

Radiologická fyzika

Hmota se skládá z atomů

Atomy

Zmínka o kvantové teorii

podzim 2011, druhá přednáška

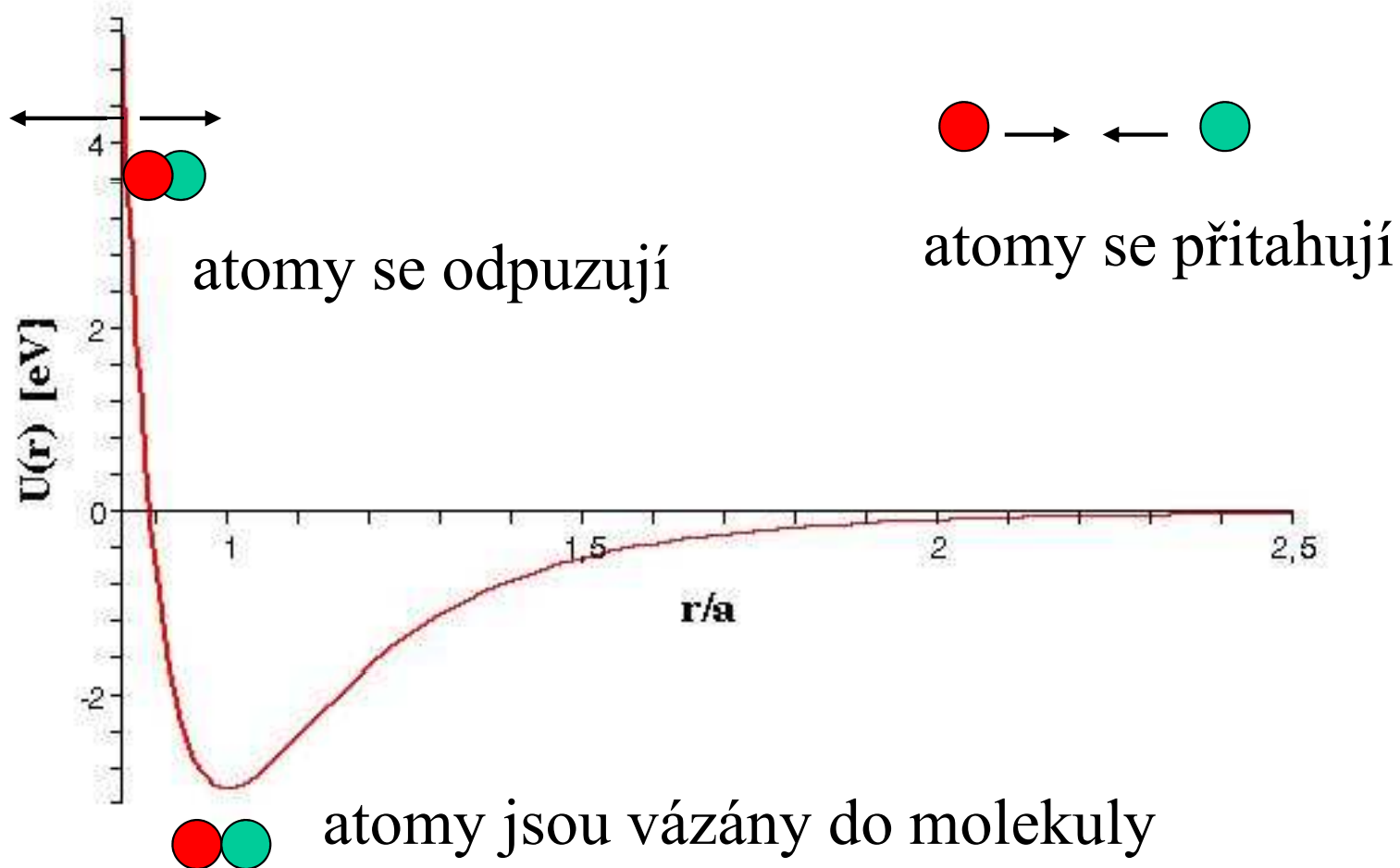
Hmota se skládá z atomů

Úvod podle Richarda Feynmana

Kdyby při nějaké katastrofě vzalo za své všechno, co vědy zjistily, a měli bychom generacím tvorů, kteří by přišli po nás předat jednu větu, která by v nejméně slovech obsahovala nejvíc informací, která by to byla? Podle mě by to byla *atomová hypotéza* (či existence atomů nebo jak tomu chcete říkat): *Všechno se skládá z atomů – nepatrných částíček, které jsou ve věčném pohybu a které se přitahují, jsou-li dál od sebe, a odpuzují, když je zmáčkne příliš blízko k sobě.* V této jediné větě je obsaženo obrovské množství informací o světě, stačí k tomu jen trocha fantazie a přemýšlení.

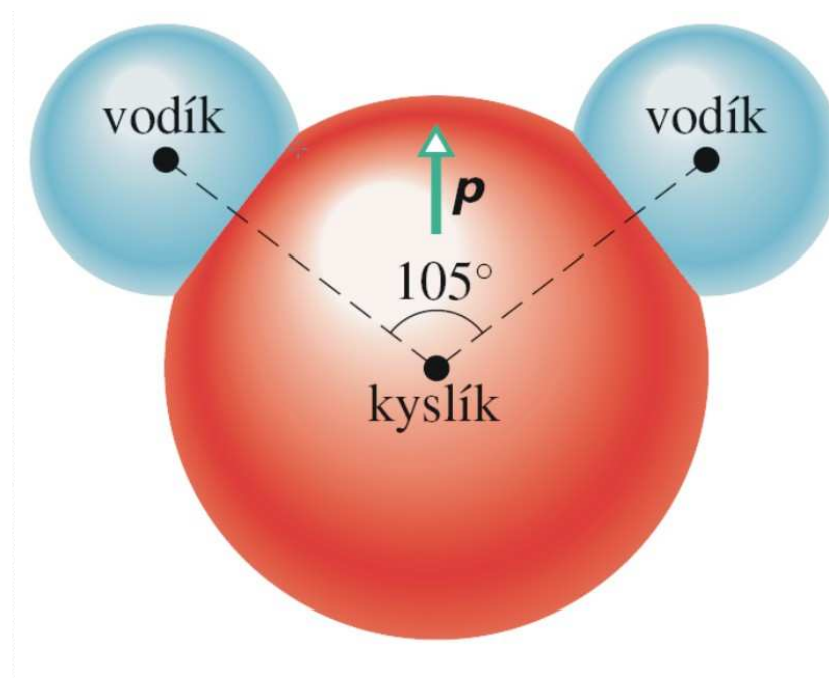
Atomy se vážou do molekul – proč?

Typický průběh potenciální energie



Pozoruhodná molekula vody

Voda: H₂O



Neutrální molekula vody má ve svém plynném stavu elektrický dipólový moment p roven $6,2 \cdot 10^{-30}$ C.m .

Daltonova atomová hypotéza I

John Dalton (1766-1844):

A New System of Chemical Philosophy (1805)

Zákony slučovacích poměrů:

1. **stálých** (Proust 1799): Prvky tvořící sloučeninu jsou vždy ve stejném váhovém poměru, který je pro sloučeninu charakteristický.

H₂O	H	O
	1 g	8 g
	5 g	40 g
	x g	8x g

Daltonova atomová hypotéza II

2. **násobných** (Dalton 1803): Jestliže jeden prvek tvoří s druhým více než jednu sloučeninu, jsou slučovací poměry obou prvků v těchto sloučeninách jednoduchými celistvými násobky.

	N [g]	O [g]	
N₂O	14	8	1
NO	14	16	2
N₂O₃	14	24	3
NO₂	14	32	4
N₂O₅	14	40	5

Daltonova atomová hypotéza III

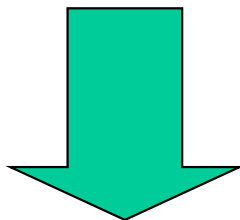
3. **vzájemných** (Richter 1792): Jestliže se dva prvky slučují s třetím v určitém poměru, slučují se mezi sebou ve stejném poměru anebo v jeho jednoduchém celistvém násobku.

	H	O	Na	Cl
H		H_2O	NaH	HCl
O	H_2O		Na_2O	Cl_2O
Na	NaH	Na_2O		NaCl
Cl	HCl	Cl_2O	NaCl	

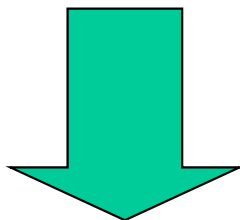
Od hypotézy k teorii

Experimentální fakta

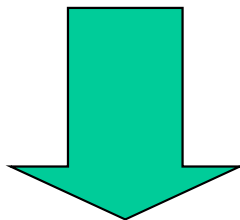
Zákony stálých poměrů slučovacích



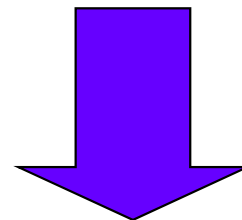
Hypotéza



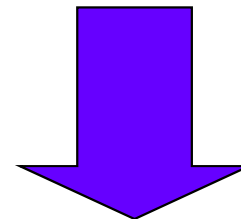
Ověření v obecnějších souvislostech



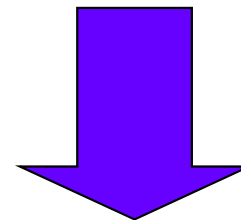
Teorie



Atomová hypotéza



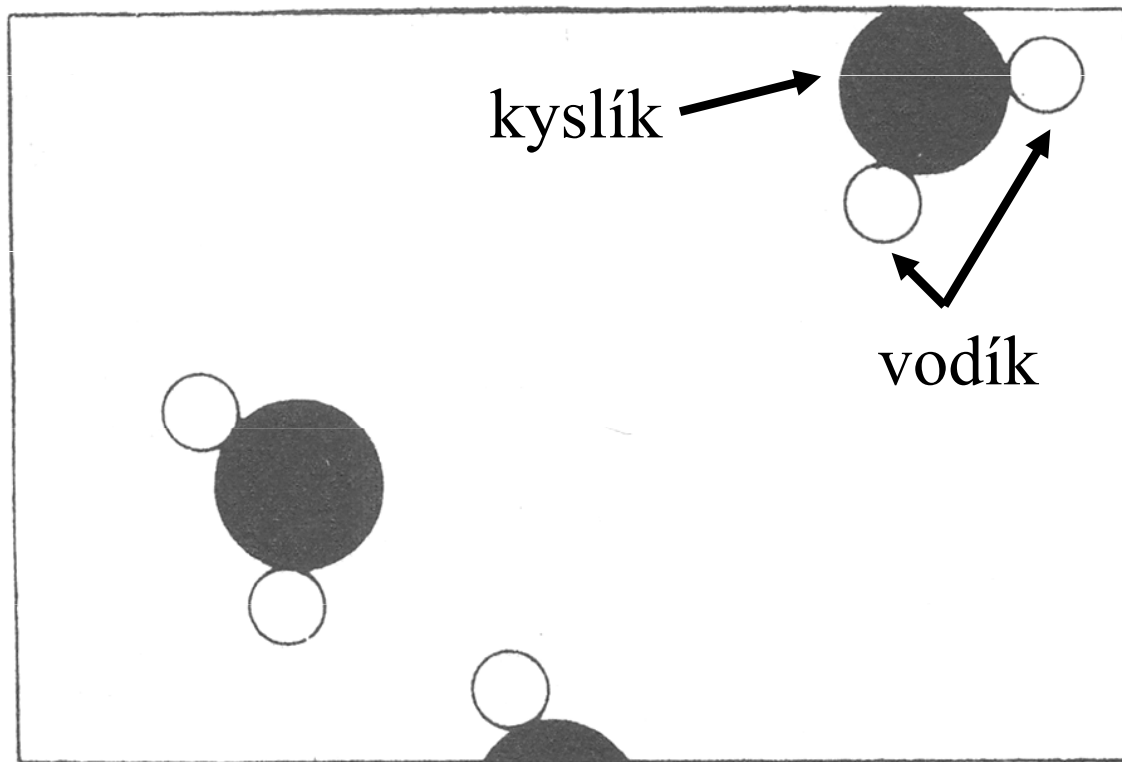
Struktura látek, chemické reakce, kinetická teorie



Atomová teorie

Skupenství látek: plynné

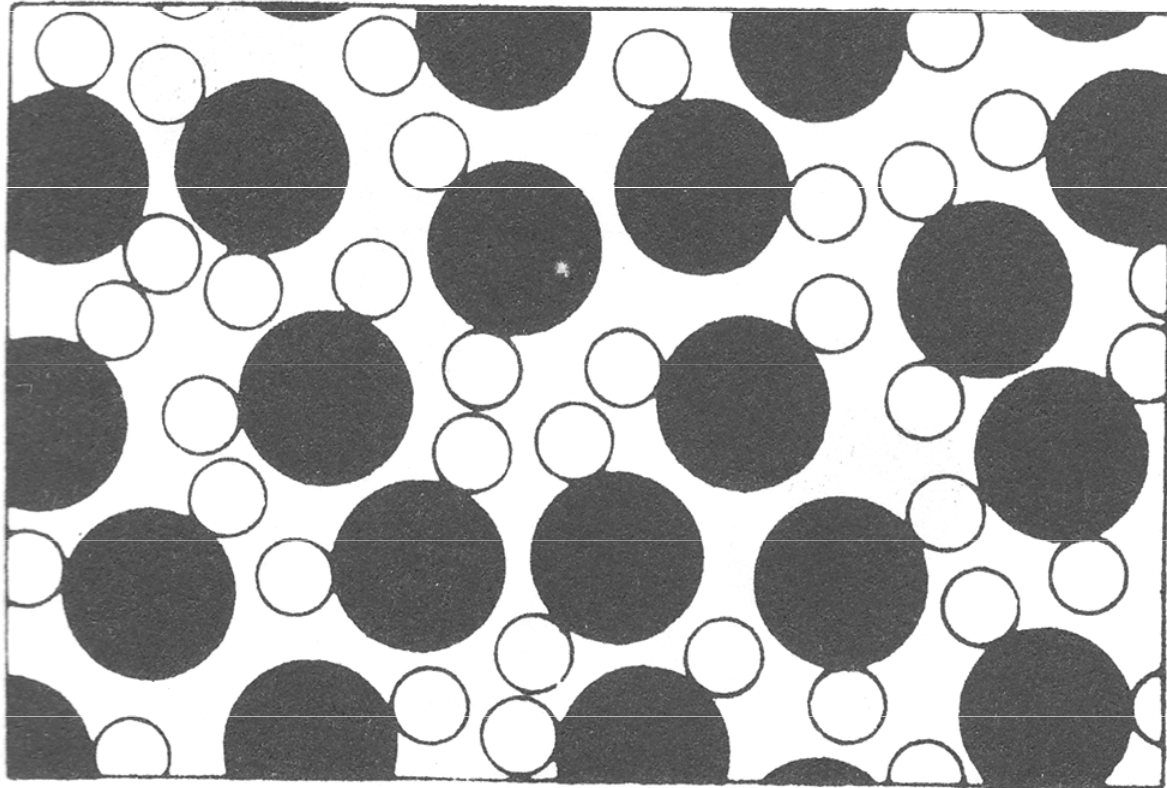
Jednotlivé atomy (nebo molekuly) jsou od sebe většinou, kromě krátké doby vzájemných srážek dosti vzdáleny, jejich pohyb je zcela neuspořádaný.



Vodní pára

Skupenství látek: kapalné

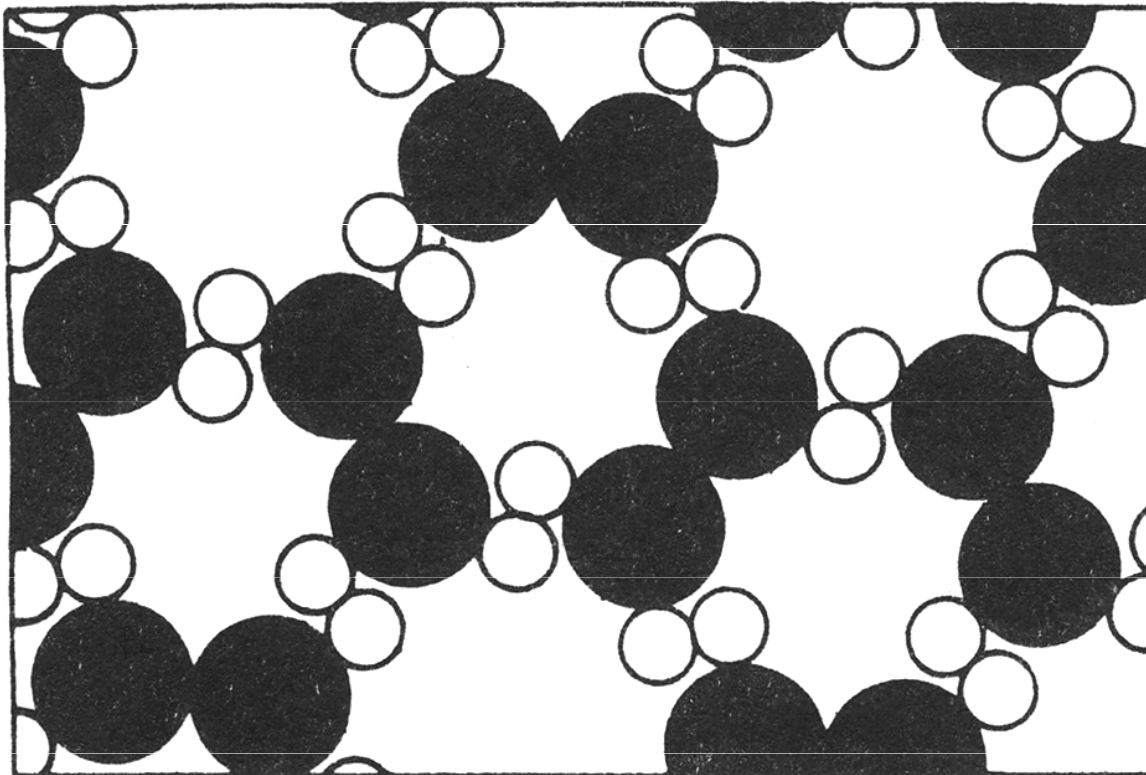
Atomy (nebo molekuly) jsou sdruženy do větších celků, jeví se určitá uspořádanost v malých oblastech, ale pohyb atomů (molekul) je ještě značný, neděje se jen v okolí nějaké rovnovážné polohy.



Voda

Skupenství látek: pevné

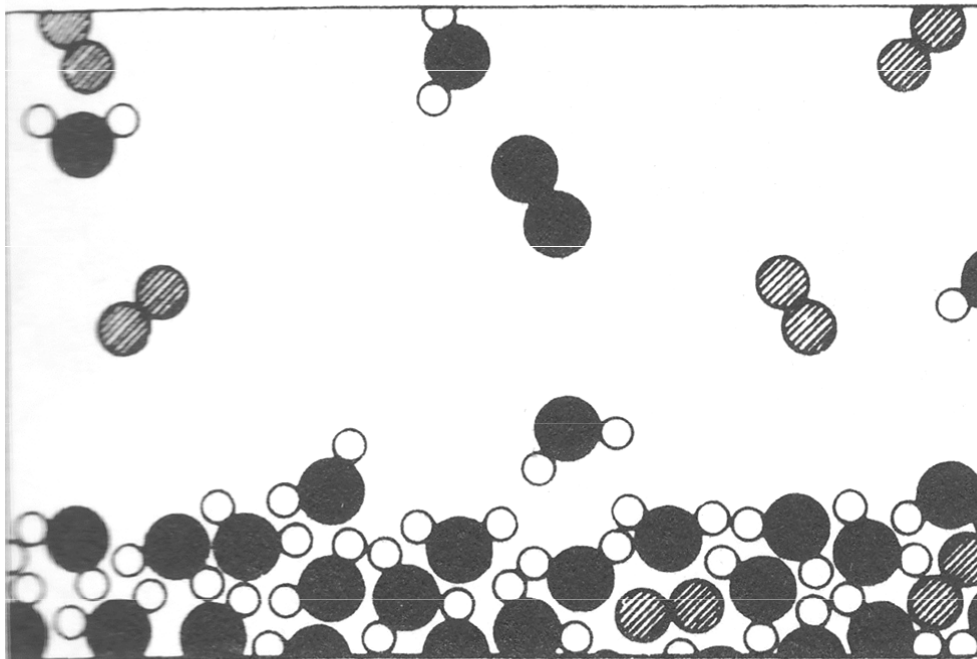
Jednotlivé atomy pouze kmitají kolem své rovnovážné polohy, jsou vzájemně vázány, jsou pevně uspořádány v malých oblastech, u krystalických látek dokonce ve velkých oblastech.



Led

Rovnováha skupenství

Při rovnovážném stavu je počet molekul kondenzujících stejný jako počet molekul, které se vypařují. Ubíhající molekuly odnášejí energii, kterou spotřebovaly na překonání přitažlivé síly molekul povrchu kapaliny, naopak molekuly přilétající jsou urychlovány touto silou a energii přinášejí.



Teplota je dána střední kinetickou energií neuspořádaného pohybu molekul. Při převažujícím vypařování teplota klesá, při převažující kondenzaci teplota roste.

Vzduch – plynné skupenství
Voda – kapalné skupenství

●
kyslík

○
vodík

▨
dusík

Kolik je atomů v 1 molu?

Atomová jednotka hmotnosti **u** je definována pomocí hmotnosti volného atomu uhlíku 12 v základním stavu

$$1 \text{ u} = \frac{1}{12} m(^{12}\text{C}) = 1,660\,538\,782(83) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Látkové množství udáváme pomocí jednotky **mol**. Mol je látkové množství soustavy, která obsahuje tolik elementárních entit, kolik je atomů v 0,012 kg uhlíku 12. Při užití molu musí být elementární entity specifikovány. Mohou to být atomy, molekuly, ionty, elektrony, jiné částice nebo skupiny takových částic.

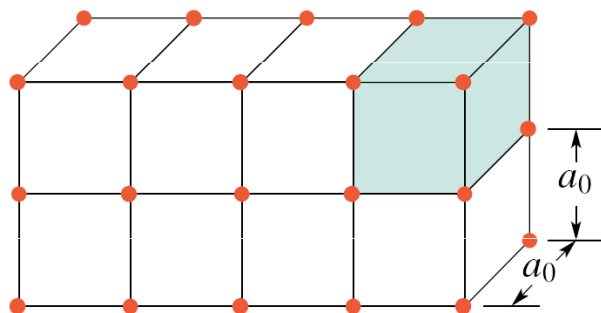
Avogadrova konstanta

$$N_A = 0,012 \text{ kg mol}^{-1} \text{ u}^{-1} = 6,022\,141\,79(30) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

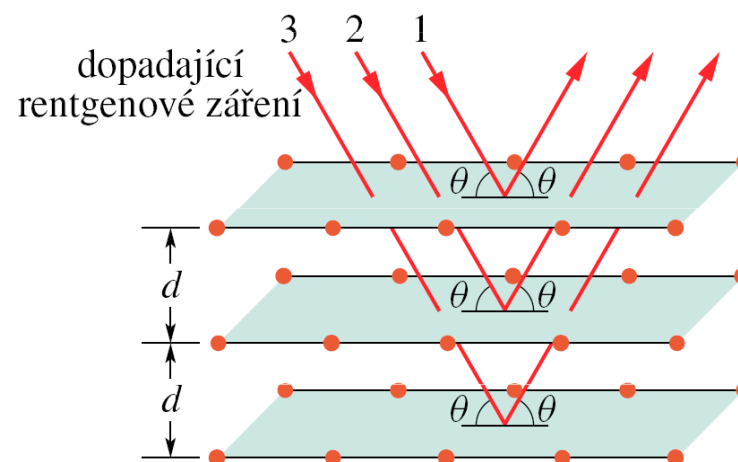
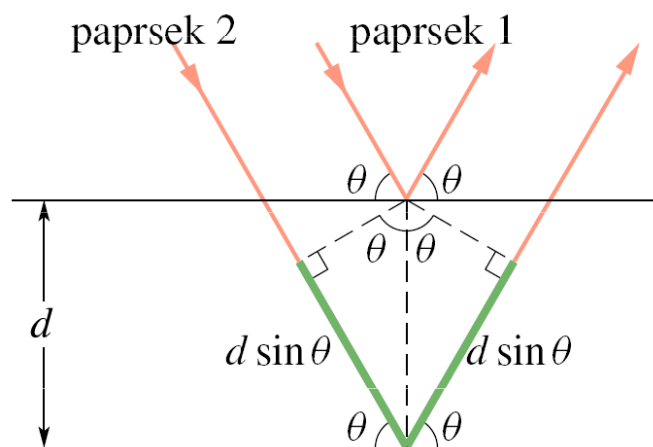
Difrakce rentgenového záření

V roce 1912 Max von Laue vytvořil dvě hypotézy:

✓ Krystal tvoří pravidelně uspořádaná mřížka atomů.



✓ Rentgenové paprsky se chovají jako světelné vlny, pouze jejich vlnová délka je podstatně kratší.



Měření Avogadrovy konstanty

Pro difrakční maxima platí Braggova rovnice

$$2d \sin\theta = n\lambda \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\lambda \Rightarrow d \Rightarrow a_0$$

Potom již můžeme vyjádřit Avogadrovu konstantu jako

$$N_A = m \frac{V}{a_0^3} = m \frac{M}{\rho a_0^3}$$

V – molární objem prvku

M – molární hmotnost prvku

ρ – hustota prvku

a_0 – hrana krychle elementární buňky

m – počet atomů v elementární buňce

Příklad pro hliník

Avogadrovu konstanta

$$N_A = m \frac{M}{\rho a_0^3}$$

$M_{Al} = 0,027 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ – molární hmotnost hliníku

$\rho_{Al} = 2700 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ – hustota hliníku

$a_0 = 4,05 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ – hrana krychle elementární buňky

$m = 4$ – počet atomů v elementární buňce

$$N_A \approx 6,021 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \quad , \quad m_{Al} = \frac{M_{Al}}{N_A} \approx 4,48 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

Je počet molekul v jednom molu velký ?

Feynmanův příklad: V jednom z dávných dnů, řekněme v paleolitu, kapka odpoledního deště dopadla na měkkou rovnou zem a zanechala na ní svou stopu. Čas ubíhal a nedávno na tuto stopu narazil žízní a horkem unavený student – geolog. Odpočíval, napil se ze své polní láhve a poněvadž neměl nic na práci, přemýšlel, kolik molekul z oné dávné kapky asi právě vypil.

Předpokládejme: 1) Za tak dlouhou dobu se molekuly kapky mohly rozptýlit zcela rovnoměrně do všech vod a 2) množství vod na pevnině je malé ve srovnání s množstvím vod v oceánech.

Označme objem kapky V_k , objem láhve V_l , objem oceánů V_o . Molární hmotnost vody označme M , přibližnou hodnotu hustoty vody ρ .

Řešení příkladu

Počet molekul v láhvi je $\frac{\rho}{M} V_l N_A$.

Z toho je potřeba vzít jen díl $\frac{V_k}{V_o}$.

$M=18 \text{ g.mol}^{-1}$ – molární hmotnost vody

$\rho=1 \text{ g.cm}^{-3}$ – hustota vody

$N_A=6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ – Avogadrova konstanta

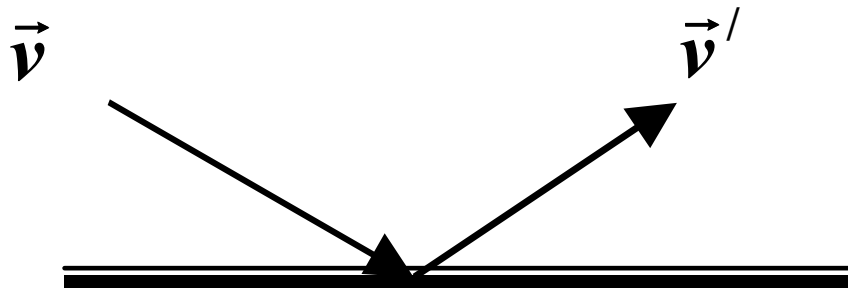
$V_o=1,37 \cdot 10^{24} \text{ cm}^3$ – voda v oceánech

$V_l=10^3 \text{ cm}^3$ – láhev, $V_k=(5 \cdot 10^{-1})^3 \text{ cm}^3$ – kapka

$$n = \frac{V_k V_l \rho}{V_o M} N_A \approx 3$$

Stavová rovnice I

N molekul plynu je uzavřeno v krychli objemu $V=L^3$. Co se děje, když molekula narazí na stěnu? Hmotnost molekuly oproti hmotnosti stěny je zanedbatelná, takže můžeme počítat jen se změnou hybnosti molekuly



$$\Delta p_z = m v_z - (-m v_z) = 2m v_z$$

Za jednu sekundu dopadne molekula na stěnu $k=v_z/(2L)$ – krát, předá tedy hybnost (jinak řečeno – podle druhého Newtonova zákona – působí silou)

$$f_z = k \Delta p_z = \frac{1}{L} m v_z^2$$

Stavová rovnice II

Součet působení všech N molekul je

$$F_z = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N m v_{(i)z}^2 \equiv \frac{N}{L} \overline{m v_z^2}$$

Při chaotickém pohybu je přirozeně

$$\overline{m v_z^2} = \overline{m v_x^2} = \overline{m v_y^2} = \frac{1}{3} \overline{m v^2}$$

Pro výsledné působení na stěnu tak máme (E je kinetická energie)

$$F_z = \frac{N}{3L} \overline{m v^2} = \frac{2N}{3L} \overline{E}$$

Z definice tlaku a teploty

$$F_z = p L^2 = \frac{1}{L} p V \quad , \quad \overline{E} = \frac{3}{2} k T$$

Stavová rovnice III

Stavová rovnice ideálního plynu je tak

$$pV = NkT$$

Rovnici van der Waalovu dostaneme uvážením jednak toho, že molekuly zaujímají nějaký objem b , zaměníme tak ve stavové rovnici

$$V \rightarrow V - b$$

a dále zmenšení tlaku u stěny, neboť na molekuly u stěny (jejich hustota je nepřímo úměrná objemu V) působí pouze molekuly „nad“ (jejich hustota je opět nepřímo úměrná objemu V), zaměníme tak ve stavové rovnici

$$p \rightarrow p + \frac{a}{V^2}$$

Van der Waalsova rovnice

Stavová rovnice ideálního plynu je

$$pV = NkT$$

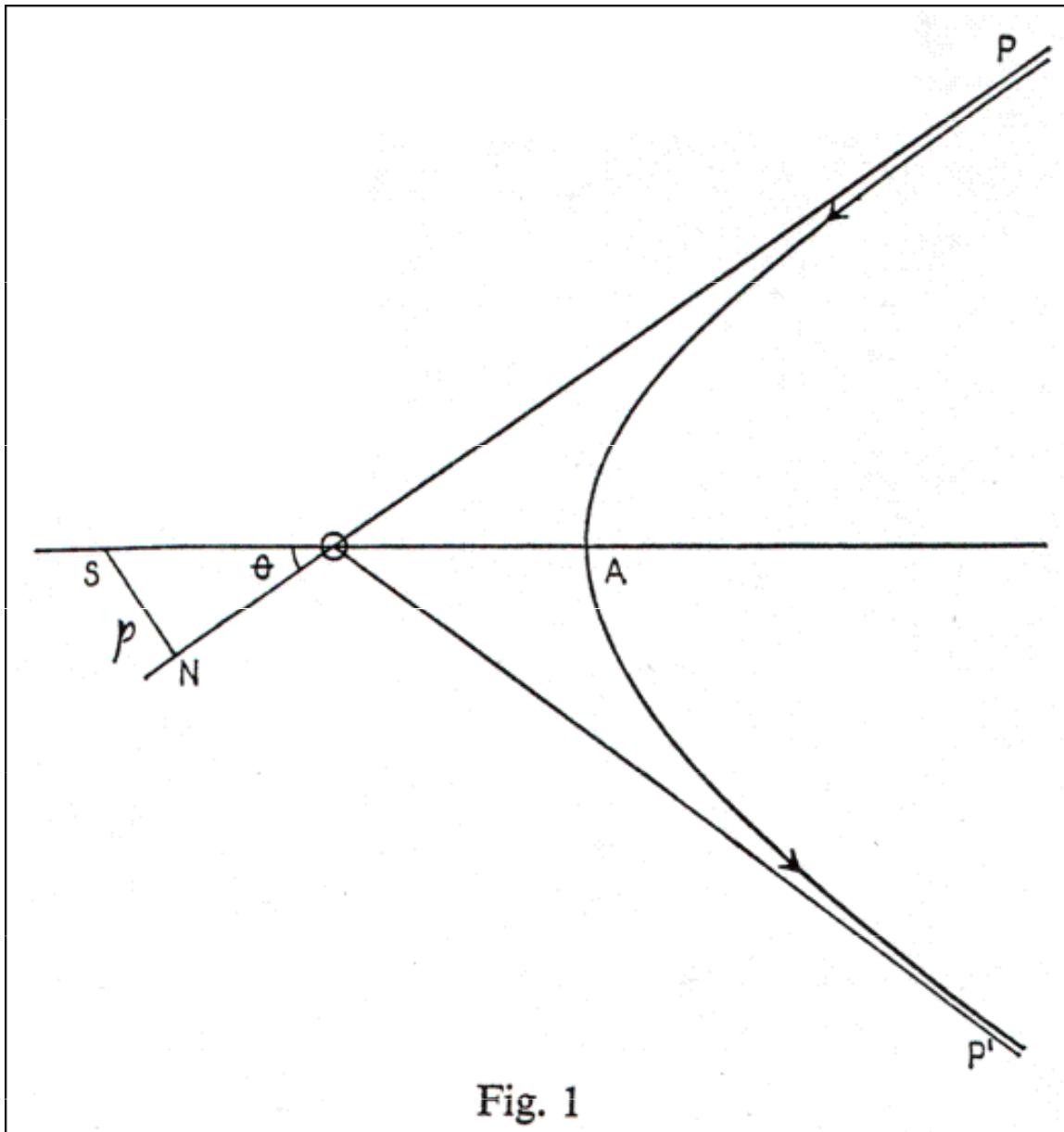
Van der Waalsova rovnice je

$$\left(p + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = NkT$$

Pro odvození byla potřeba pouze představa o molekulách a o chování hybnosti při odrazu. Dále už jen definice tlaku a teploty.

Atomy

Rutherfordův model atomu



Bodové kladně nabitě jádro, okolo elektronový oblak – ten ale málo přispívá k rozptylu nalétávajících α částic

Rutherfordův výpočet

Zákon zachování energie

$$\frac{1}{2} m u^2 = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{Z_\alpha Z_N e^2}{4\pi \epsilon_0 SA} \equiv \frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} m u^2 \frac{b}{SA}$$

Zákon zachování
momentu hybnosti

$$p u = \overline{SA} v$$

Geometrie

$$\overline{SA} = \overline{SO} + \overline{OA} = p \left(\frac{1}{\sin\theta} + \cot\theta \right)$$

Výsledek pro úhel vychýlení $\chi = \pi - 2\theta$

$$\cot \frac{\chi}{2} = \frac{2p}{b} \quad , \quad b = \frac{Z_\alpha Z_N e^2}{4\pi \epsilon_0 m u^2}$$

Základní charakteristiky atomů

Atomy jsou stabilní. V podstatě všechny atomy, které vytvářejí náš hmatatelný svět, existovaly beze změny miliardy let.

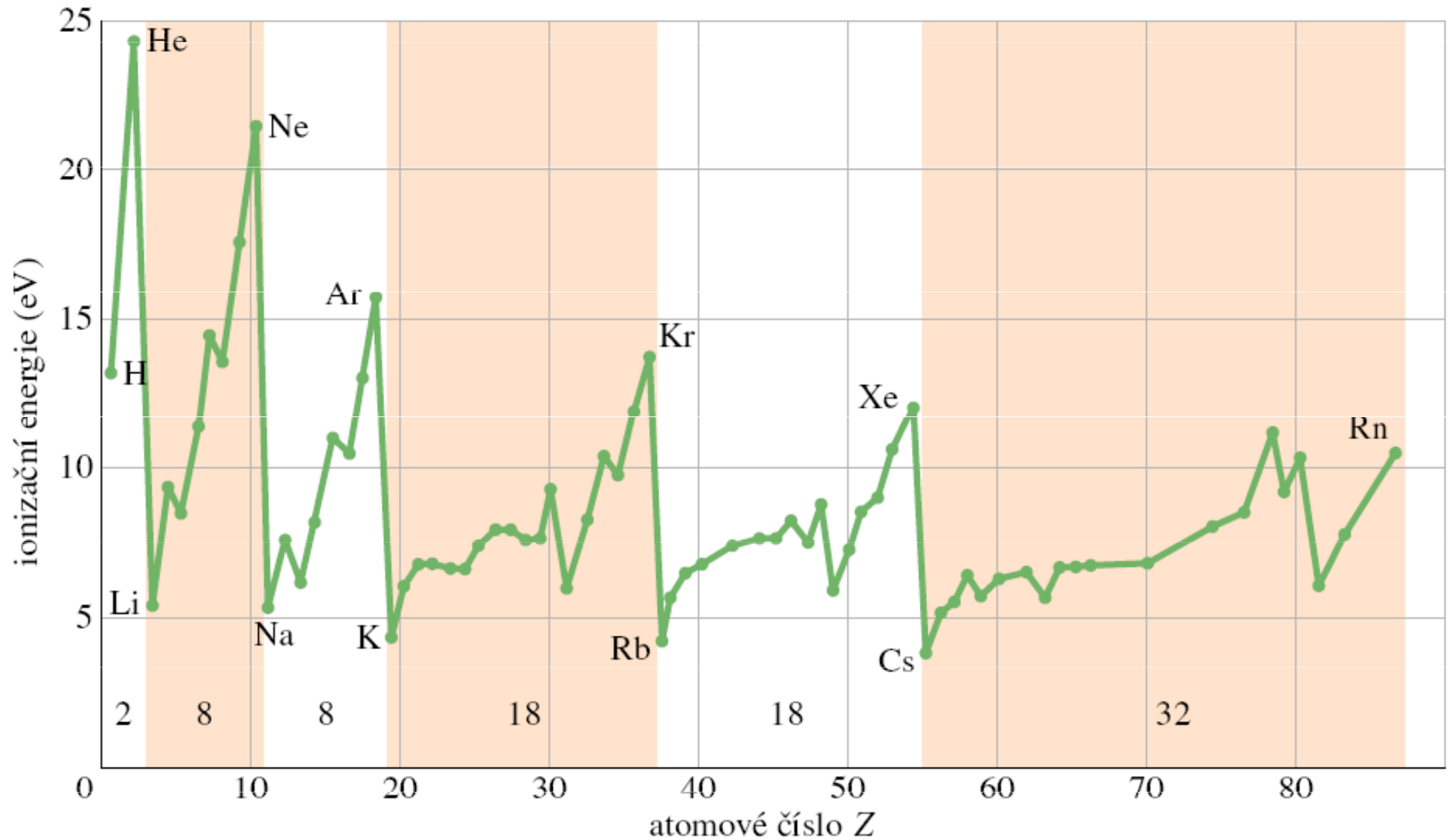
Atomy se sdružují. Atomy se slučují do stabilních molekul. Mohou se také seskupovat a vytvářet pevné látky.

Atomy lze seřadit systematicky. Prvky jsou v periodické tabulce uspořádány do šesti vodorovných period; kromě první začíná každá z period nalevo vysoce reaktivním alkalickým kovem (lithium, sodík, draslík atd.) a končí napravo chemicky inertním vzácným plynem (neon, argon, krypton atd.).

Atomy emitují a absorbují světlo. Frekvence světla f je dána tzv. Bohrovou frekvenční podmínkou.

Atomy mají moment hybnosti a vlastní magnetismus. Tyto vektorové veličiny jsou spolu svázány.

Ionizační energie prvků



Kvantová čísla

Kvantové číslo	Symbol	Dovolené hodnoty	
hlavní	n	1,2,3,....	„vzdálenost“ od jádra
orbitální	l	0,1,....,($n-1$)	$\sqrt{l(l+1)}$ velikost orbitálního momentu hybnosti
magnetické orbitální	m_l	0,±1,....,± l	z-ová složka orbitálního momentu hybnosti
magnetické spinové	m_s	±1/2	z-ová složka spinového momentu hybnosti

Pauliho vylučovací princip

Všechny stavy se stejnou hodnotou n tvoří **slupku**. Ve slupce je $2n^2$ stavů. Všechny stavy se stejnou hodnotou n a l tvoří **podslupku**. Všechny stavy v jedné podslupce mají stejnou energii. V podslupce je $2 \cdot (2l+1)$ stavů. K označení podslupek často nahrazujeme hodnoty l písmeny. Tedy místo $l=0,1,2,3,\dots$ máme s, p, d, f, ...

Pauliho vylučovací princip říká, že žádné dva elektrony v atomu

nemohou mít stejné čtyři hodnoty kvantových čísel n , l , m_l a m_s . Jinak řečeno: kvantová čísla každé dvojice elektronů v atomu se musí lišit aspoň v jednom kvantovém čísle. Pokud by to tak nebylo, atom by zkolaboval, a nemohli bychom existovat ani my, ani svět, jak jej známe.

Spin

Elektron, ať uvězněný v atomu nebo volný, má svůj vnitřní spinový moment hybnosti \mathbf{S}^* , často nazývaný jednoduše spin.

Velikost \mathbf{S} je kvantována a závisí na spinovém kvantovém čísle s , které je pro elektrony rovno $\frac{1}{2}$ (a stejně tak pro protony a neutrony). Navíc i složka spinu měřená podél libovolně zvolené osy je kvantována a závisí na hodnotě kvantového spinového magnetického čísla m_s , která může být pouze $\pm\frac{1}{2}$. Slovo *vnitřní* zde znamená, že spinové kvantové číslo s je základní charakteristika elektronu, stejně jako jeho hmotnost m a elektrický náboj e .

**) Tučně zde značíme vektorovou veličinu.*

Orbitální a spinový moment elektronu

Velikosti momentů

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad , \quad S = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

Průměty momentů do osy z

$$L_z = m_l \hbar \quad , \quad S_z = m_s \hbar$$

Průměty magnetických momentů do osy z

$$\mu_z^{(orb)} = -m_l \mu_B \quad , \quad \mu_z^{(spin)} = -2m_s \mu_B$$

Bohrův magneton

$$\mu_B = \frac{|e| \hbar}{2m} = 927,400915(23) \cdot 10^{-26} \text{ J T}^{-1}$$

Magnetický moment protonu

Jaderný magneton

$$\mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_p} = 5,050\,783\,24(13) \cdot 10^{-27} \text{ J T}^{-1}$$

Magnetický moment protonu

$$\mu_p = 1,410\,606\,662(37) \cdot 10^{-26} \text{ J T}^{-1}$$

Poměr momentu protonu k jadernému magnetonu

$$\frac{\mu_p}{\mu_N} = 2,792\,847\,356(23)$$

Periodická soustava prvků

Nepřechodné prvky

1 18

1 H 2 He

2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

Li Be B C N O F Ne

11 12 13 14 15 16 17 18

Na Mg Al Si P S Cl Ar

3 4 5 6 7 8 9 10 11 12

19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36

K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr

37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54

Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe

55 56 57-71 72 73 74 75 76 77 78 79 80 81 82 83 84 85 86

Cs Ba * Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn

87 88 89-103 104 105 106 107 108 109 110 111 112 113 114 115 116

Fr Ra † Rf Db Sg Bh Hs Mt Ds Rg

Přechodné prvky (kovy)

kovy
 polokovy (metaloidy)
 nekovy

Vnitřně přechodné prvky (kovy)

Lanthan a lanthanoidy *

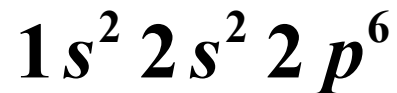
57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu

Aktinoidy †

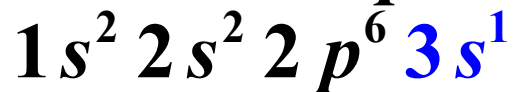
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Příklady prvků

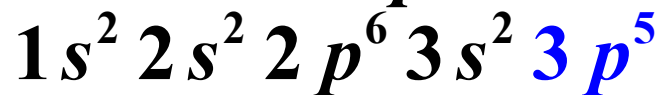
Ne



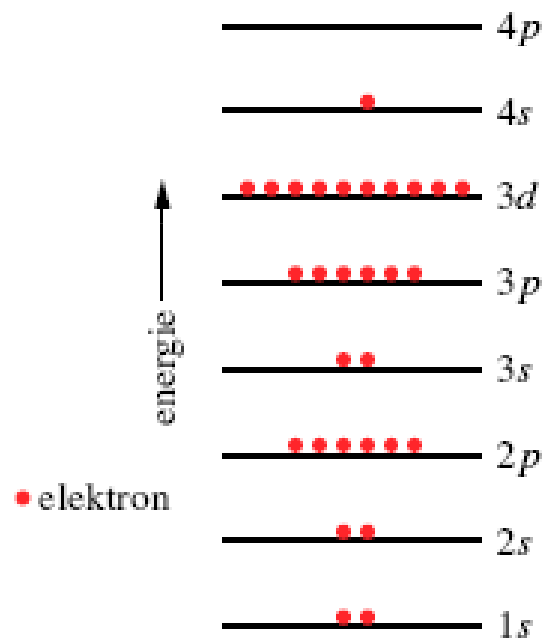
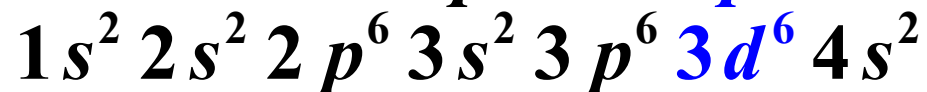
Na



Cl



Fe



Cu – 29 elektronů

Zmínky o kvantové teorii

Relace neurčitosti

Čtverec střední kvadratické odchylky je definován jako

$$\Delta_u^2 = \sum_i \left[u_i^2 - \left(\sum_j u_j \right)^2 \right] \equiv \overline{u^2} - (\overline{u})^2$$

Uvažujme měření polohy a hybnosti částice, potom

$$\Delta_x^2 = \overline{x^2} - (\overline{x})^2, \quad \Delta_p^2 = \overline{p^2} - (\overline{p})^2$$

Relace neurčitosti říkají, že

$$\Delta_x \Delta_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Částicové a vlnové charakteristiky

Hybnost a energie částice

$$p, E$$

Vlnočet a úhlová frekvence vlny

$$k = \frac{1}{\hat{\lambda}} \equiv \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega$$

De Broglie: existuje korespondence

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega$$

Částici lokalizované v oblasti lineárních rozměrů L odpovídá superposice vln s vlnovou délkou v okolí

$$\hat{\lambda} \approx L$$

Stavy s minimální energií

Ve stavu s minimální energií bude

$$\overline{p^2} \approx \Delta_p^2 \approx \frac{\hbar^2}{L^2}$$

Pro celkovou energii E_0 (je součtem kinetické energie T a potenciální energie U) stavu s minimální energií bude tedy

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2} + U(L)$$

Nutná podmínka minima je pak

$$\frac{\partial E_0}{\partial L} = 0$$

Atom vodíku

Potenciální energie je dána coulombovskou interakcí elektronu a protonu

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 L}$$

$$\frac{\partial E_0}{\partial L} = 0 \Rightarrow L = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = a_B = 0,0529 \text{ nm}$$

Dosazením $L=a_B$ do výrazu pro energii E_0 dostáváme

$$E_0 \approx -\frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 = -13,6 \text{ eV}$$

Souhlas odhadnutých výrazů pro Bohrov poloměr a energii základního stavu atomu vodíku s přesnými hodnotami je vzácnou náhodou, stačil by nám jen souhlas řádový.

Harmonický oscilátor

Potenciální energie je dána předpokladem o lineární závislosti síly působící na oscilátor na výchylce z rovnovážné polohy

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 L^2$$

$$\frac{\partial E_0}{\partial L} = 0 \Rightarrow L = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2}$$

Dosazením za L do výrazu pro energii E_0 dostáváme

$$E_0 \approx \hbar\omega$$

Přesně počítaná energie základního stavu harmonického oscilátoru je

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Vyšší energiové hladiny

Jsou-li lineární rozměry oblasti, ve které je lokalizován kvantový systém násobkem vlnové délky, je energie takového stavu vyšší (v klasické fyzice třeba struna kmitající na harmonických frekvencích)

$$L \approx n \lambda$$

Potom dostáváme stejným postupem jako pro energii základního stavu pro hladiny energie elektronu v atomu vodíku a pro hladiny energie harmonického oscilátoru (tam uvádíme i exaktní výraz)

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar} \right)^2$$

$$E_n = n \hbar \omega \quad E_n = \left(n - \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Kvantové číslo $n=1$ odpovídá základnímu stavu, čísla $n=2,3,\dots,\infty$ odpovídají vyšším hladinám energie.