-\Theta^2/\bar{\Theta}^2)d\Theta$$

þar sem  $N(\Theta)d\Theta$  er fjöldi  $\alpha$  agna sem dreifast inn í hornbilið  $\Theta$  til  $\Theta + d\Theta$  og  $I$  er fjöldi  $\alpha$  agna sem fer um þynnuna

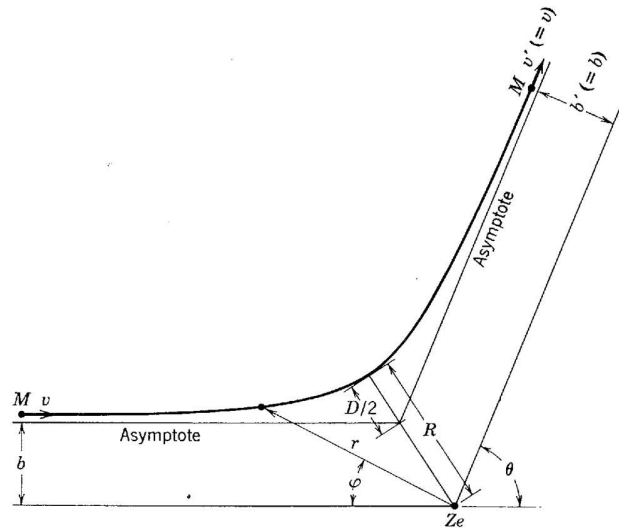
- Sumar  $\alpha$  agnirnar koma fram undir stóru horni, allt að  $180^\circ$
- Tilveru dreifingar undir stóru horni, þó að líkurnar væru litlar, var ekki hægt að útskýra með líkani Thomson

$\implies$  Dæmi 1.1

## Líkan Rutherford

- Í atóm líkani Rutherford er öll jákvæða hleðslan og nánast allur massinn samþjappaður í litlu rúmmáli sem við köllum kjarna
- Ef kjarninn er nægilega lítill mun  $\alpha$  ögn sem ferðast nálægt honum verða fyrir Coulomb fráhrindikrafti
- Ef í stað  $r' = 10^{-10}$  m sem að Thomson gerði ráð fyrir, sem gefur stærsta dreifihorn  $\theta \simeq 10^{-4}$  rad, þá fæst fyrir  $\theta \simeq 1$  rad að  $r' = 10^{-14}$  m, sem er nokkuð nálægt raunverulegri stærð kjarnans

# Líkan Rutherford

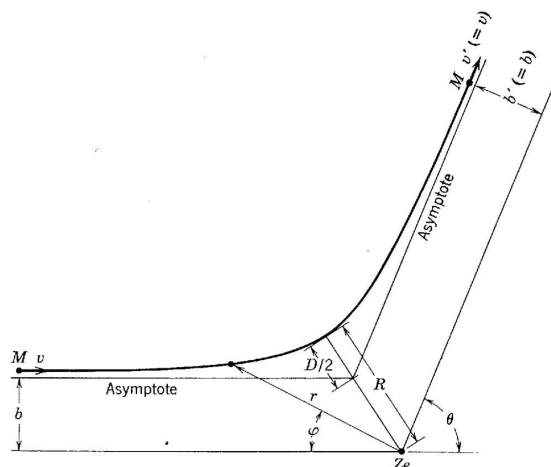


Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Myndin sýnir dreifingu  $\alpha$  agnar af hleðslu  $+ze$  og massa  $M$ , sem fer framhjá kjarna af hleðslu  $+Ze$
- Gerum ráð fyrir að kjarnin sé staðsettur í upphafshnitum hnitakerfisins
- Þegar ögnin er fjarri kjarnanum er Coulomb þátturinn óvera, svo að ögnin nálgast kjarnanna eftir beinni línu með föstum hraða  $v$



# Líkan Rutherford



Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Eftir dreifinguna ferðast ögnin aftur eftir beinni línu með föstum hraða  $v'$
- Staðsetningu agnarinnar er lýst með radíal hnitinu  $r$  of pólhorninu  $\varphi$ , sem er horn mælt frá línu sem er samsíða upphaflegri braut agnar

## Líkan Rutherford

- Þversum fjarlægðin frá þeim ás að línu upphaflegrar hreyfingar, er nefnd kennilengd árekstrar og táknuð með  $b$
- Dreifingarhornið  $\theta$  er hornið milli ásins og línu sem er dregin um upphafspunktinn og er samsíða braut færslu eftir árekstur
- Þversum fjarlægð milli þessara tveggja lína er  $b'$
- Með sígildri aflfræði og gera ráð fyrir Coulomb fráhrindikrafti

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{zZe^2}{r^2}$$

má finna jöfnu fyrir feril  $\alpha$  agnarinnar

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{b} \sin \varphi + \frac{D}{2b^2} (\cos \varphi - 1)$$

sem er jafna breiðboga í pólhnitum

## Líkan Rutherford

- Stærðin  $D$  er fasti

$$D \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{zZe^2}{Mv^2/2}$$

og er mælikvarði á fjarlægðina þar sem mættisorkan  $(1/4\pi\epsilon_0)(zZe^2/D)$  er jöfn hreyfiorkunni  $Mv^2/2$

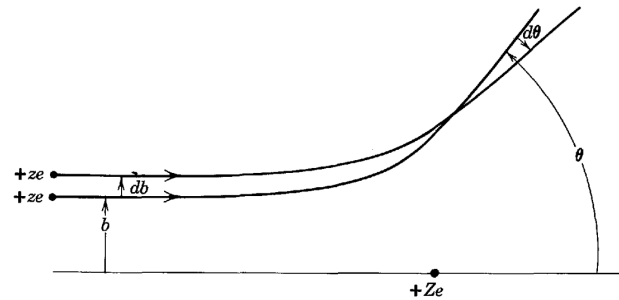
- Þegar mættisorkan er jöfn hreyfiorkunni stöðvast ögnin og snýr við
- Hornið  $\theta$  er fundið með því að finna  $\varphi$  þegar  $r \rightarrow \infty$  og setja

$$\theta = \pi - \varphi$$

- Þá er

$$\cot \frac{\theta}{2} = \frac{2b}{D}$$

# Líkan Rutherford



Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Við dreifingu  $\alpha$  agnar með einum kjarna og kennilengd árekstrar er á bilinu  $b$  til  $b + db$  þá er dreifihornið á bilinu  $\theta$  til  $\theta + d\theta$
- Fjöldi  $\alpha$  agna  $N(\Theta)d\Theta$  inn í hornbilið  $\Theta$  til  $\Theta + d\Theta$  eftir að farið um þynnuna með kennilengd árekstrar  $b$  til  $b + db$  er þá

$$N(\Theta)d\Theta = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left( \frac{zZe^2}{2Mv^2} \right)^2 \frac{I\rho t 2\pi \sin \Theta d\Theta}{\sin^4(\Theta/2)}$$

þar sem  $I$  er fjöldi  $\alpha$  agna sem lendir á þynnu af þykkt  $t$  sem inniheldur  $\rho$  kjarna á rúmeiningu

## Líkan Rutherford

- Þegar líkan Rutherford

$$N(\Theta)d\Theta = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2}\right)^2 \frac{I\rho t 2\pi \sin \Theta d\Theta}{\sin^4(\Theta/2)}$$

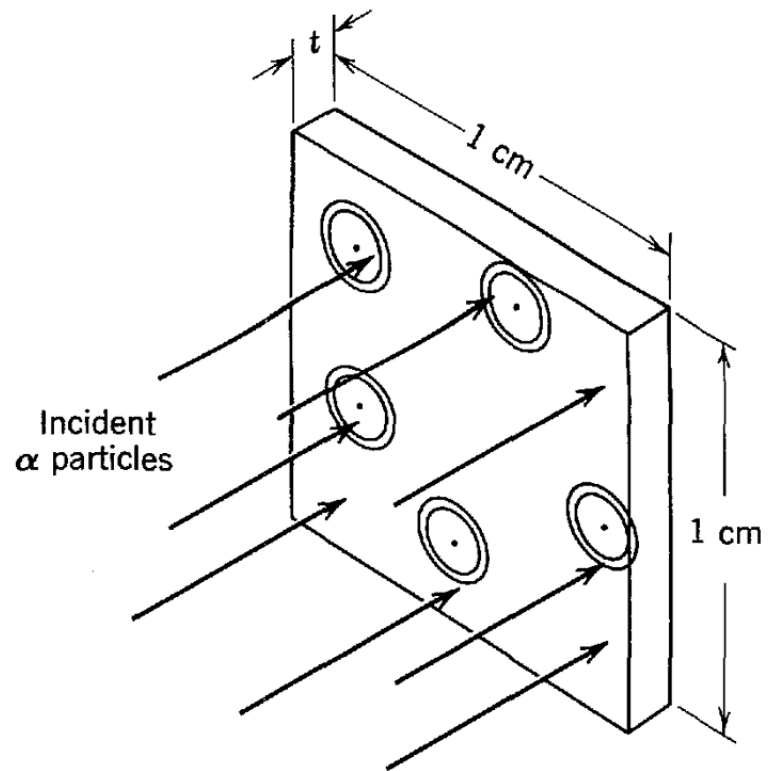
er borið saman við líkan Thomson

$$N(\Theta)d\Theta = \frac{2I\Theta}{(\bar{\Theta}^2)} \exp(-\Theta^2/\bar{\Theta}^2)d\Theta$$

sést að hornþátturinn fellur hratt með vaxandi horni í báðum tilfellum, en þá mun hægar í Rutherford líkaninu

- Dreifing undir stóru horni er mun líklegri þegar einn dreifiatburður á sér stað frá kjarna atoms heldur en frá fjölda dreifiatburða í plómubúðing

# Líkan Rutherford



Frá Eisberg and Resnick (1985)

$\Rightarrow$  Dæmi 1.2

# Líkan Rutherford

LXI. *The Laws of Deflexion of  $\alpha$  Particles through Large Angles*\*. By Dr. H. GEIGER and E. MARSDEN †.

IN a former paper ‡ one of us has shown that in the passage of  $\alpha$  particles through matter the deflexions are, on the average, small and of the order of a few degrees only. In the experiments a narrow pencil of  $\alpha$  particles fell on a zinc-sulphide screen in vacuum, and the distribution of the scintillations on the screen was observed when different metal foils were placed in the path of the  $\alpha$  particles. From the distribution obtained, the most probable angle of scattering could be deduced, and it was shown that the results could be explained on the assumption that the deflexion of a single  $\alpha$  particle is the resultant of a large number of very small deflexions caused by the passage of the  $\alpha$  particle through the successive individual atoms of the scattering substance.

\* Communicated to *k. d.-k. Akad. d. Wiss. Wien*.

† Communicated by Prof. E. Rutherford, F.R.S.

‡ H. Geiger, Roy. Soc. Proc. vol. lxxxiii. p. 492 (1910); vol. lxxxvi. p. 235 (1912).

Frá Geiger and Marsden (1913)

- Frekari tilraunir voru framkvæmdar fljótlega og voru niðurstöðurnar að  $N(\Theta)d\Theta$  væri í réttu hlutfalli við
  - $1/\sin^4(\Theta/2)$
  - Þykkt þynnunar  $t$
  - $(Ze)^2$
  - umhverfu kvaðrats hreyfiorkunnar  $1/(Mv^2)^2$

## Líkan Rutherford

- Nú gat Rutherford notað líkanið til að meta stærð kjarnans
- Mesta nánd  $D$  er þegar  $R$  tekur lægsta gildi sitt sem er við  $\Theta = 180^\circ$  eða

$$R_{180^\circ} = D = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{zZe^2}{Mv^2/2}$$

- Radíi atóms getur því ekki verið stærra en  $D$  ef gert ráð fyrir að aðeins Coulomb fráhrindikraftur verki á agnirnar
- Þetta gildir því ekki ef  $\alpha$  ögnin smýgur um kjarnann



## Líkan Rutherford

- Oftast er dreifjafna Rutherford rituð sem fall af diffurþversniði (e. differential cross section)  $d\sigma/d\Omega$
- Þessi stærð er skilgreind þannig að fjöldi  $dN$   $\alpha$  agna sem dreifast inni í rúmhornið (e. solid angle)  $d\Omega$  við dreifihornið  $\Theta$  er

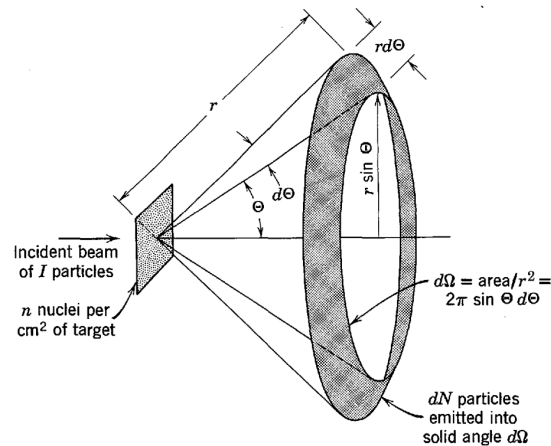
$$dN = \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

fyrir  $I$   $\alpha$  agnir sem falla á þynnu sem inniheldur  $n$  kjarna á fercentimetra

- Þessi skilgreining svarar til skilgreiningar á líkindaþversniði  $\sigma$  með

$$N = \sigma I n$$

# Líkan Rutherford



Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Þetta er sýnt á myndinni
- Rutherford dreifing er samhverf um ás innkomandi geisla og við höfum áhuga á rúmhorninu  $d\Omega$  sem svarar til allra atburða þar sem dreifihornið liggur innan  $d\Theta$  við  $\Theta$
- Á myndinni sést að

$$d\Omega = 2\pi \sin \Theta d\Theta$$

## Líkan Rutherford

- Ritum  $N(\Theta)d\Theta$  sem  $dN$  og  $\rho t$  sem  $n$  sjáum við

$$dN = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left( \frac{zZe^2}{2Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)} I n d\Omega$$

og þá er diffurþversnið Rutherford dreifingar

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left( \frac{zZe^2}{2Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)}$$

# Líkan Bohr

THE  
LONDON, EDINBURGH, AND DUBLIN  
PHILOSOPHICAL MAGAZINE  
AND  
JOURNAL OF SCIENCE.

[SIXTH SERIES.]

JULY 1913.

I. *On the Constitution of Atoms and Molecules.*  
By N. BOHR, Dr. phil. Copenhagen\*.

*Introduction.*

IN order to explain the results of experiments on scattering of  $\alpha$  rays by matter Prof. Rutherford† has given a theory of the structure of atoms. According to this theory, the atoms consist of a positively charged nucleus surrounded by a system of electrons kept together by attractive forces from the nucleus; the total negative charge of the electrons is equal to the positive charge of the nucleus. Further, the nucleus is assumed to be the seat of the essential part of the mass of the atom, and to have linear dimensions exceedingly small compared with the linear dimensions of the whole atom. The number of electrons in an atom is deduced to be approximately equal to half the atomic weight. Great interest is to be attributed to this atom-model; for, as Rutherford has shown, the assumption of the existence of nuclei, as those in question, seems to be necessary in order to account for the results of the experiments on large angle scattering of the  $\alpha$  rays‡.

In an attempt to explain some of the properties of matter on the basis of this atom-model we meet, however, with difficulties of a serious nature arising from the apparent

\* Communicated by Prof. E. Rutherford, F.R.S.

† E. Rutherford, Phil. Mag. xxi. p. 669 (1911).

‡ See also Geiger and Marsden, Phil. Mag. April 1913.

Phil. Mag. S. 6. Vol. 26. No. 151. July 1913.

B

Frá Bohr (1913)

## Líkan Bohr

- Niels Bohr setti fram líkan af vetnisatóminu 1913, sem var byggt á skammtafræði
- Það var þekkt frá tilraunum Rutherford að innan hvers atóms væri lítill, mjög þéttur kjarni sem væri jákvætt hlaðinn
- Í vetnisatóminu er þessi kjarni einungin ein róteind og ein rafeind bundin því með Coulomb krafti
- Krafturinn er í réttu hlutfalli við  $1/r^2$ , eins og þyngdarkrafturinn, svo líta mátti á rafeindina snúast um róteindina sígilt á sama hátt og reikistjarna snýst um sólina
- Hins vegar er skammtafræðin mikilvæg í smásæju kerfi og ekki eru allar brautir rafeindarinnar leyfðar

## Líkan Bohr

- Þetta er vel þekkt frá þeirri staðreynd að vetnisatómið sendir eingöngu frá sér ljós á tilteknum bylgjulengdum, sem svara til færslna milli orkuástanda
- Bohr gerði ráð fyrir að rafeindin snúist um kjarnann eftir hringlaga brautum, hverra radíi  $r$  ákvarðast af jafnvægi milli miðsóknarkrafts og aðdráttarkrafts Coulomb í átt að róteindinni
- Fyrir rafeindir af massa  $m_e$  og hraða  $v$  gefur þetta

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1)$$

## Líkan Bohr

- Þar með er horn tíðnin  $\omega = v/r$  fundin

$$\omega^2 = \frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{m_e r^3}$$

sem er jafngil lögmáli Keppler fyrir brautir reikistjarna

- Heildar orka rafeindar á slíkri braut er summa hreyfi- og stöðuorku

$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{r}$$

- Með samanburði við jöfnu (1) sjáum við að

$$E = -\frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{2r}$$

sem er neikvæð stærð sem segir að rafeindin er bundin róteindinni og leggja þarf til orku til að fjarlægja hana

## Líkan Bohr

- Síðan gerði Bohr ráð fyrir eftirfarandi:
  - Það eru tilteknar brautir leyfðar og þar hefur rafeindin fasta orku. Rafeindin tapar aðeins orku þegar hún stekkur á milli leyfðra brauta og atómið gefur þá frá sér ljós á tiltekinni bylgjulengd.
- Þetta var í mótsögn við sígilda rafsegulfræði – hlaðinn ögn í hringhreyfinu verður fyrir hröðun og sendir þess vegna frá sér rafsegulgeislun
- Gerum ná fyrir skömtun hverfiþungans

$$m_e v r = n \hbar$$

þar sem  $n$  er heil tala



## Líkan Bohr

- Saman með jöfnu (1) gefur þetta radía leyfðra brauta

$$r = a_0 n^2$$

þar sem Bohr radíinn er gefinn með

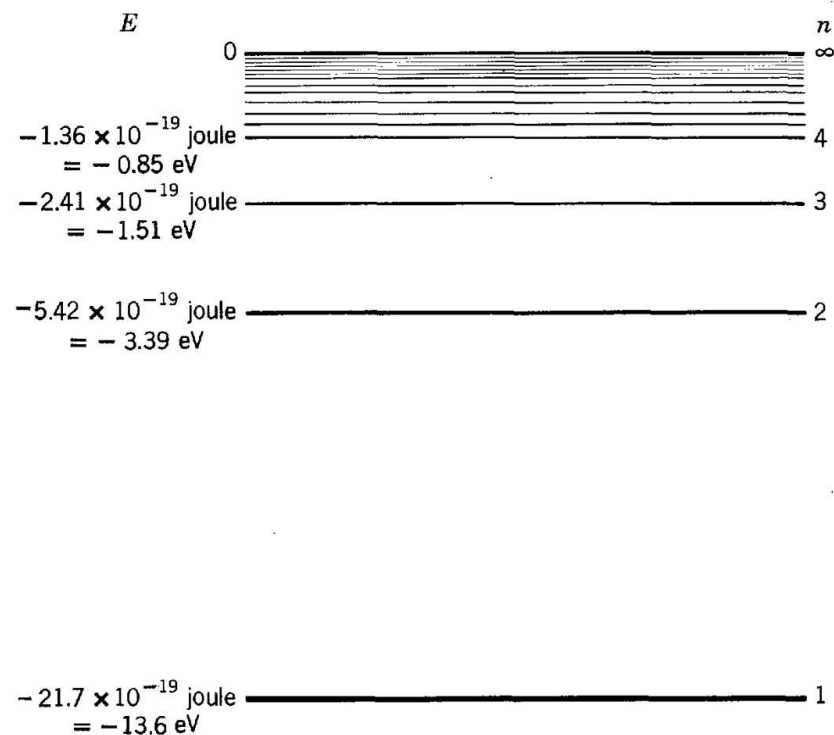
$$a_0 = \frac{\hbar^2}{(e^2/4\pi\epsilon_0)m_e}$$

- Saman leiða þessar jöfnur til jöfnu Bohr

$$E = -\frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{2a_0} \frac{1}{n^2}$$

- Jákvæða heiltalan  $n$  er nefnd aðalskammtatalan

# Líkan Bohr

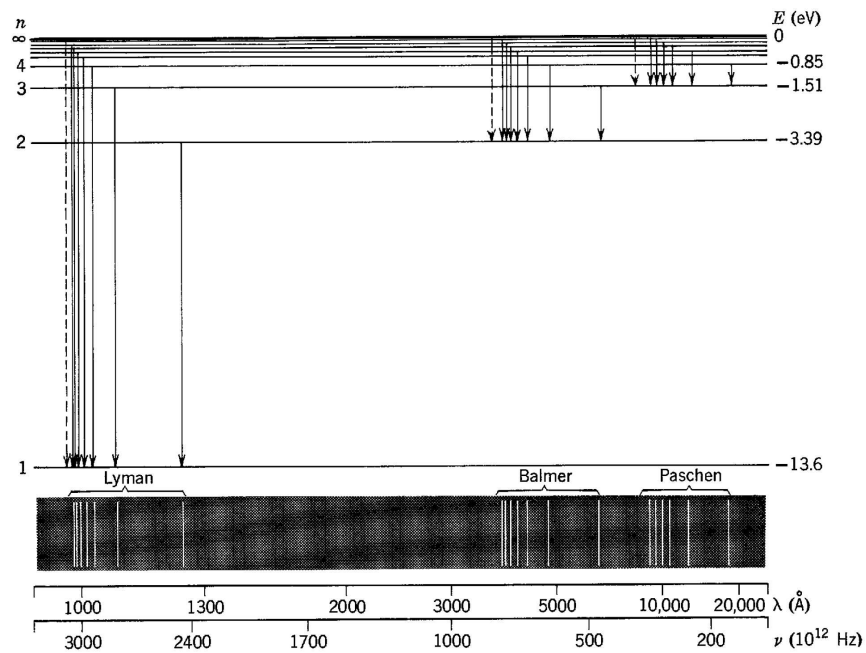


Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Jafna Bohr sýnd sem orkustigamynd

$\implies$  Dæmi 1.3

# Líkan Bohr



Frá Eisberg and Resnick (1985)

- Orkustigamynd vetnis fyrir nokkrar aðalskammtatölur

⇒ Dæmi 1.4

## Líkan Bohr

- Jafna Bohr segir að færsla milli orkuástanda leiði til þess að atómið gefi frá sér ljós með bylgjulengd

$$\bar{\nu} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

þar sem  $R_{\infty}$  er Rydberg fastinn

$$hcR_{\infty} = \frac{(e^2/4\pi\epsilon_0)^2 m_e}{2\hbar^2}$$

- Rydberg fastinn er

$$R_{\infty} = 10\,973\,731.568\,525 \text{ m}^{-1}$$

- Athugið að í ofangreindu höfum við gert ráð fyrir óendanlega þungum kjarna og þess vegna ritað  $\infty$  á skör

## Líkan Bohr

- Fyrir kjarna með endanlegan massa  $M$  er í ofangreindum jöfnum

$$m = \frac{m_e M}{m_e + M}$$

stungið inn fyrir  $m_e$

- Fyrir vetni er þá ritað

$$R_H = R_\infty \frac{M_p}{m_e + M_p} \simeq R_\infty \left( 1 - \frac{m_e}{M_p} \right)$$

- Þessi leiðrétting er einnig mismunandi fyrir mismunandi samsætur sem kemur fram sem hliðrun í tíðni ljóss frá mismunandi samsætum – samsætu­hliðrun

⇒ Dæmi 1.5

⇒ Dæmi 1.6

⇒ Dæmi 1.7

## Líkan Bohr

- Líkani Bohr má beita á hvaða atóm sem vera vill með eina rafeind jafnvel ef kjarnhleðslan er  $Z > 1$
- Við getum þannig reiknað orkustig helíns þar sem ein rafeind hefur verið fjarlægð, tví jónaðs litíns o.s.frv.
- Hleðsla kjarnans kemur inn í líkan Bohr í gegnum Coulomb liðinn
- Fyrir kjarna með hleðslu  $Ze$  er Coulombkrafturinn

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2 Z}{r^2}$$

## Líkan Bohr

- Þar með er radíinn

$$r_n = \frac{a_0 n^2}{Z}$$

- Orkustigin eru

$$E_n = -(13.6 \text{ eV}) \frac{Z^2}{n^2}$$

- Brautir á atómum sem hafa hærri  $Z$  eru nær kjarnanum og hafa hærri (neikvæða) orku og rafeindin er þéttar bundin kjarnanum

⇒ Dæmi 1.8

## Afstæðishrif

- Líkan Bohr var tímamóta verk
- Skömmtun brauta var þó eitthvað sem sumum þótti erfitt að kyngja – hvernig gat rafeindin vitað á hvaða braut hún færi áður en hún tæki stökkið
- Að gera ráð fyrir hrinlaga brautum var of mikil einföldun
- Sommerfeld setti fram skammtakenningu þar sem gert var ráð fyrir sporbaugs brautum sem voru samhæfanlegar takmörkuðu afstæðiskenningunni
- Hann innleiddi skömmtun með almennri reglu sem sagði:
  - “tegrið af skriðþunganum sem er tengdur hnitinu sem lýsir færslunni umhverfis eina lotu er heiltölumargfeldi Planksfastans” sem gildir þegar sígild hreyfing er lotubundin



## Afstæðishrif

- Fyrir skriðþunga á hringlaga braut er þetta ritað

$$m_e v \pi r = n h$$

- Í takmörkuðu afstæðiskenningunni hefur ögn með hvíldarmassa  $m$  sem ferðast með hraðanum  $v$  orkuna

$$E(v) = \gamma m c^2$$

þar sem

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

- Hreyfiorka agnarinnar er

$$\Delta E = E(v) - E(0) = (\gamma - 1) m_e c^2$$

## Afstæðishrif

- Þar með sjáum við að afstæðishrif valda hlutfallslegri orkubreytingu

$$\frac{\Delta E}{E} \simeq \frac{v^2}{c^2}$$

- Þetta leiðir til þess að orka agna breytist mismunandi milli brauta þó að heildarorkan sé sú sama
- Hlutfall hraða á braut og ljóshraða er

$$\frac{v}{c} = \frac{\alpha}{n}$$

þar sem fíngerðarfastinn  $\alpha$  er gefinn með

$$\alpha = \frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{\hbar c} \quad \text{og} \quad \alpha \simeq \frac{1}{137}$$

- Við sjáum að orkufrávikið er nálega  $\alpha^2 E$

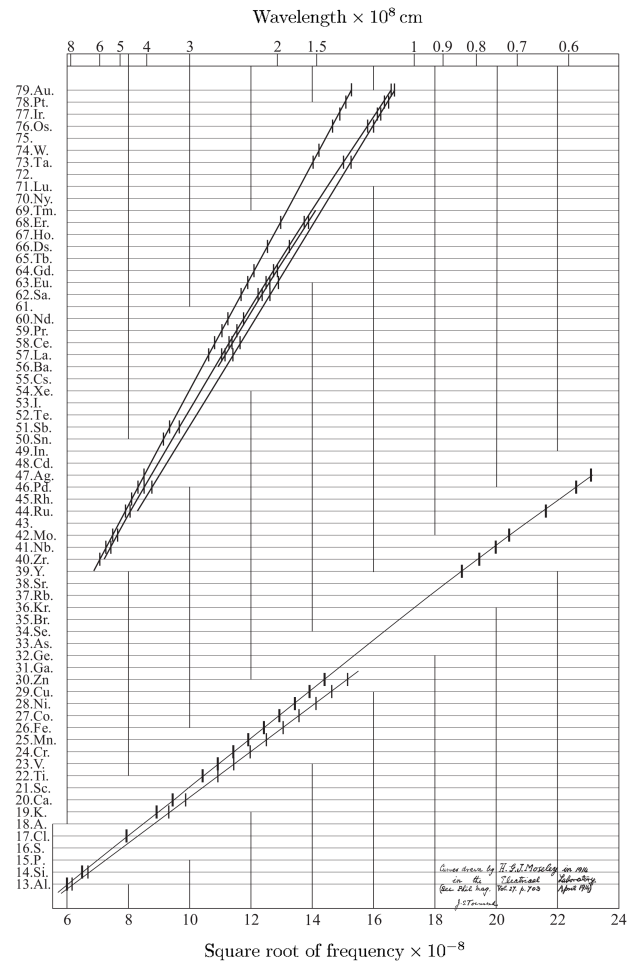
## Moseley og atómtalan

- Um svipað leyti mældi H. G. J. Moseley Röntgenróf fjölda frumeinda
- Hann setti fram þá kennignu að kvaðratrót af tíðni útgeislaðra lína sé í réttu hlutfalli við atómtöluna  $Z$  eða

$$\sqrt{f} \propto Z$$

- Þetta er talsverð einföldun en engu að síður mikilvægt skref þegar það er sett fram
- Moseley graf sýnir atómtöluna sem fall af kvaðratrót af tíðni röntgenlína af útgeislun

# Moseley og atómtalan



Frá Foot (2005)

## Moseley og atómtalan

- Eðlilegt var að útvíkka líkan Bohr fyrir þyngri frumefni með því að gera ráð fyrir að rafeindir fylli leyfðar brautir og byrji á botninum
- Hvert okrustig hefur aðeins pláss fyrir tiltekinn fjölda rafeinda og þær raðast á hvel, sem er táknað með meginskammtatölunni, umhverfis kjarnann
- Hvelin koma til vegna einsetulögmáls Pauli og spuna rafeindarinnar
- Hámarksfjöldi rafeinda í  $n = 1$  hvelinu er 2, á  $n = 2$  hvelinu eru 8 rafeindir, og á  $n = 3$  hvelinu eru 18, og svo framvegis
- Vegna sögulegra ástæðna nota Röntgenrófsfræðingar ekki meginskammtatöluna heldur nota þeir bókstafi: K fyrir  $n = 1$ , L fyrir  $n = 2$ , M fyrir  $n = 3$ , og fylgja svo stafrófinu

## Moseley og atómtalan

- Fyrir kjarna með hleðslu  $Ze$  setjum við í stað  $e^2/4\pi\epsilon_0$  stærðina  $Ze^2/4\pi\epsilon_0$  í líkani Bohr
- Í þyngri atómum þá skýla aðrar rafeindir hleðslu kjarnans svo að fyrir færslu milli K- og L-hvela gildir

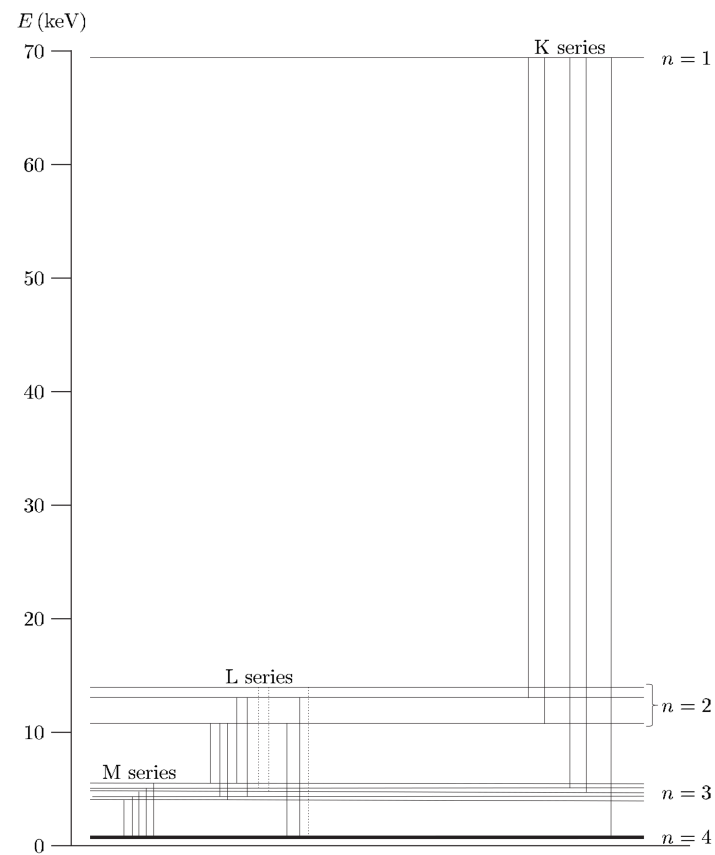
$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left\{ \frac{(Z - \sigma_K)^2}{1^2} - \frac{(Z - \sigma_L)^2}{2^2} \right\}$$

- Skýlingarstuðlarnir  $\sigma_K$  og  $\sigma_L$  eru ekki alveg óháðir  $Z$
- Fyrir stór atóm nálgast þessi jafna sambandið  $\sqrt{f} \propto Z$

## Moseley og atómtalan

- Orkustig innri hvela í þungsteini ( $Z = 74$ ) og þær færslur sem gefa frá sér Röntgengeisla
- Athugið að orkan er í keV (skalast með  $Z^2$ )
- Þegar rafeind er fjarlægð úr K-hveli þá hefur atómið orku sem nemur bindiorku hennar, jákvæða orku
- Þess vegna er þetta gjarnan teiknað með K-hvelið efst
- Sýnd eru orkustig hola í hvelunum
- Grafið sýnir hvernig hola sem myndast á neðri hvelum vinnur sig útávið
- Holan getur stokkið lengra en á næsta hvel og færslan er þá táknuð,  $K_\alpha$ ,  $K_\beta, \dots$

# Moseley og atómtalan



Frá Foot (2005)



## Hrörnun útgeislunar

- Raftvípólsvægi  $-ex_0$  sem sveiflast með horntíðni  $\omega$  geislar út afli

$$P = \frac{e^2 x_0^2 \omega^4}{12\pi\epsilon_0 e^3}$$

- Rafeind í hreinni sveiflu hefur heildarorku (summa hreyfi- og stöðuorku)

$$E = \frac{m_e \omega^2 x_0^2}{2}$$

þar sem  $x_0$  er útslag færslunnar

## Hrörnun útgeislunar

- Orkan fellur með hraða sem ræðst af aflinu sem er geislað úr

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{e^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 m_e c^3} E = -\frac{E}{\tau}$$

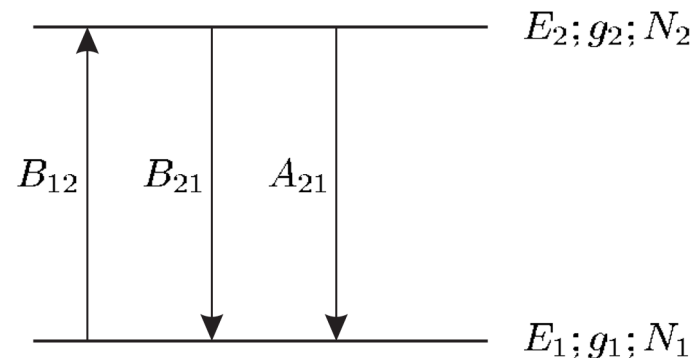
þar sem æfiskeið útgeislunar er gefið með

$$\tau = \frac{6\pi\epsilon_0 m_e c^3}{e^2\omega^2}$$

- Fyrir færslu í natríni með bylgjulengd 589 nm (gul lína) þá er  $\tau = 16$  ns  $\simeq 10^{-8}$  s
- Þetta sígilda æfiskeið er stysti tíminn sem það getur tekið atóm að hrörna með tiltekinni færslu – en tíminn getur verið lengri (stundum mörgum stærðarþrepum lengri fyrir óleyfilegar færslur)

## A og B stuðlar Einstein

- Hugmyndirnar sem lágu til grundvallar lýsinga á uppbyggingu atómsins voru byggðar á niðurstöðum mælinga á útgeislun og ísogi atóma
- Útgeislun var bara talin eitthvað sem þurfti til að bera orku frá atóminu þegar rafeind stekkur af einni braut á aðra – án þess að skilningur væri á ferlinu
- Einstein gerði ráð fyrir atómi með tvö orkustig:  $E_1$  og  $E_2$



Frá Foot (2005)

## A og B stuðlar Einstein

- Hvort orkustig má hafa fleiri en eitt ástand og fjöldi ástanda með sömu orku er kallað **margfeldni** þess orkustigs og er táknað með  $g_1$  og  $g_2$
- Einstein skoðaði hvað gerist fyrir atóm sem víxlverkar við geislun með orkuþéttleika  $\rho(\omega)$
- Þessi geislun veldur færslu frá lægra orkustiginu upp í hið hærra með hraða sem er í réttu hlutfalli við  $\rho(\omega_{12})$ , þar sem hlutfallsfastinn er  $B_{12}$
- Atómið víxverkar sterklega eingöngu við þann hluta dreifingarinnar  $\rho(\omega)$  við tíðni sem er nálægt  $\omega_{12} = (E_1 - E_2)/\hbar$ , hermitíðni atómsins
- Vegna samhverfu er þess vænst að geislunin valdi færslu frá efra orkuástandinu til þess lægra og hraðinn er í réttu hlutfalli við orkuþéttleikann og hlutfallsfastinn er  $B_{21}$

## *A og B stuðlar Einstein*

- Þetta er það sem er kallað örðuð útgeislun (e. stimulated emission), þegar geislun af horntíðni  $\omega$  veldur því að atómið gefur frá sér geislun af sömu tíðni
- Þessi aukning ljóss af innkomandi tíðni er grundvöllur virkni leysa
  - laser = light amplification by stimulated emission of radiation
- Samhverfa færslu upp og niður er brotin upp með sjálfgeislun (e. spontaneous emission), sem er þegar atómið leitar í lægra orkustigið þegar ytri innkomandi geislun á sér ekki stað
- Einstein notaði  $A_{21}$  til að tákna hvarfhraða þessa ferlis

## A og B stuðlar Einstein

- Hraðajöfnurnar fyrir sætni orkustiganna  $N_1$  and  $N_2$  eru

$$\frac{dN_2}{dt} = N_1 B_{12} \rho(\omega_{12}) - N_2 B_{21} \rho(\omega_{12}) - N_2 A_{12}$$

og

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt}$$

- Fyrri jafnan gefur breytinguna í sætni  $N_2$  vegna ísogs, örvaðrar geislunar (e. stimulated emission) og sjálfgeislunar (e. spontaneous emission)
- Síðari jafnan stafar af því að aðeins eru tvö orkustig og að atóm í ástandi 2 verður að fara í orkustig 1, sem einnig má rita

$$N_1 + N_2 = \text{fasti}$$

## *A* og *B* stuðlar Einstein

- Þegar  $\rho(\omega) = 0$  og sum atómin eru í efra orkuástandinu ( $N_2(0) \neq 0$ ), þá er lausnin

$$N_2(t) = N_2(0) \exp(-A_{21}t)$$

þar sem meðal líftíminn er

$$\frac{1}{\tau} = A_{21}$$

- Til að finna tengslin milli  $A_{21}$  og  $B$ -stuðlanna skoðaði hann hvað gerist innan kassa með yfirborð sem verka eins og svarthlutur

## *A* og *B* stuðlar Einstein

- Orkubéttleiki geislunarinnar  $\rho(\omega)d\omega$  á horntíðnibilinu  $\omega$  til  $\omega + d\omega$  er aðeins háður hitastigi  $T$  útgeislandi (og ísogandi) yfirborðum boxins og er gefinn með dreififalli Planck

$$\rho(\omega_{12}) = \frac{A_{21}}{B_{21}} \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$$

- Í jafnvægi er

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = 0$$

og

$$N_1 B_{12} \rho(\omega_{12}) - N_2 B_{21} \rho(\omega_{12}) - N_2 A_{12} = 0$$

gefur

$$\rho(\omega_{12}) = \frac{A_{21}}{B_{21}} \frac{1}{(N_1/N_2)(B_{12}/B_{21}) - 1}$$



## A og B stuðlar Einstein

- Við varmajafnvægi er sætni hvors orkustigs gefinn með Boltzmann stuðlinum

$$\frac{N_2}{g_2} = \frac{N_1}{g_1} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$$

- Þar með er

$$A_{21} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{21}$$

og

$$B_{12} = \frac{g_2}{g_1} B_{21}$$

- Stuðlar Einstein eru eiginleikar atómsins
- Athugið að þessi lýsing Einstein, sem nær að lýsa eðlisfræðinni í megindráttum, er sett fram löngu áður en skammtafræðin var sett fram

## Zeeman hrif

- Rétt fyrir aldamótin 1900 voru gerðar nokkrar lykiluppgötvannir í eðlisfræði
  - Röntgen uppgötvar röntgengeisla
  - Bequerel uppgötvar geislavirkni
  - J. J. Thomson sýnir að útgeislun frá bakskauti afhleðslu eru hlaðnar agnir og hlutfall hleðslu og massa er óháð hvaða gas er í afhleðslunni
- Um svipað leyti sýndi Pieter Zeeman fram á að agnir með sama hlutfall hleðslu og massa er að finna í atómum
- Þetta eru agnir sem við núna köllum rafeindir

## Zeeman hrif

- Atómi í segulsviði má lýsa sem hreintóna sveifli
- Endursetningarkraftur (e. restoring force) rafeindar er hinn sami í allar stefnur og sveifillinn hefur sömu hermitíðni  $\omega_0$  fyrir færslu í  $x$ –,  $y$ – of  $z$ –stefnur (þegar ekkert segulsvið er til staðar)
- Í segulsviði  $\mathbf{B}$  er hreyfijafna rafeindar með hleðslu  $-e$ , í stöðu  $\mathbf{r}$  og með hraða  $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$  gefin með

$$m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -m_e \omega_0^2 \mathbf{r} - e \mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

## Zeeman hrif

- Til viðbótar við endursetningarkraftinn, þá verkar á reifindirnar Lorentz kraftur sem verkar á hlaðnar agnir sem hreyfast í segulsviði
- Setjum að segulsviðið liggi á  $z$ -ásnum  $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{e}}_z$  þá er

$$\ddot{\mathbf{r}} + 2\Omega_L \dot{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{e}}_z + \omega_0^2 \mathbf{r} = 0$$

þar sem við höfum innleitt Larmor tíðnina

$$\Omega_L = \frac{eB}{2m_e}$$

## Zeeman hrif

- Gerum ráð fyrir að lausnin sé vigur sem sveiflast með tíðninni  $\omega$

$$\mathbf{r} = \text{Re} \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \exp(-i\omega t) \right\}$$

- Ritað sem fylki

$$\begin{pmatrix} \omega_0^2 & -2i\omega\Omega_L & 0 \\ 2i\omega\Omega_L & \omega_0^2 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_0^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \omega^2 \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

## Zeeman hrif

- Eigingildin eru fundin með ákveðunni

$$\begin{vmatrix} \omega_0^2 - \omega^2 & -2i\omega\Omega_L & 0 \\ 2i\omega\Omega_L & \omega_0^2 - \omega^2 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_0^2 - \omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

sem gefur

$$\left\{ \omega^4 - \left( 2\omega_0^2 + 4\Omega_L^2 \right) \omega^2 + \omega_0^4 \right\} (\omega^2 - \omega_0^2) = 0$$

- Lausnin  $\omega = \omega_0$  er augljós
- Hin tvö eigingildin má finna með því að leysa jöfnuna innan slaufusvigans fyrir  $\omega^2$

## Zeeman hrif

- Fyrir ljósfærslu gildir alltaf  $\Omega_L \ll \omega_0$  svo að nálga má eigintíðnirnar sem

$$\omega \simeq \omega_0 \pm \Omega_L$$

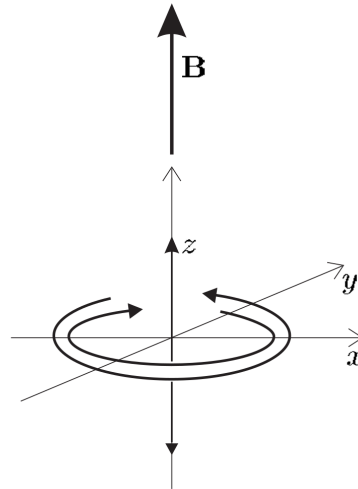
- Sé þessum eigingildum stungið inn í upphaflega fylkið fást eiginvigrar sem svara til  $\omega_0 - \Omega_L$ ,  $\omega_0$  og  $\omega_0 + \Omega_L$  eða

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \cos((\omega_0 - \Omega_L)t) \\ -\sin((\omega_0 - \Omega_L)t) \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos((\omega_0)t) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \cos((\omega_0 + \Omega_L)t) \\ \sin((\omega_0 + \Omega_L)t) \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Segulsviðið hefur ekki áhrif á hreyfingu eftir  $z$ -ásnum og horntíðnin helst  $\omega_0$

## Zeeman hrif

- Víxverkunin við segulsviðið veldur því að hreyfingin í  $x$ - og  $y$ -stefnur er tengd um stökin  $\pm 2i\omega\Omega_L$  sem sitja ekki á hornalínu fylkisins



Frá Foot (2005)

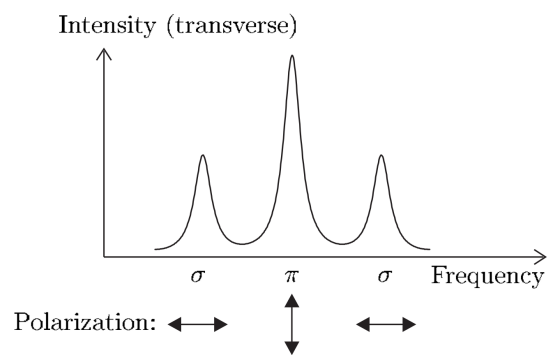
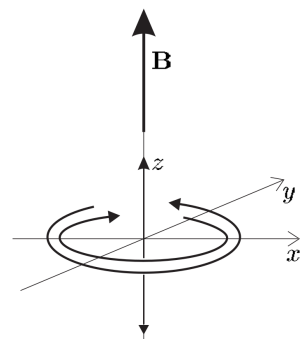
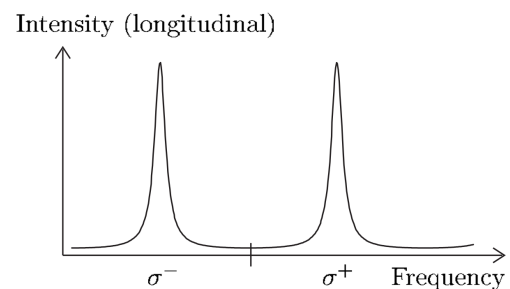
- Þetta kemur fram í hringhreyfingu í báðar stefnur í  $xy$ -planinu eins og sjá má á myndinni



## Zeeman hrif

- Þessar hringhreyfingar hafa tíðni sem er hliðrað upp og niður frá  $\omega_0$  sem nemur Larmor tíðninni
- Ytra segulsviðið veldur því að upphaflega ein tíðni er skipt upp í þrjár tíðnir
- Rafeind sem sveiflast virkar sem sígildur tvípóll sem sendir frá sér rafsegulgeislun og Zeeman sá klofnunina  $\Omega_L$  í ljósinu sem atómið sendi frá sér
- Þetta sígilda líkan af Zeeman hrifum útskýrir skautun ljóssins ásamt skiptingu línanna í þrjá þætti
- Rafeind sem sveiflast samsíða  $\mathbf{B}$  gefur frá sér rafsegulbylgju með línulega skautun og horntíðni  $\omega_0$

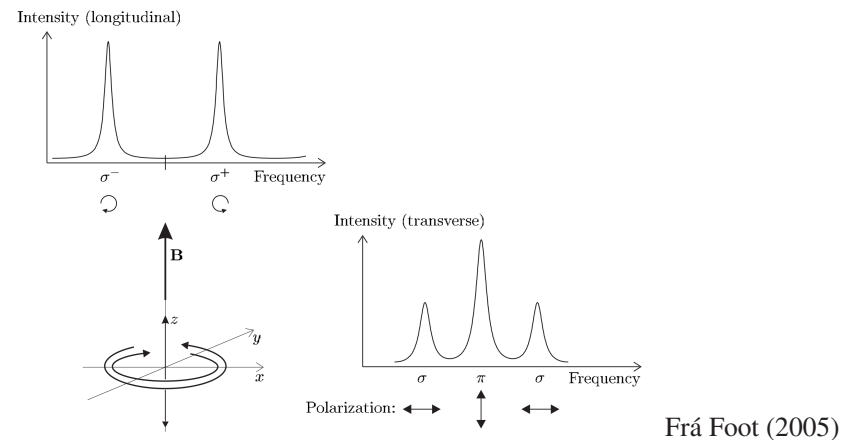
# Zeeman hrif



Frá Foot (2005)

- Þessi  $\pi$ -þáttur línunnar sést í allar stefnur nema í stefnu **B**

# Zeeman hrif



- Hringhreyfing rafeindanna í  $xy$ -planinu með horntíðni  $\omega_0 + \Omega_L$  og  $\omega_0 - \Omega_L$  framkallar útgeislun á þessum tíðnum
- Þegar horft er á þetta þversum, sést þetta sem línuleg sínushreyfing, eftir  $x$ -ásnum sést aðeins  $y$ -þátturinn og geislunin er línulega skautuð hornrétt á segulsviðið
- Þetta eru  $\sigma$ -þættirnir og sjást þeir í bæði langsum of þversum stefnur

## Zeeman hrif

- Ef horft er í stefnuna sem er andstæð segulstefnunni þá er rangsælis hringhreyfingin tengd  $\omega_0 + \Omega_L$  tíðninni og tíðnihliðrunin  $\Omega_L$  samsvarar

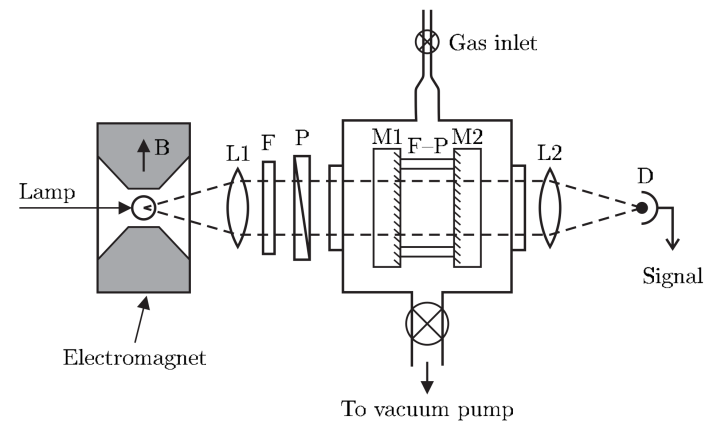
$$\frac{\Omega_L}{2\pi B} = \frac{e}{2\pi m_e} = 14 \text{ GHz T}^{-1}$$

- Ef við segjum að segulorkan  $\hbar\Omega_L$  sé  $\mu_B B$  sem er orka segulvægis í segulflæðiþéttleika  $B$ , sést að eining segulvægis atóms er segulvægiseining Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$$

- Zeeman sýndi fram á að atóm innihalda rafeindir með því að mæla hlutfall massa og hleðslu,  $e/m_e$  og sagði fyrir um formerki hleðslunnar með því að skoða skautun útgeislaðs ljóss

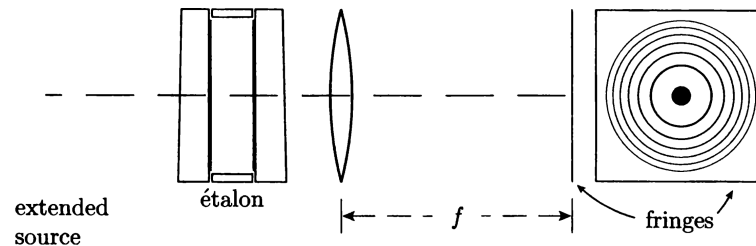
## Tilraunir sem sýna Zeeman hrif



Frá Foot (2005)

- Myndin sýnir tilraunauppstillingu til að rannsaka Zeeman hrif
- Lágþrýstings afhleðslulampi inniheldur atómin sem til skoðunar eru
- Honum er komið fyrir milli skauta rafseguls sem getur framkallað 1 T segulsvið
- Linsa safnar ljósinu sem er geislað út hornrétt á stefnu segulsviðsins (þversum mæling) og sendir um Fabry-Perot glertvennu (e. étalon)

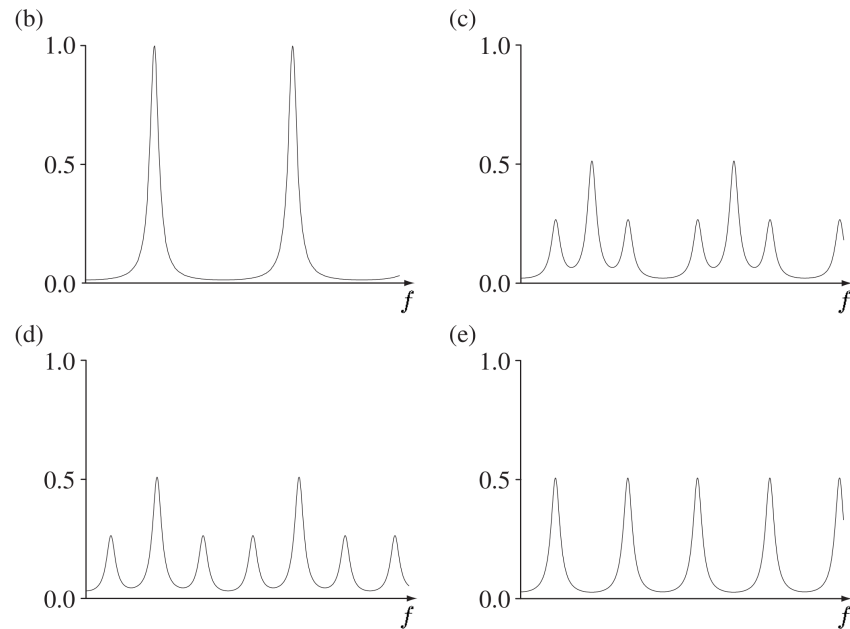
## Tilraunir sem sýna Zeeman hrif



Frá Brooker (2003)

- Fabry-Perot glertvenna samanstendur af tveimur speglum með vel skilgreindu bili á milli þeirra
- Endurteknar speglanir innkomandi ljóss á milli speglanna framkallar víxlverkunarmynstur sem koma fram sem sammiðja hringir
- Ljósfræðilengdinni (e. optical path) má breyta með því að breyta þrýstingi gass á milli speglanna

# Tilraunir sem sýna Zeeman hrif



Frá Foot (2005)

(b) án segulsviðs, (c) veikara segulsvið (hornrétt á segulsviðið), (d) sterkara segulsvið (hornrétt á segulsviðið) og (e) segulsvið (í stefnu segulsviðs) og aðeins  $\sigma$ -þættir sjást

$\implies$  Dæmi 1.9

## Frekari upplýsingar

- Þessi kafli er að mestu byggður á kafla 1 hjá Foot (2005). Svipaða umfjöllun er að finna í kafla 6 hjá Krane (2012). Thomson og Rutherford líkönin eru rædd í kafla 4 hjá Eisberg and Resnick (1985) og kafla 6 hjá Krane (2012). Plómubúðingslíkanið var sett fram af Thomson (1904). Líkan Rutherford er sett fram af Rutherford (1911) og líkan Bohr af Bohr (1913). Frekari upplýsingar um Fabry-Perot glertvennu má finna í kafla 5 hjá Brooker (2003).

## Heimildir

Balmer, J. J. (1885). Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs. *Annalen der Physik und Chemie* 261(5), 80–87.

Bohr, N. (1913). On the constitution of atoms and molecules. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science Series 6* 26(151), 1–25.

Brooker, G. (2003). *Modern Classical Optics*. Oxford Master Series in Atomic, Optical and Laser Physics. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.



Eisberg, R. and R. Resnick (1985). *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles* (2 ed.). New York, New York: John Wiley & Sons.

Foot, C. J. (2005). *Atomic Physics*. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.

Geiger, H. and E. Marsden (1909). On a diffuse reflection of the  $\alpha$ -particles. *Proceedings of the Royal Society A* 82(557), 495–500.

Geiger, H. and E. Marsden (1913). The laws of deflexion of a particles through large angles. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science Series 6* 25(148), 604–623.

Krane, K. S. (2012). *Modern Physics* (3 ed.). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons.

Rutherford, E. (1911). The scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  particles by matter and the structure of the atom. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science Series 6* 21(125), 669–688.

Thomson, J. J. (1904). On the structure of the atom: an investigation of the stability and periods of oscillation of a number of corpuscles arranged at equal intervals around the circumference of a circle; with application of the results to the theory of atomic structure. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science Series 6* 7(39), 237–265.