

Mosleyho zákon

- 1895 ... Röntgen experimentoval s katódovým žiarením
- pri vysokom napätí vzniká medzi anódou a katódou veľmi prenikavé žiarenie (rtg) a anóda je silne poškodená

Rozlišujeme: • spojité rtg žiarenie (Bremsstrahlung - brzdné žiarenie)

- vzniká brzdením urýchlených e^- vylietavajúcich z katódy k anóde,
- vzniká od určitého napätia,
- $E_k = hf$... zmena E_k elektrónom pri brzdení = energii vyžiareného fotónu
- $eU_B = \frac{hc}{\lambda} \rightarrow \lambda_{min} = \frac{hc}{eU_B}$
- nezávisí na materiáli,

• charakteristické rtg žiarenie

- vzniká excitáciou e^- vo vnútorných slupkách atómu, kde je diera po vyemitovanom e^- zaplnená e^- z vyššej slupky za vzniku rtg fotónu,
- závisí na materiáli,
- popísané Mosleyho zákonom

$$E_n = -R_y \frac{(Z-k)^2}{n^2}$$

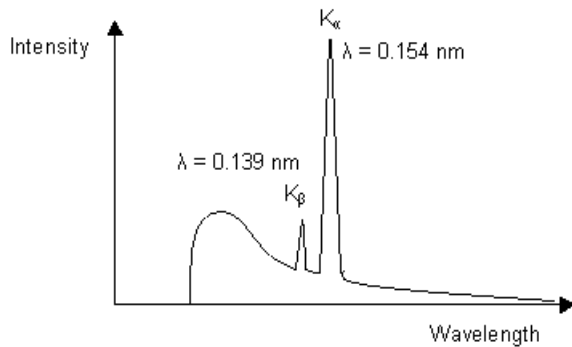
... ionizačná energia e^- v n -tej slupke

k ... tieniaca konštanta (ostatné e^- tienia elektrostatické pôsobenie jadra)

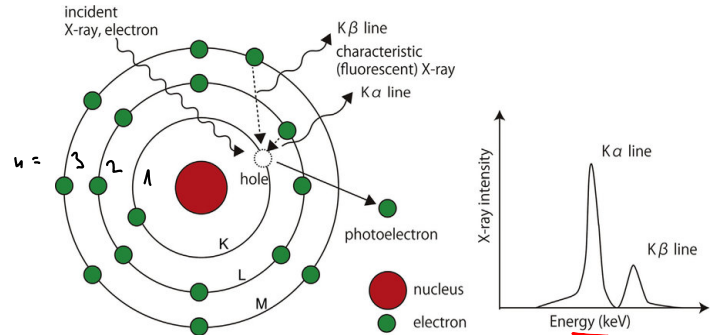
pre čiaru $K_\alpha \dots k=1$

Z ... # p^+ v jadre

Spektrum Cu rentgenky



<https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/xray-diffraction/production.php>



<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1882761614000258?via%3Dihub>

23. Spočítajte frekvenciu, energiu a vlnovú dĺžku spektrálnej čary K_α pro

- (a) Ca ($Z = 20$), $R_y = 13,6 \text{ eV} = 2,179 \cdot 10^{-18} \text{ J}$

- (b) Cd ($Z = 48$).

$k=1$

$$1 - \frac{1}{4} = \frac{3}{4}$$

$$hf = |E_{n_f} - E_{n_i}| = \left| -R_y \frac{(Z-k)^2}{n_f^2} - \left(-R_y \frac{(Z-k)^2}{n_i^2} \right) \right| = R_y (Z-1)^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

a) $Z=20$

$$hf = R_y (20-1)^2 \frac{3}{4} = 13,6 \cdot 19^2 \cdot \frac{3}{4} = 3682 \text{ eV} = 3,7 \text{ keV} = 5,899 \cdot 10^{-16} \text{ J}$$

$10 \text{ \AA} = 1 \text{ nm}$

$$f = \frac{5,899 \cdot 10^{-16}}{6,63 \cdot 10^{-34}} = 8,9 \cdot 10^{17} \text{ Hz}$$

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{3 \cdot 10^8}{8,9 \cdot 10^{17}} = 3,37 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 3,37 \text{ \AA}$$

$$b) \underline{Z = 48}$$

$$hf = 13,6 \cdot 47^2 \cdot \frac{3}{4} = 22532 \text{ eV} = \underline{23 \text{ keV}} = 3,61 \cdot 10^{-15} \text{ J}$$

$$f = \underline{5,45 \cdot 10^{18} \text{ Hz}}$$

$$\lambda = \frac{c}{f} = 5,5 \cdot 10^{-11} \text{ m} = \underline{0,55 \text{ \AA}}$$

Stav elektrónu v atóme

- pri pohybe častice v centrálnom poli sa zachováva moment hybnosti častice

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \text{↳ napr. } e^- \text{ v poli jadra}$$

- kvantový stav je charakterizovaný 4 kvantovými číslami:

- hlavné kvantové číslo ... určuje energiu E

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

- vedľajšie kvantové číslo ... určuje veľkosť momentu hybnosti $|\vec{L}|$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

- magnetické kvantové číslo ... určuje priemet momentu hybnosti do daného smeru L_z

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

- spinové číslo

$$s = \pm 1/2 \quad (\text{pre } e^-)$$

$$\begin{aligned} |\vec{L}| &= \hbar \sqrt{l(l+1)} \\ L_z &= \hbar m \end{aligned}$$

20. Uvažte atom vodíku ve stavu $n = 4$.

(a) Jaká je maximální velikost orbitálního momentu L jeho elektronu?

(b) Jaká je maximální hodnota velikosti z -složky orbitálního momentu L_z jeho elektronu?

(c) Jaký je minimální úhel mezi \vec{L} a osou z ?

a) $|\vec{L}| = ?$ $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)} = \hbar \sqrt{3(3+1)} = \hbar \sqrt{12} = 1,055 \cdot 10^{-34} \cdot \sqrt{12} = 3,653 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

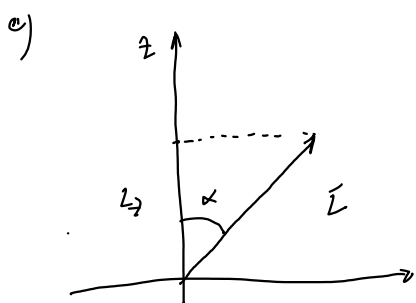
$l_{\max} = 3$

b) $L_z = ?$

$$L_z = m\hbar = \hbar \cdot 3 = 3,164 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

$m_{\max} = 3$

$$\cos \alpha = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{3\hbar}{\sqrt{12}\hbar} = \frac{3}{2\sqrt{3}} = \frac{3\sqrt{3}}{2 \cdot 3} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$



$$\alpha = \arccos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = 30^\circ$$

Aplikácia Schrödingerovej rovnice - 1D kvantová jama

1D nestacionárna Schrödingerova rovnica

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t)$$

$V(x)$... vonkajší potenciál

$\Psi(x,t)$... vlnová funkcia

- pohybová rovnica kvantovej mechaniky
- popisuje, čo sa deje s mikroobjektom, ak naň pôsobí okolie
- stav mikroobjektu daný vlnovou funkciou

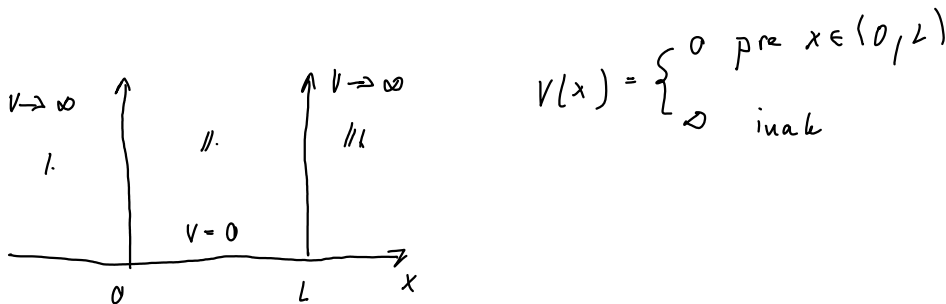
$$\begin{aligned} \nabla^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t) \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

1D stacionárna Schrödingerova rovnica

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x)$$

E ... energia



• pre oblasti I. a III.: $\Psi_I(x) = \Psi_{III}(x) = 0$

• pre oblasť II.: $V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II}(x) \dots \text{homogénna diferenciálna rovnica 2. rádu}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_{II}(x) - E \Psi_{II}(x) = 0$$

⌈ odbočka: Riešenie pomocou charakteristickej rovnice

$$a \frac{d^2 y}{dx^2} + b \frac{dy}{dx} + c y = 0$$

charakteristická rovnica: $ad^2 + bd + c = 0$

$d_{1,2}$... použijeme v riešení DR

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_{II}(x) - E \Psi_{II}(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - E = 0$$

$$\psi'' + \frac{2Em}{\hbar^2} = 0$$

$$; \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$$

$$\psi_{1,2} = \pm \sqrt{-k^2} = \pm ik$$

\uparrow
 \Rightarrow
 $F1 = i$

$$\psi_{II}(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} = \underbrace{A \cos(kx) + B \sin(kx)}_{e^{iax} = \cos bx + i \sin kx}$$

$$\begin{cases} A = c_1 + c_2 \\ B = i(c_1 - c_2) \end{cases} \text{ neznáme - zistíme z okrajových a normovacej podmienky}$$

okrajové podmienky: • v $x=0$: $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0)$

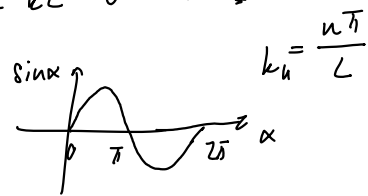
$$0 = A \underbrace{\cos k \cdot 0}_1 + B \underbrace{\sin k \cdot 0}_0$$

$$\underline{0 = A}$$

(Vlnová f-cia musí byť spojitá a hladká)

• v $x=L$: $\psi_{II}(x=L) = \psi_{II}(x=L)$

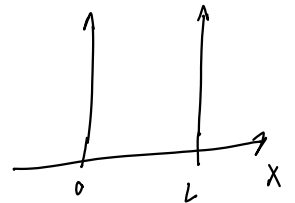
$$0 = B \sin kL. \Leftrightarrow \sin kL = 0 \Leftrightarrow kL = n\pi; n=1,2,\dots$$



$$k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$\underline{\psi_{II}(x) = B \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)}$$

hustota pravdepodobnosti v mieste x $|\psi_{II}(x)|^2$



$$\boxed{1 = \int_0^L |\psi_{II}(x)|^2 dx} \text{ normovacia podmienka}$$

$$1 = \int_0^L B^2 \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx = B^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx \rightarrow \frac{1}{B^2} = \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx$$

$$\rightarrow \boxed{B = \sqrt{\frac{2}{L}}} \text{ norma}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x & \text{pro } x \in (0, L) \\ 0 & \text{inak} \end{cases}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = E \psi_n(x)$$

↓ dosadíme

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \beta \sin \frac{n\pi}{L} x = E \beta \sin \frac{n\pi}{L} x$$

$$\frac{d}{dx} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{n\pi}{L} \cos \frac{n\pi}{L} x \right] = E \sin \frac{n\pi}{L} x$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{L^2} \sin \frac{n\pi}{L} x = E \sin \frac{n\pi}{L} x$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

$$3D \quad E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

21. Najděte nejnižší energetickou hladinu částic:

- (a) elektronu $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg v nekonečně hluboké kvantové jámě o šířce $5 \cdot 10^{-10}$ m (\approx rozměr atomu),
 (b) protonu $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$ kg v nekonečně hluboké kvantové jámě o šířce $1,1 \cdot 10^{-14}$ m (průměr jádra střední velikosti).

Výsledky dávají řádový odhad energií elektronů na elektronových slupkách a nukleárních částic vázaných v jádře.

$$n=1$$

$$a) m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$L = 5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \cdot (5 \cdot 10^{-10})^2} = 2,41 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1,5 \text{ eV}$$

$$b) m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$L = 1,1 \cdot 10^{-14} \text{ m}$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_p L^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot (1,1 \cdot 10^{-14})^2} = 2,71 \cdot 10^{-13} \text{ J} = \underline{\underline{1,71 \text{ MeV}}}$$

