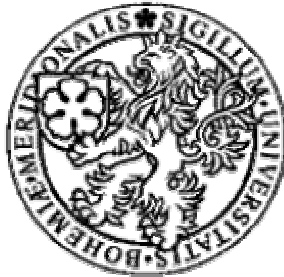


# Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích

Katedra fyziky



## Modely atomu

**Vypracovala:** Berounová Zuzana M-F/SŠ

**Datum:** 3. 5. 2003

# Modely atomu

První kvalitativně správnou představu o struktuře hmoty si vytvořili již kolem roku 450 př. n. l. staří řečtí filozofové Leukippos a Démokritos. Ti si na základě dlouhodobých pozorování přírody představovali, že každá látka je složena z velmi malých částic, které mohou mít různý tvar a velikost a které jsou již dále nedělitelné. Tyto částice byly nazvány atomy (a tomos - nedělitelný).

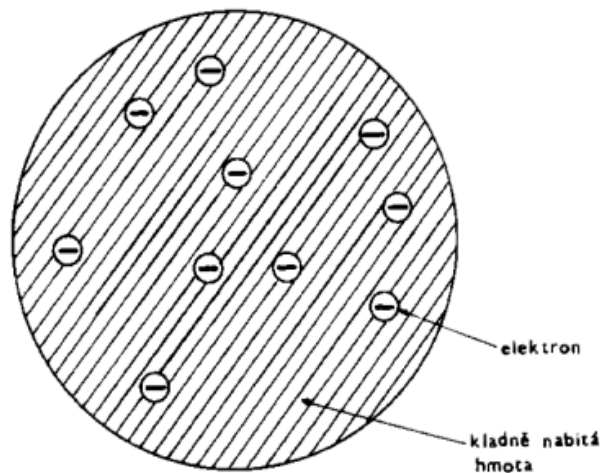
Během dalších staletí se však tato teorie nerozvíjela, a teprve v roce 1803 anglický chemik a fyzik John Dalton vypracoval první fundovanější atomovou teorii, jejíž některé závěry platí dodnes. Vycházel přitom z následujících postulátů:

- každá látka sestává z nepatrných částecek - atomů, které nelze vytvořit, rozdělit ani zničit
- atomy téhož prvku mají stejné chemické vlastnosti, hmotnost, velikost a během chemických reakcí si udržují svou identitu
- atomy různých prvků se navzájem odlišují
- spojováním atomů různých prvků vznikají složitější částice, které italský fyzik Amedeo Avogadro nazval v roce 1811 molekuly

I když vědci 19. století přijali myšlenku, podle níž se chemické prvky skládají z atomů, o atomech samých toho moc nevěděli. Za počátek historie fyziky částic v dnešním slova smyslu lze považovat objev elektronu (Joseph J. Thomson, 1897), který podstatně změnil starou představu o atomech jako nedělitelných stavebních kamenech hmoty. Za skutečně elementární částici se tak na přelomu 19. a 20. století začal považovat elektron a libovolný elektricky neutrální atom nebo nabitý iont bylo možno si představit jako složený systém konečného počtu záporně nabitých elektronů pohybujících se v silovém poli buzeném kladným nábojem. Velikost náboje elektronu byla přitom přirozeně nazvána elementárním nábojem. Záhy bylo také zřejmé, že elektrony nesou jen velmi malou část hmotnosti atomu, neboť např. nejjednodušší (jednoelektronový) atom – atom vodíku – je o tři řády těžší než elektron. To vede k myšlence, že právě kladné nabitá složka dodává atomu téměř veškerou jeho hmotu.

## Thomsonův model atomu:

Když J.J. Thomson v roce 1898 vyslovil hypotézu, že neutrální atomy mají specifickou elektrickou vnitřní strukturu. Domníval se, že atom je objektem tvořeným elektricky kladně nabitou látkou, v níž plavou záporně elektricky nabitě elektrony. Jeho model bývá často nazýván „puďinkový“. Celkový náboj tohoto systému je pak nulový.



Tento model se jevil jako model dobře vystihující základní vlastnosti atomu, který umožňuje vysvětlení interakce atomu s elektromagnetickým polem. Vyhovuje totiž Lorentzově představě elementárních oscilátorů vázaných v látce. Těmito oscilátory mohou být podle tohoto modelu elektrony, vázané v atomech a molekulách, vychýlené vnějším zásahem, z rovnovážné polohy. Interakce (elementárních oscilátorů s elektromagnetickým polem) vysvětluje vznik záření atomu, rozptyl záření na atomu apod.

Jako příklad vezmeme atom vodíku s jedním elektronem umístěným v rovnovážné poloze ve středu kladně nabitě koule o poloměru  $R$ .

Intenzita elektrického pole uvnitř koule:

$$E(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{er}{R^3} \quad \text{pro } 0 \leq r \leq R$$

Vychýlíme-li elektron do vzdálenosti  $r$  ze středu koule, působí na něj síla:

$$F = (-e)E = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{R^3} \cdot r = -kr$$

Elektron je pod vlivem kvasielastické síly a koná vynucené kmity s kmitočtem:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{m_e}} = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{m_e R^3}}$$

potom

$$R = \frac{1}{2\pi} \cdot \left( \frac{e^2}{2\varepsilon_0 m_e v^2} \right)^{1/3}$$

dosadíme-li typický kmitočet emitovaného světla ( $\nu = 5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ), pak dostaneme  $R = 3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ , což souhlasí s rozměry atomů (zjištěno z kinetické teorie plynů).

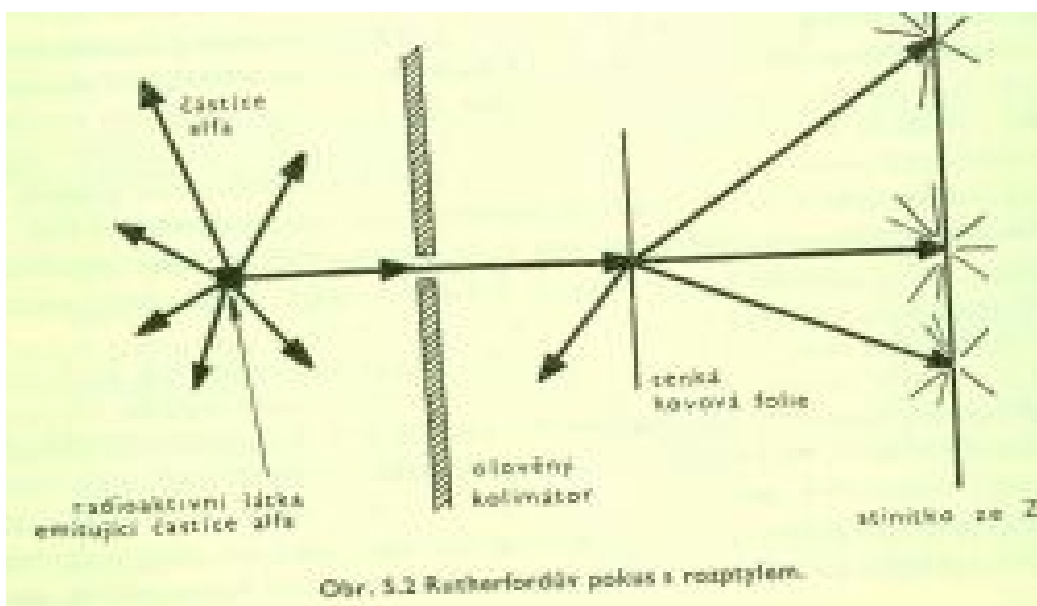
Ale i přes úspěchy pudinkového modelu, zůstala neprověřena otázka prostorového rozdělení nábojů v atomu. Tento test byl proveden až za 13 let po zformulování Thomsonova modelu a označil ho za nesprávný.

## Rutherfordův model atomu:

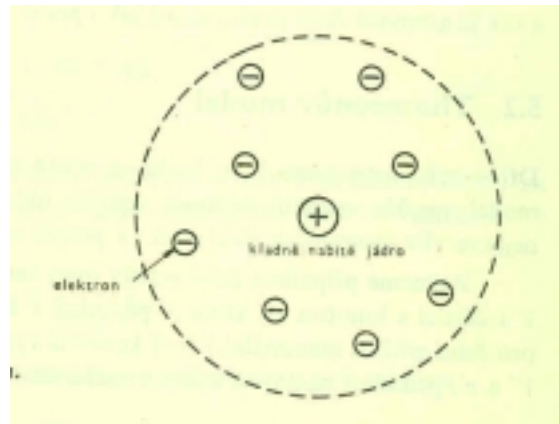
V roce 1911 na návrh Ernesta Rutherforda, byl proveden experiment. Byla použita metoda, která spočívá v sondování atomů rychlými částicemi (částice  $\alpha$  samovolně emitované některými radioaktivními prvky). Zkoumáme pohyb částice (sondy) v silovém poli, vytvořeném jinou částicí a sledujeme parametry částice před a po interakci. Změny určují charakteristiku silového pole zkoumané částice či modelu.

V roce 1911 (Geiger a Marsden) použili atomy hélia (částice  $\alpha$ ), jež ztratily dva elektrony a zůstaly tak s nábojem  $+2e$ . Zdroj těchto částic umístili za olověnou desku s malým otvorem, takže dostali úzký svazek částic alfa. Tento svazek nasměrovali na tenkou zlatou fólii. Za fólií umístili pohyblivé stínítko ze sirníku zinečnatého, které při dopadu  $\alpha$ -částice vydává světelný záblesk.

Podle Thomsona mělo dojít k tomu, že by se na fólii měla zachytit většina částic a zbytek by ukazoval pouze nepatrnou odchylku od původní dráhy (plynulo by to z rovnoměrného rozdělení náboje v atomu, a tím pádem by působila na částice při průchodu fólií jen slabá elektrická síla). Ve skutečnosti bylo zjištěno, že většina částic sice fólií prochází téměř bez odchýlení (střední hodnota odchýlení je pouze něco kolem  $2^\circ - 3^\circ$ ) od původního směru, ale některé se odchylují o velký úhel a nebo se rozptýlí i do zpátečního směru.



Jelikož jsou částice  $\alpha$  několikanásobně těžší než elektron, musely na částice působit i velké síly, které způsobily i odchylku do zpátečního směru. Díky těmto výsledkům Rutherford zobrazil atom, jakoby složený z drobného jádra ( v němž je soustředěn kladný náboj a téměř veškerá hmota atomu) a elektronu v určité vzdálenosti od jádra.



A procházejí-li pak částice  $\alpha$  mimo jádro, jejich odchýlení bude minimální (elektron, díky malé hmotě vůči částici, pohyb této částice moc neovlivní), přiblíží-li se ovšem k jádru, dostávají se částice do silného elektrického pole a budou znatelně rozptýleny. Odhady intenzity elektrického pole u obou modelů ukazují jak odlišné tyto modely jsou.

**U Thomsonova modelu:** kladný náboj je rozložen rovnoměrně po celém objemu (zanedbáme-li elektrony) je intenzita na povrchu (kde je max.) asi  $10^{13}$  V/m

**U Rutherfordova modelu:** kladný náboj je v jádře a intenzita na povrchu jádra je  $10^{21}$  v/m což je  $10^8$  krát větší, takové pole může odchýlit nebo i obrátit směr pohybu částice  $\alpha$ .

**Pozn:** velikost odchylky průchodu částic kolem jádra závisí na jaderném náboji. (Jaderný náboj neboli násobky (+e) kladných nábojů, tento počet (Z) se dnes nazývá atomové číslo prvku.)

Střední odchylka (stanovená Geigerem a Marsdenem) měla velikost kolem  $1^\circ$ . Dále bylo zjištěno, že o úhel větší než  $1^\circ$  (např.  $90^\circ$  a více) se odchýlí 1 částice z 8000 případů. Pravděpodobnost výskytu těchto odchýlených částic je  $10^{-3500}$ . Neboli 1 z každých  $10^{3500}$  částic  $\alpha$  by se měla rozptýlit o úhel  $90^\circ$  a více, což je rozpor s provedeným experimentem a Thomsonův model proto je chybný.

## Úhel rozptylu částic

Úhel rozptylu částic odvodil Rutherford (na základě představy složení atomu z jádra a obalu). Využil při tom fyzikální zákony mikrosvěta:

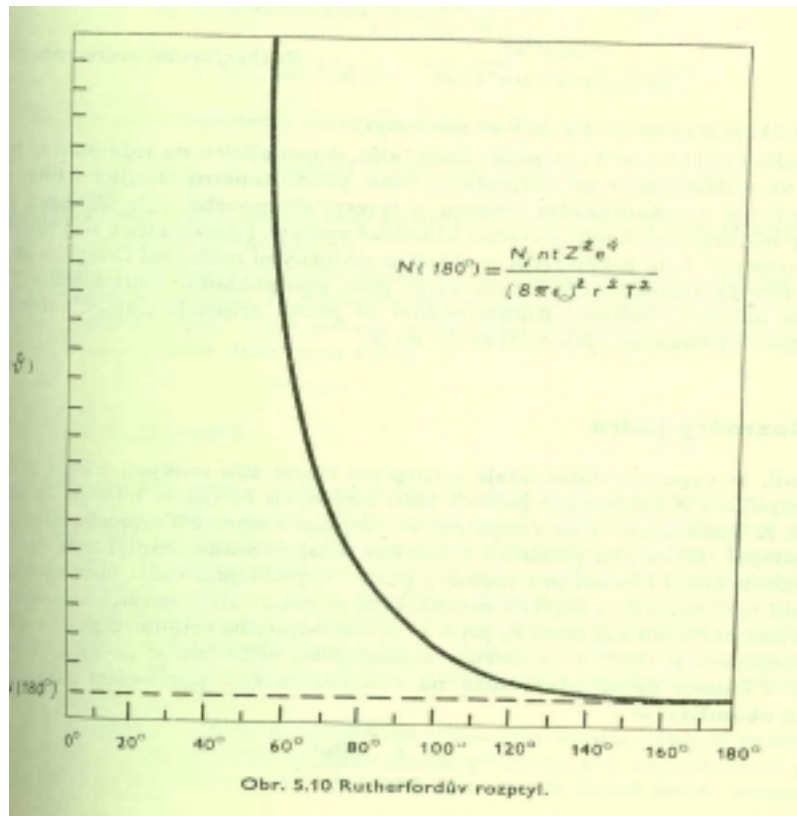
- částice  $\alpha$  i jádro považoval za hmotné body s elektrickým nábojem (zákony mechaniky: pohyb v centrálním poli)
- mezi oběma body působí pouze odpudivá síla (popsané zákony elektrostatiky – tvar síly)
- jádro je mnohem těžší než  $\alpha$ - částice a uvažujeme též, že je stabilní během interakce

vzorec pro rozptyl:

$$N(\vartheta) = \frac{N_i \cdot n \cdot t \cdot Z^2 e^4}{(8\pi\epsilon_0)^2 r^2 T^2 \sin^4\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)}$$

počet částic  $\alpha$ , dopadajících na jednotkovou plochu stínítka ve vzdálenosti  $r$  od rozptylující fólie, přímo úměrný tloušťce  $t$  fólie, počtu atomů fólie  $n$  v jednotkovém objemu a čtverci atomového čísla  $Z$  těchto atomů je nepřímo úměrný čtverci kinetické energie  $T$  částic  $\alpha$

$\sin^4\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)$ , kde  $\vartheta$  je úhel rozptylu.



RUTHERFORDOVI SE PŘIPISUJE „OBJEV“ ATOMOVÉHO JÁDRA.

## Jádrový model atomu

Atom se skládá ze dvou částí:

- z jádra, kde je uložena kladně nabitá hmota atomu
- z obalu, tvořeného elektrony

Poloměr atomového jádra je menší než  $10^{-14}$  m a podstatně menší než rozměr atomu  $10^{-10}$  m. V jádře je soustředěna většina hmoty (např. u vodíku je poměr hmoty jádra ku obalu asi 1840:1). Náboj jádra je tvořen celistvým násobkem elementárního náboje (toto plyne z toho, že za normálního stavu jsou atomy neutrální a nosiče záporného náboje jsou elektrony)

Rutherfordův model atomu, bývá často označován jako planetární model atomu, ve kterém se elektrony pohybují na stabilních drahách (orbitách), díky působení přitažlivé síly coulombovské.

## Atom vodíku:

Podmínka stability: 
$$F = \frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}$$

Postupná rychlost elektronu: 
$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m_e r}} \quad (1)$$

Celková energie elektronu: 
$$E = E_k + E_p$$

$$E = \frac{m_e v^2}{2} + \left( -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)$$

mínus u  $E_p$  značí, že síla působící na elektron je přitažlivá.

Po dosazení ze vztahu (1) za  $v$  dostaneme:

$$E = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Celková energie je záporná, protože je elektron vázaný k jádru. Kdyby byla energie větší než nula, měl by elektron mnoho energie a nezůstal by na uzavřené dráze kolem jádra.

Energie potřebná k rozdělení vodíkového atomu na  $+e$  a  $-e$  je 13,6 eV. Vazebná energie je tedy 13,6 eV =  $2,2 \cdot 10^{-18}$  J, pak poloměr dráhy elektronu ve vodíku je  $5,3 \cdot 10^{-11}$  m

*Chyba Rutherfordova modelu:*

Z elektromagnetické teorie vyplývá, že elektrické náboje se pohybují se zrychlením, vyzařují energii. Elektron pak zářením ztrácí energii, jeho celková energie se zmenšuje a elektron se po spirále blíží k jádru. Po uplynutí asi  $10^{-16}$  s by se atom vodíku „zhroutil“ a elektron by splynul s jádrem. Což se nestává. Budeme tedy muset konstatovat, že v mikrosvětě přestávají platit některé fyzikální zákony, které platí v makrosvětě.

## Bohrův model atomu

První teorii vodíkového atomu, která uspěla při vysvětlování významnějších aspektů chování vodíku, přeložil v roce 1913 Niels Bohr. Ukázal, že Rutherfordův planetární model atomu není stabilní podle klasických zákonů fyziky. Opravil jeho model, vyslovil předpoklady, které jsou v rozporu s klasickou mechanikou tak i s elektrodynamikou.

- Postuláty: 1) Atomy se nacházejí v energeticky ustálených stavech, ve kterých neabsorbují ani neemitují energii. Energie  $E_k$  odpovídající těmto stavům, tvoří diskrétní posloupnost a řídí se kvantovými pravidly.
- 2) Atom emituje nebo absorbuje záření po kvantech při přechodu z jednoho stacionárního stavu do druhého.

Pro kvantum záření platí:  $h\nu = E_i - E_f$   
kde je  $E_i$  energie počátečního stavu  
 $E_f$  energie koncového stavu

Na elektron působí coulombova síla:

$$F_c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}$$

dále platí:  $m_e \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}$  pak poloměr orbity je :  $r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e^2} \cdot n^2$   $n = 1, 2, 3, \dots$

poloměr orbity  $r_n$  je kvantován, může nabývat jen určitých hodnot

$$r_n = a_0 n^2 \quad \text{kde} \quad a \equiv r_1 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2}$$

výraz  $a_0$  je složen jenom ze základních fyzikálních konstant a nazývá se *l. (Bohrův) poloměr*  $a_0 = 5,3 \cdot 10^{-11}$  m a je ve shodě s rozměry atomů podle kinetické teorie.

Vztah mezi energií a poloměrem orbity:

$$E_i = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -k \cdot \frac{1}{n^2} \quad k = 13,6 \text{ eV}$$

$$hf = E_i - E_f = -k \cdot \frac{1}{i^2} - \left( -k \cdot \frac{1}{f^2} \right) = k \left( \frac{1}{i^2} - \frac{1}{f^2} \right)$$

$$h \cdot c \cdot \nu = k \cdot \left( \frac{1}{i^2} - \frac{1}{f^2} \right)$$

$$\nu = \frac{k}{hc} \cdot \left( \frac{1}{i^2} - \frac{1}{f^2} \right)$$

$$R = \frac{k}{hc}$$

R.... Rydbergova konstanta ( $R=1,097 \cdot 10^{-7} \text{ m}^{-1}$ )

## Kvantově mechanický model atomu

Vyřešil řadu nedostatků Bohrova modelu, tato teorie vycházela ze zákonů klasické fyziky s omezujícími podmínkami (postuláty).

Elektron má *mechanické i vlnové vlastnosti (vlnový dualismus)*– fotony se chovají jako částice s nulovou klidovou hmotností a *elektrony* vykazují vlnové vlastnosti (např. elektronové mikroskopy). Kvantovým stavům elektronu lze přiřadit stojaté elektronové vlny v trojrozměrném prostoru. Každé z kvantovým čísel  $n, l, m$  charakterizuje trojrozměrnou vlnu.

Není možné určit přesný popis dráhy elektronu v atomu, proto se musíme omezit na pravděpodobnostní popis dráhy.

Tento model je převážně matematický, jehož názornost je značně omezena. Stav částice, popř. systému částic je vyjádřena pomocí veličiny *vlnové funkce  $\psi$*  a je možné ji vypočítat pro zvláštní stavy podle *Schrödingerovy rovnice*.

Oblast, kde je nejvyšší pravděpodobnost výskytu elektronu – **orbital**.

Orbital a vlastnosti vlnové funkce charakterizují **kvantová čísla**:



kvantové číslo	Název	možné hodnoty	význam
$n$	hlavní	$n = 1, 2, 3, \dots$	určuje energii a velikost orbitalu
$l$	vedlejší	$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$	určuje tvar orbitalu
$m$	magnetické	$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$	určuje orientaci orbitalu v prostoru
$s$	spinové	$s = \pm \frac{1}{2}$	určuje moment hybnosti elektronu

Danému kvantovému číslu  $n$  odpovídá  $n^2$  kvantových stavů s různými hodnotami  $l$  a  $m$ .

Slupka elektronového obalu: v ní jsou jen elektrony se stejným kvantovým číslem  $n$ .

V každé slupce je  $2 \cdot n^2$  elektronů. Slupky jsou označeny písmeny (pro  $n = 1 \rightarrow K, 2 \rightarrow L, \dots, 7 \rightarrow Q$ ).

Hlavním kvantovým číslům odpovídají řádky: **periody** Mendělejevovy soustavy prvků. Vedlejší kvantová čísla jsou vyjádřena také písmeny: pro  $0 \rightarrow s$ , pro  $1 \rightarrow p$ , pro  $2 \rightarrow d$ , pro  $3 \rightarrow f$ , pro  $4 \rightarrow g$  (prvek s tak vysokým protonovým číslem ještě nebyl objeven, první prvek, jehož elektrony by vstupovaly do orbitalů  $g$  by měl protonové číslo 121)

Pro elektrony stejně jako pro protony či neutrony platí **Pauliho vylučovací princip**:

Což znamená, že v daném atomu nemohou existovat dva elektrony ve stejném kvantovém stavu, tj. se stejnými kvantovými čísly  $n, l, m, s$ .

Částice, pro které Pauliho vylučovací princip platí, se nazývají **fermiony**. Ty, pro které neplatí **bosony** (např. fotony).

Pro vyplňování orbitalů elektrony platí ještě Hundovo pravidlo:

## Sommerfeldův model atomu

Sommerfeld nahradil kruhové dráhy modelu atomu Nielse Bohra dráhami eliptickými. (zdokonalil kvantově mechanický model atomu). Očekával, že se tak zjemní kvantování drah jednak co do velikosti hlavní poloosy a také co do tvaru dráhy vymezeném excentricitou, což ve svých důsledcích povede i v teorii k rozštěpení spektrálních čar. Kromě hlavního kvantového čísla  $n$  zavedl ještě vedlejší kvantové číslo  $k$  (ta nyní charakterizovala velkou i malou poloosu elipsy).

Velikost poloos udávaly vztahy:

$$a_n = n^2 a_1 \quad b_n = k n a_1 \quad \text{pro } 1 \leq k \leq n$$

V roce 1916 definoval magnetické kvantové číslo a v roce 1916 vnitřní kvantové číslo. Svoji teoretickou prací se pokusil vysvětlit význam vnitřního kvantového čísla, což vedlo k objevu spinu elektronu.

Ukázalo se však, že ani tento předpoklad nesplnil očekávání teprve po zavedení relativistických rovnic se částečně podařilo jemnou strukturu čar vysvětlit. Vysoká rychlost elektronů totiž ovlivňuje jeho hmotnost a vyvolává tím stáčení eliptické dráhy do růžice. Díky změnám excentricity (hlavní poloosy zůstávají stejné) při přechodu z jednoho oběhu do druhého může pak elektron na téže kvantové dráze nabývat různé hodnoty energie. Nepodařilo se ale vysvětlit řadu tzv. **dubletů** (dvě spektrální čáry těsně u sebe, rozeznatelné jen na silných spektrografech).

Holandští fyzici George Uhlenbeck a Samuel Goudsmit se v následujících letech pokusili vysvětlit tuto skutečnost předpokladem, že na každé hlavní kvantové dráze obíhají dva elektrony, které navíc rotují kolem své osy, každý v jiném smyslu. (této rotaci se říká spin). I přes dílčí výsledky se nikdy nepodařilo zcela vystihnout jemnou strukturu spektrálních čar a naopak z něho vyplynula existence velkého množství jiných čar, které se experimentálně nepodařilo prokázat. Tímto pokusem skončily experimenty vedoucím tímto směrem, jelikož přístroje vhodné pro popis makrokosmu nebyly vhodné pro popis atomových mikrostruktur. Bylo nutné najít vhodnější metodiku a tou se stala vlnová optika.

Použitá literatura:

- 1, Arthur Beiser: Úvod do moderní fyziky (přeložil RNDr. Josef Čada), Praha 1975, Academia
- 2, Atomová a jaderná fyzika, skripta (Doc. RNDr. František Drsa, Doc. RNDr. Michal Suk, CSc, Doc. RNDr. Zbyšek Trka, CSc)
- 3, Internet