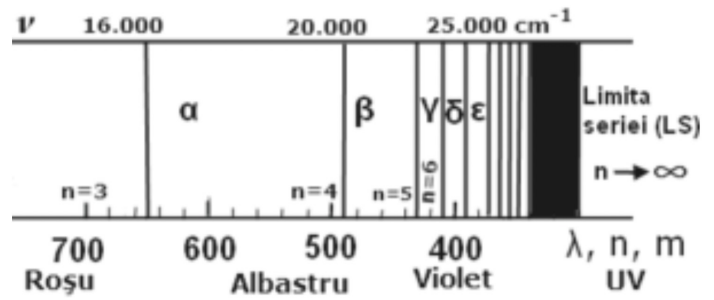


Modelul atomului de H a lui Bohr

spectrul atomului de H

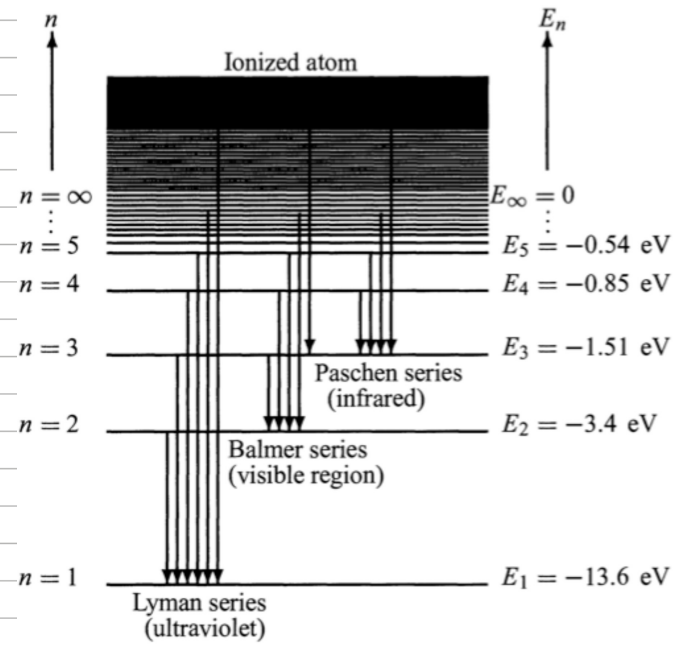


Postulatele lui Bohr

P_I. Atomul este format dintr-un nucleu cu sarcina pozitivă în jurul căruia electronii orbitează pe traiectorii circulare discrete (nu continuu)

P_{II} Pe o anumită orbită momentul cinetic este cuantificat

$$L = n \cdot h \quad \left(\hbar = \frac{h}{2\pi} \right)$$



Energia ↑

P_{III}. La trecerea unui electron de pe o orbită pe alta, se absoarbe sau se emite un foton a.î.

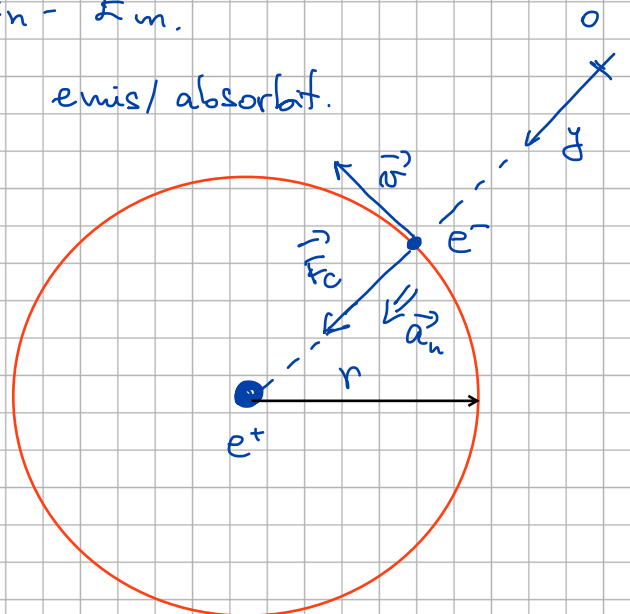
$$h\nu_{mn} = h \cdot \omega_{mn} = E_n - E_m$$

↑ frecvența fotonului emis/absorbit.

Miscarea e^- este o mișcare circulară uniformă.

$$\vec{F}_c = m_e \cdot \vec{a}_n$$

$$F_c = m_e \cdot a_n$$



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

$$a_n = \frac{v^2}{r}$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = r \cdot p = m_e \cdot r \cdot v = n\hbar \Rightarrow v = \frac{n\hbar}{m_e \cdot r}$$

$$a_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2 r^3}$$

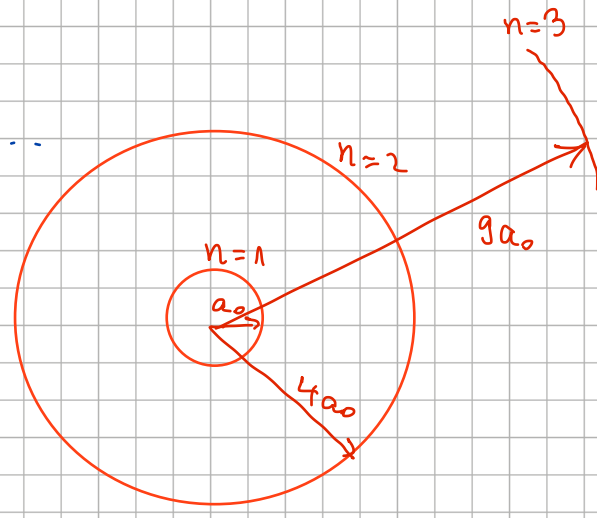
$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e \cdot n^2 \cdot \hbar^2}{m_e^2 \cdot r^3} \Rightarrow r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \cdot n^2 \hbar^2}{m_e \cdot e^2}$$

$$r_n = \left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e \cdot e^2} \right) \cdot n^2$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 5.3 \text{ nm}$$

$$r_n = a_0 \cdot n^2$$

n = 1, 2, 3, ...



$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e \cdot r_n} = \frac{n\hbar \cdot m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \cdot m_e} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$v_n = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right) \cdot \frac{1}{n}$$

n = 1, 2, 3, ...

Energia atomului:

$$E = E_c + E_p$$

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2$$

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

↑ energie de legatură

$$E_n = \frac{1}{2} m_e v_n^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n}$$

$$E_n = \frac{m_e \cdot e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} - \frac{m_e \cdot e^4}{16 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$E_c = -\frac{1}{2} E_p$$

$$E_n = -\frac{1}{2} E_p$$

$$E_n = -\frac{m_e \cdot e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

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

$$E_n = -\frac{R}{n^2}$$

$n=1, 2, \dots$

$R =$ constanta Rydberg

$$R = 13,6 \text{ eV} \quad (1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J})$$

$n =$ număr cuantic principal (cuantificarea energiei)

La trecerea de pe o orbita pe alta

$$h\nu = E_n - E_m = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

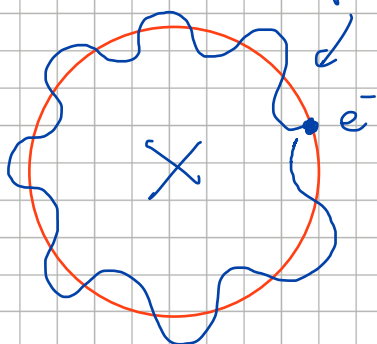
sp. Lyman: $h\nu_L = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right); n \geq 2$

Balmer: $h\nu_B = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right); n \geq 3$

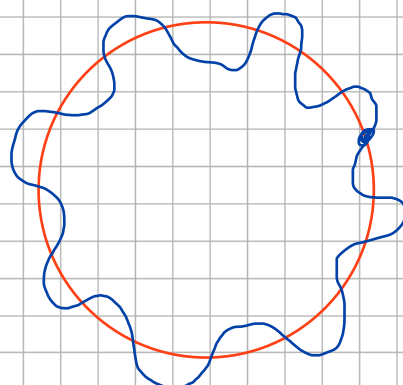
Paschen: $h\nu_P = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right); n \geq 4$

orbita nepermisi

P_{II} :



orbita permisi

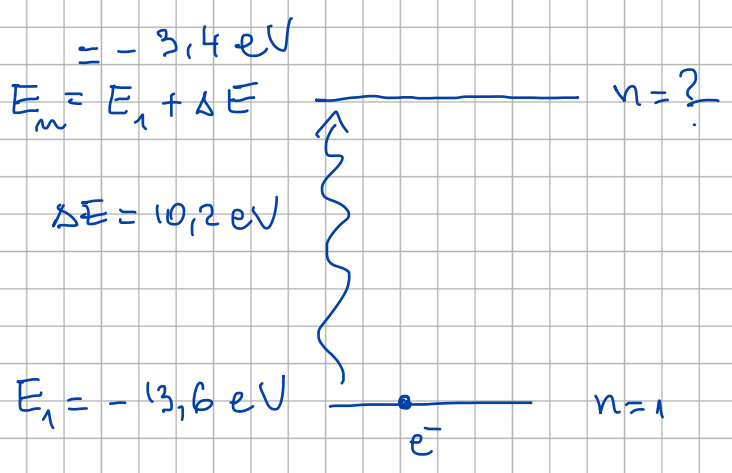


Ex: 1) **1.7.9** De câte ori se mărește raza atomului de hidrogen aflat în stare fundamentală, dacă este excitat cu un foton cu energia egală cu $\Delta E = 10,2 \text{ eV}$?

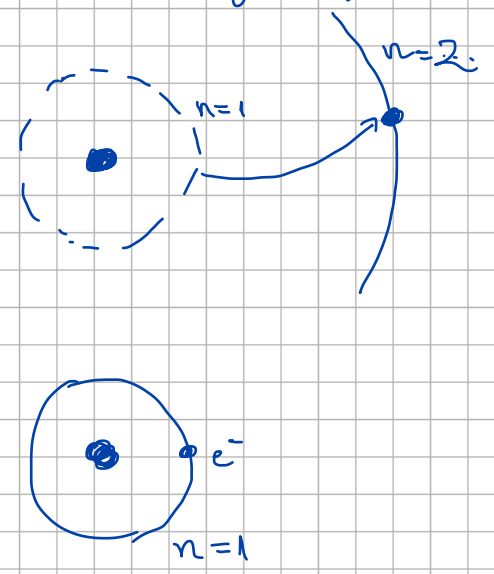
2) **1.7.10** Care este cea mai mare valoare a lungimii de undă din seria spectrală Lyman a hidrogenului.

P1

Spațiul energiei



Spațiul configurațiilor



$$\begin{cases} E_1 = -\frac{R}{1} ; \\ E_n = E_1 + \Delta E = -\frac{R}{n^2} \end{cases}$$

$$\frac{E_1}{E_1 + \Delta E} = n^2$$

$$n = \sqrt{\frac{E_1}{E_1 + \Delta E}}$$

$$n = \sqrt{\frac{-13,6}{-13,6 + 10,2}} = \sqrt{\frac{13,6}{3,4}} = \sqrt{4} = 2.$$

$$r_1 = a_0 = 5,3 \text{ nm}$$

$$r_n = a_0 \cdot n^2 \Rightarrow \frac{r_2}{r_1} = 2^2 = 4$$

\Rightarrow raza atomului se mărește de 4 ori.

P21: $\lambda = \frac{c}{\nu}$

c - viteza luminii

$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$

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

$\nu = \frac{c}{\lambda}$

$\frac{h \cdot c}{\lambda_n} = R \left(1 - \frac{1}{n^2} \right)$

$n = 2, 3, 4, \dots$

λ este maxim $\Rightarrow n = 2$

$R = 13,6 \text{ eV}$

$h = 6,34 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$

$\frac{hc}{\lambda_2} = R \left(1 - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3R}{4}$

$\lambda_2 = \frac{4 \cdot hc}{3R}$

= valoarea maximă a lungimii de undă în seria Lyman

$\frac{hc}{\lambda_3} = R \left(1 - \frac{1}{9} \right) = \frac{8R}{9} \Rightarrow \lambda_3 = \frac{9hc}{8R}$

$\frac{4}{3} \approx 1,33 \dots$

$\frac{4}{3} > \frac{9}{8}$

$\lambda_2 > \lambda_3$

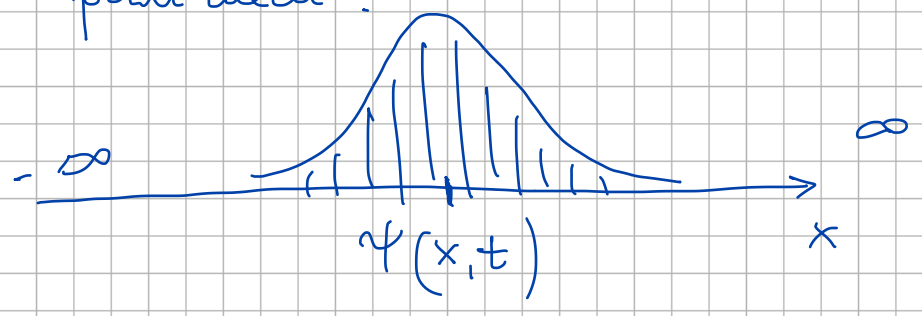
$\frac{9}{8} \approx 1,1 \dots$

Pachetul de unde

- o suprapunere de unde plane care permite localizarea în spațiu a particulei.

- reprezintă o funcție de undă $\Psi(x,t)$ care permite localizarea particulei.

Considerăm propagarea unei particule pe axa Ox



Funcția $\Psi(x,t)$ se construiește folosind transform. Fourier.

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \cdot e^{i(kx - \omega t)} \cdot dk$$

$\phi(k)$ - amplitudinea pachetului de unde.

$t=0$: $k = p/\hbar$

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk$$

↗ transformă Fourier a lui $\phi(k)$

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x) \cdot e^{-ikx} dx$$

↖ transform. Fourier inversă.

Demonstrăm:

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi(k) e^{ikx} dk$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi_0(x) \cdot e^{-ik'x} dx = \frac{1}{2\pi} \int dx \cdot \int dk \cdot e^{-ik'x} \cdot e^{ikx} \cdot \phi(k)$$

$$\int dx e^{-i(k'-k)x} = 2\pi \delta(k-k') \leftarrow \text{fct. } \delta\text{-Dirac}$$

$$= \begin{cases} \infty; & k=k' \\ 0; & k \neq k' \end{cases}$$

$$= \int dk \delta(k-k') \cdot \phi(k) = \phi(k')$$

$$\phi(k') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi_0(x) e^{-ik'x} dx$$

$|\psi_0(x)|^2$ - reprezintă o mărime pozitivă care poate fi asociată cu probabilitatea de a găsi particula la poziția x .

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \cdot dk' \cdot \int dx \phi(k) \phi^*(k') \cdot e^{i(k-k')x}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk dk' \phi(k) \phi^*(k') \cdot \delta(k-k')$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk |\phi(k)|^2$$

Pentru o funcție de undă normată:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} dk |\phi(k)|^2 = 1. \quad !$$

condiție de normare \leftarrow fct. de undă.

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k} \quad \Rightarrow \quad k = p/\hbar$$

$$E = \hbar \omega \quad \Rightarrow \quad \omega = E/\hbar.$$

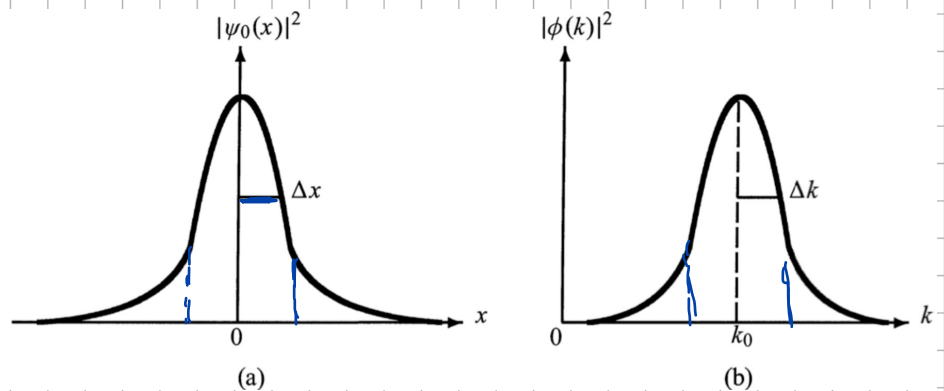
$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\Phi}(p) \cdot e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar}$$

cu set de unde la $t=0$:

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\Phi}(p) \cdot e^{ipx/\hbar}$$

→ pachet de undă care permite localizarea particulei cu probabilitatea $|\Psi_0(x)|^2$ la poziția x .

Pachetul de undă și relațiile de nedeterminare Heisenberg



Pachetul de undă gaussian (Gauss)

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} \cdot e^{ik_0 x}$$

$$\Phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2} dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\begin{cases} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha y^2} = \iint_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-\alpha(x^2+y^2)}$$

$$x^2 + y^2 = r^2$$

$$(x, y) \rightarrow (r, \theta)$$

$$\int dx dy \rightarrow \int_0^{\infty} dr \cdot r \cdot \int_0^{2\pi} d\theta$$

$$I^2 = \int_0^{\infty} dr \cdot r \cdot e^{-\alpha r^2} \cdot \underbrace{\int_0^{2\pi} d\theta}_{2\pi} = 2\pi \cdot \int_0^{\infty} dr \cdot e^{-\alpha r^2} \cdot r = -\frac{1}{2\alpha} \left(e^{-\alpha r^2} \right) \Big|_0^{\infty}$$

$$I^2 = 2\pi \cdot \frac{1}{2\alpha} = \frac{\pi}{\alpha} \Rightarrow I = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(k)|^2 dk = 1 \quad \checkmark$$

$$\left| \frac{\psi_0(\Delta x)}{\psi_0(0)} \right|^2 = e^{-1/2} \Rightarrow e^{-\frac{(\Delta x)^2}{a^2}} = e^{-\frac{1}{4}} \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta x}{a^2} = \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta x = \frac{a}{2}$$

$$\left| \frac{\phi(\Delta k)}{\phi(k_0)} \right|^2 = e^{-1/2} \Rightarrow \frac{a^2 \Delta k^2}{4} = \frac{1}{4} \Rightarrow \Delta k = \frac{1}{a}$$

Δx - nedeterminarea în poziție

Δk - nedeterminarea în impuls (vect. undă)

$$\Delta x \cdot \Delta k = \frac{a}{2} \cdot \frac{1}{a} = \frac{1}{2}$$

$$\Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar} \Rightarrow$$

$$\Delta p = \hbar \cdot \Delta k$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

Rel. de nedet. Heisenberg are valoarea minimă ptr pachetul de unde Gaussian.

Fcti de undă:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-x^2/a^2} \cdot e^{ik_0 x}$$

$$|\psi_0(x)|^2 = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-2x^2/a^2}$$

$$\underbrace{\left(e^{ik_0 x} \cdot e^{-ik_0 x} \right)}_1$$

$$\psi_0(x) \cdot \psi_0^*(x)$$

$$a = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \Rightarrow \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{2}} = 1$$

$$|\psi_0(x)|^2 = e^{-2x^2 \cdot \frac{\pi}{2}} = e^{-\pi x^2} \quad \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi x^2} dx} = \sqrt{\frac{1}{\pi}} = 1$$

Probabilitatea de a găsi particule la poziția x

este $P(x) = |\psi_0(x)|^2 = e^{-\pi x^2}$

$$\lim_{\substack{x \rightarrow \infty \\ x \rightarrow -\infty}} P(x) = 0$$

$$\int P(x) dx = 1$$

