

Atommodeller

Materiens minsta beståndsdelar har alltid fascinerat människan, och flera mer eller mindre fantasirika förklaringsmodeller har arbetats fram utan direkt koppling till experimentell bekräftelse. Det var först i och med den moderna kemins framväxt under sjuttonhundratalet som behovet av en verifierad atommodell tog fart. Under 1800-talets andra hälft ansåg fysiken grundstrukturen färdigforskad och endast putsning och vidare förfining återstod. Ett retfullt litet oförklarat fenomen återstod dock, nämligen det att gasformiga ämnen vid upphettning inte strålade på samma sätt som en upphettad metallmassa exempelvis. I fallet med metallen strålade i princip alla våglängder ut bara man upphettade tillräckligt mycket. Detta kommer att förklaras senare i lektionen om bandmodellen.

Gaser däremot strålade bara ut i vissa väldefinierade våglängder. De hade så kallade linjespektra. Gasformigt natrium strålade i princip bara ut brandgult ljus vid 589 till 590 nm våglängd och till detta hade man ingen bra förklaring.

Bohr's modell för väteatomen

Första steget mot en lösning kom med de Broglie's försök där han med ett diffraktionsexperiment kunde visa att en partikels rörelsemängd ($p = mv$) kunde knytas till en våglängd som experimentellt kunde verifieras med olika interferens och diffraktionsexperiment. Sambandet mellan p och denna våglängd, λ , kan skrivas

$$(1) \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{där } h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Idén som flera diskuterade, men som sedan kom att bära dansken Bohr's namn var att elektronerna i sina banor runt atomen bara kunde befinna sig i banor som motsvarade ett heltal våglängder, dvs elektronvågen skulle interferera konstruktivt med sig själv efter ett helt varv. Detta går att uttrycka mycket enkel matematiskt

$$(2) \quad \text{Omkretsen} = 2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{p} = \frac{nh}{mv} \Rightarrow v = \frac{nh}{2\pi nr}$$

I detta är n ett heltal och kommer sedermera att kallas huvudkvanttal. Hastigheten kan alltså bara anta vissa speciella värden. Man kallar det att den är kvantiserad.

Men samtidigt kan ju energin uttryckas med hjälp av potentiell energi och kinetisk, där den senare kan skrivas som $p^2/2m$

Potentiella energin kan skrivas (jfr häftet om E-fält)

$$(3) \quad W = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Vi får också ytterligare ett villkor ur det faktum att centripetalaccelerationen ska vara lika med kärnans attraktionskraft genom massan

$$(4) \frac{mv^2}{r} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

Om vi nu eliminerar v mellan (2) och (4) får vi

$$(5) v^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 mr} = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} \Rightarrow r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m q^2}$$

Alltså är bara vissa banradier tillåtna och dessa är proportionella mot det antal våglängder som banan utgör i kvadrat.

Vi får nu den totala energin som

$$(6) E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{m}{2} \left(\frac{nh}{2\pi mr} \right)^2 - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m q^2}} = \frac{-mq^4}{8n^2 \epsilon_0^2 h^2}$$

Detta är Bohr's riktigt stora bidrag eftersom det förutsäger vilka energinivåer som är tillåtna. Att den totala energin är negativ betyder att elektronen är bunden. Ett vanligt sätt att skriva den är att uttrycka alla konstanterna som en energi, där man vanligen använder enheten 1 elektronvolt = 1 eV = $1,6 \times 10^{-19}$ J, vilket är den energi en elektron behöver för att lyftas 1 V i potential:

$$(7) E_n = -13,6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$$

Vi bör nu tänka efter vad denna formel kan beskriva, och vad den eventuellt inte kan beskriva.

Vi har förutsatt en atomkärna som ligger still och som har laddningen q. Man skulle kunna tänka sig att atomkärnan rör sig lite grann för att kompensera elektronens rörelse. Tyngdpunkten ska ju ligga still om inga yttre krafter påverkar. Dock är atomkärnan så mycket tyngre än elektronerna att denna effekt är ganska marginell. Vi bortser alltså från den.

Vidare förutsätter härledningen att det är en elektron som rör sig. Skulle man tillåta två elektroner som rör sig i separata banor skulle dessa ju repellera varandra och göra en enkel beräkning av ovanstående typ helt omöjlig. Vi får alltså hålla oss till atomer med en elektron, dvs väte-atomen (inte vätemolekylen), eller en heliumatom som är ett steg joniserad, eller en litiumatom som är två steg joniserad, osv. Detta är självklart en mycket grov inskränkning, men om den visar sig gälla för väteatomen, kanske beskrivningen åtminstone kan användas för att förstå tyngre atomer, med flera elektroner.

Styrkan med Bohr's atommodell är att den utomordentligt väl beskriver det mesta av den strålning som upphettade väteatomer ger ifrån sig, dvs väteatomens spektrum. För tyngre atomer kan man åtminstone dra lärdomar av den om den tyngre atomen har en väl separerad elektron i sitt yttersta skal, dvs en alkalimetall.

En annan kraftig nackdel med modellen är att den beskriver elektronen som punktformig i sin rörelse runt kärnan. Detta skulle ju innebära att atomen skulle vara en mycket snabbt roterande dipol, vilken enligt klassisk teori skulle ge ifrån ett snabbt oscillerande elektriskt fält dvs en elektromagnetisk våg. Energin till denna måste ju komma någonstans ifrån, och den enda tänkbara källan är elektronens energi. Atomen skulle alltså hela tiden kontinuerligt förlora energi, vilket leder till en självmotsägelse eftersom, elektronen bara kan anta vissa energivärde och alltså inte kontinuerligt förlora energi.

Nyare atommodeller

Bohr's atommodell ska dock i första hand ses som en första förklaringsmodell, som kan förutsäga numeriskt riktiga värde på våglängder i vätespektrum. Senare modeller inkluderar egentlig kvantbeskrivning av elektronbanorna vilka då beräknas med den så kallade Schrödingerekvation, vilken vi egentligen inte går igenom här. Huvuddragen är emellertid att energin dels har en finare struktur, dvs tätare liggande spektrallinjer och dels att elektronen i bundet tillstånd har en utbredning som sträcker runt hela atomen samtidigt. Detta är en konsekvens av vågegenskaper hos elektronen. Mycket enkelt uttryckt kan man säga att det inte finns någon möjlighet att uttala sig om våglängden hos en våg om vågen inte har en utsträckning på mer än en våglängd, dvs mer än en omkrets för grundtillståndet ($n=1$).

En konsekvens av detta är att inga av de egenskaper man normalt tillskriver roterande laddningar och partiklar längre gäller.

- De avger inga tidsberoende fält dvs de strålar inte, och förlorar därmed inte energi.
- Den har inget rörelsemängdsmoment (l i grundtillståndet dvs de uppvisar inga gyroeffekter)
- Det finns inget ban-plan som för planeterna

Man kan tycka (och det gjorde många när kvantmekaniken var ung) att detta är bortförklaringar, men det visar sig att förklaringsmodellen som fås ut kvantmekaniken, förutsäger många försök, experiment och faktiska tekniska konstruktioner vilket ger den värde.

Ljusalstring

Ljus alstras när en elektron faller från en nivå med högre kvanttal (energi) till en med lägre). Processen kallas emission och finns av två typer. Den vanliga som kallas spontan emission och som sker med en viss sannolikhet, a , per tidsintervall, förutsatt att det finns elektroner i en nivå över den lägsta obesatta nivån ("det ska finnas en glugg inunder")

Vi får då (N_2 = Antal atomer med elektronen i övre nivå, N_{20} = Antal elektroner i övre nivå från början, dvs då $t = 0$, samt I = intensiteten i utsänt ljus)

$$(8) \frac{dN_2}{dt} = aN_2 \Rightarrow N_2(t) = N_{20}e^{-at} \Rightarrow I = I_0e^{-at}$$

Detta förutsatt att inga nya elektroner tillför en övre nivå. Sannolikheten a beror på hur lätt elektronen kan röra sig mellan olika nivåer och varierar mycket mellan olika ämnen och nivåkombinationer. Genomsnittstiden kan ligga på allt mellan pikosekunder till minuter. Mycket långa tider leder till att materialet lyser lång tid efter det att det bestråls med ljus.

Om atomen under den osäkra väntetiden på spontan emission bestrålas med ljus som skulle absorberats om elektronen legat i den lägre nivå, sker ett märkligt fenomen. Det passerande ljuset stör atomen i sin vila inför den spontana emission, varvid elektronen ramlar ner direkt vid ljusets passage. Eftersom det passerande ljuset delvis består av ett elektriskt fält som får den fallande elektronen att svänga i takt med det kommer det alstrade ljuset att ligga i fas med det passerade, dvs den passerande ljusstrålen förstärks. Detta fenomen kallas stimulerad emission och förutsades av Albert Einstein långt innan det verifierades experimentellt. Om vi även här antar att ljusintensitetens ändring är proportionell mot antalet fallande elektroner per tidsenhet får vi

$$(9) \frac{dI}{dt} \propto \frac{dN_2}{dt} \propto bN_2I \Rightarrow \frac{dI}{dt} = BN_2I$$

Det lönar sig emellertid inte att lösa denna ekvation ännu eftersom det finns en konkurrerande process som vi måste få med i högerledet.

Om vi för enkelhets skull antar att bara två energinivåer är inblandade (den lägre = 1 och den högre = 2) kommer ju processen absorption av ljuset, dvs då elektronen lyfts ett steg, också att bli väsentlig eftersom samma ljus ansvarar för bägge processer. Om vi nu benämner antalet atomer med elektronen i den lägre nivån N_1 , kan vi skriva förändringen pga absorption som

$$(10) \frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = BN_1I \Rightarrow \frac{dI}{dt} = -BN_1I$$

Lägger vi nu ihop de bägge orsakerna till intensitetsändringar får vi

$$(11) \frac{dI}{dt} = B(N_2 - N_1)I \Rightarrow I = I_0e^{B(N_2 - N_1)t}$$

Dvs ljuset ökar, minskar eller förblir oförändrat i intensitet beroende på förhållandet mellan N_2 och N_1 . Detta utgör grunden för all laserverkan, vilket vi kommer att studera i en senare föreläsning