I.4. A H-atom Bohr-modellje (1913)

A drámai probléma: a mag körül keringő elektron(ok) mozgása klasszikusan NEM értelmezhető!!

Bohr ezért *posztulátum*okat tesz*:*

1. Stacionárius állapotok léte: az elektron sugárzás nélkül mozog körpályákon, ezeket egész számok jellemzik. A klasz-szikus fizika szerint ez lehetetlen: köráram >> elektromágn. sugárzás >> energiavesztés, az e^- be kellene essen a magba.

2. Az elektron hirtelen (nem tisztázott) módon, egyik állapotból a másikba mehet, miközben fényt nyel el, illetve bocsájt ki: $E_i - E_j = \Delta E = h\nu$ (I)
ahol ν a fény frekvenciája, s h-t ma Planck-állandónak hívjuk, értéke $h = 6.626 \times 10^{-34}$ J s

|--

Mekkora a pályasugár és energia? (a levezetés „apróbetűs”)

Jelölések: E_K = kinetikus energia; I = tehetetlenségi nyomaték; $L = I\omega$, impulzusmomentum; $\omega = 2\pi\nu$, körfrekvencia. m_e = elektron tömege, e = elektron töltése.
(Elevenítsük fel a mechanika alapfogalmait, ill. az elektromosság Coulomb-törvényét!)

A kvantálás: Bohr „posztulálta”, hogy a kinetikus energia a következő képlet szerint kvantált:

$$\boxed{E_K = (1/2)\, n\, h\nu} \quad n=1,2,3,.. \quad (1a)$$

Másrészt, klasszikus mechanika ismert képlete a körmozgás energiájára:

$$E_K = (1/2)I\omega^2 = \text{(ez tehát)} = (1/2)\, n\, h\nu$$

(*cf.* haladó mozgás, ½ mv^2)
Ezek szerint az impulzusmomentum is kvantált:

$$L = I\omega = n\, h\nu \,/\, \omega = n\,(h/2\pi) \quad (1b)$$

[*(1a) és (1b) ekvivalens megfogalmazás*].

Kiszámítjuk a pályasugár, r lehetséges értékeit:

általánosságban, körmozgásra: $I = m_e r^2$; ezzel (1b)-ből:

$$I\,\omega = m_e r^2\,\omega = n\,(h/2\pi) = L \quad (1c)$$

Fentiek, (1a)-(1c) csak a kvantálást fogalmazták meg.

Most nézzük az egyensúlyt a keringés feltételeként, klasszikusan;
az egyensúly alapja: centrifugális erő = Coulomb-vonzás

$$m_e\, r\, \omega^2 = (1/4\pi\varepsilon)\, e^2/r^2 \quad (2)$$

(1c)-ből $\omega = n\,(h/2\pi) / (m_e r^2)$, és ω^2-et (2)-be írva:

$$m_e\, r\, n^2h^2/(4\pi^2\, m_e^2\, r^4) = (1/4\pi\varepsilon)\, e^2/r^2$$

Utóbbiból rögtön adódik: [szokásos jelölés $(h/2\pi) \equiv \hbar$]

$$\boxed{r = n^2\,(\hbar^2/m_e e^2) = n^2 a_o} \quad (II)$$

Ezt jegyezzük meg: a sugár n négyzetével nő!
[ld. később, kvantummechanikai leírás, „atomi egységek”:
ha n = 1, $a_o = 4\pi\varepsilon\,(\hbar^2/m_e e^2)$. Megállapodás szerint az *atomi hosszegység*, 1 *bohr*; a_o = 0.529177 Å].
(Továbbiakban *r* már a_0 egységben lesz, s a permittivitás a_0-ban már benne van.)

Általánosságban, Coulomb-potenciálra belátjuk:
$E_k = -V/2$, a „viriál-tétel”.

Energia: a) kinetikus: $E_K = (1/2)\, I\, \omega^2 = (1/2)\, m_e\, r^2\, \omega^2$

(2)-t r/2 -vel szorozva: $E_K = (1/2)\, r\, e^2/r^2 = (1/2)\, e^2/r$

b) a Cb-vonzás potenciális energiája: $V = -\,e^2/r$

Végül: $\boxed{E = E_K + V = -\,(1/2n^2)\,(e^2/a_0)}$

$e^2/a_0 = E_h$ = 4.36 aJ, „hartree”, az energia atomi egysége.
a – „atto”, egy *prefixum,* 10^{-18}.

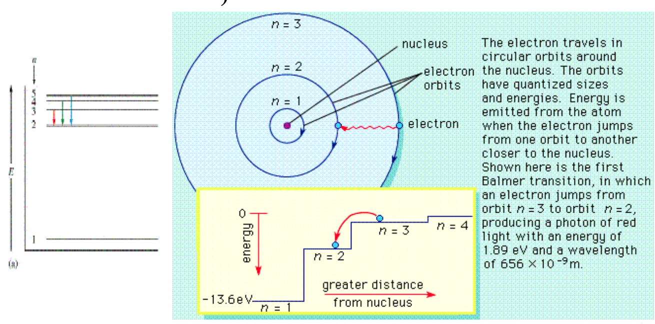
Ezzel, tömören, a H-atom energiája:

$$\boxed{E = -\,(1/2n^2)\, E_h} \qquad \text{(III)}$$

[Látjuk, a ***viriál tétel*** így is írható: E = (½)V.]

A Balmer (ill. Rydberg)-képlet ezzel magyarázatot nyert!!, vö. I. és III. képlet.

A H-atom modellje tehát:



Energiaszintek Pályák