

Podsumowanie wykładu ze Wstępu do Fizyki IV

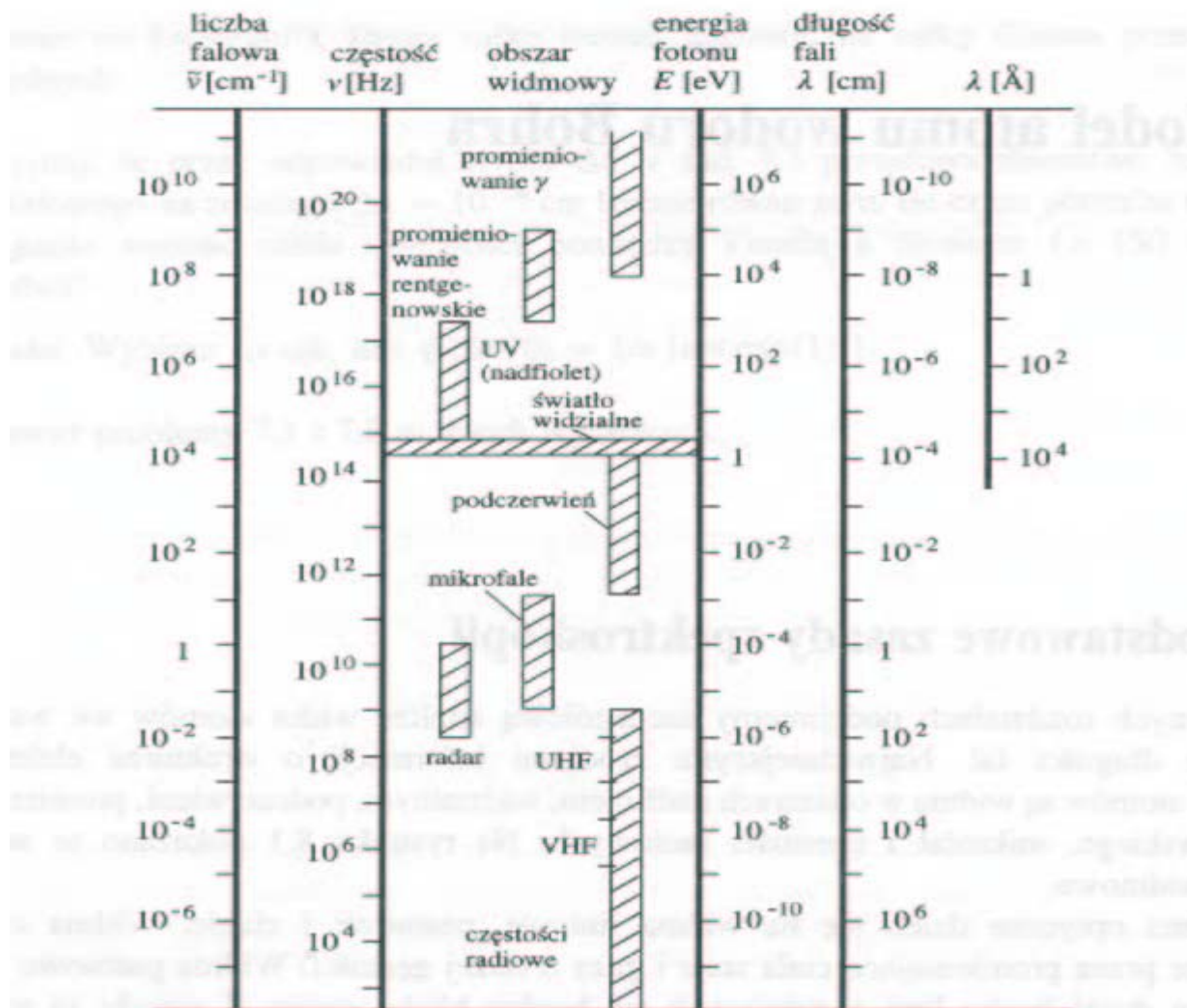
Terminy egzaminów

Egzamin pisemny odbędzie się:

**9 czerwca w SDD i SSD w godz. 9-13
Egzaminy ustne 11.06 zgodnie z
wywieszoną listą.**

Egzamin poprawkowy:

**11 września w SDD w godz. 9-13
Ustne 13.09 jw..**



Cz. I

Dualizm korpuskularno- falowy

czyli kiedy cząstki są falami

a

fale cząstkami

I.1 PRAWA PROMIENIOWANIA

I.1.1 Prawa Kirchoffa dla promieniowania (1860)

Dwie wielkości opisują emisję i absorpcję promieniowania przez ciało o temperaturze T:

Zdolność emisyjna $e(\lambda, T) d\lambda$

moc wysyłana przez jednostkę powierzchni ciała w przedziale długości fal $[\lambda, \lambda+d\lambda]$

Jednostką e jest $W/m^2\mu m$

Zdolność absorpcyjna $a(\lambda, T) d\lambda$ bezwymiarowa

jest to stosunek mocy pochłoniętej do mocy padającej:

$$a(\lambda, T) = \frac{\left(\frac{dE}{d\lambda \cdot dt \cdot dA}\right)_{\text{pochł.}}}{\left(\frac{dE}{d\lambda \cdot dt \cdot dA}\right)_{\text{padające}}}$$

Prawo Kirchhoffa

Dla wszystkich ciał zachodzi:

$$\frac{e(\lambda, T) d\lambda}{a(\lambda, T) d\lambda} = f(\lambda, T)$$



uniwersalna funkcja λ i T

**Całkowita moc emitowana
przez jednostkę powierzchni
ciała**

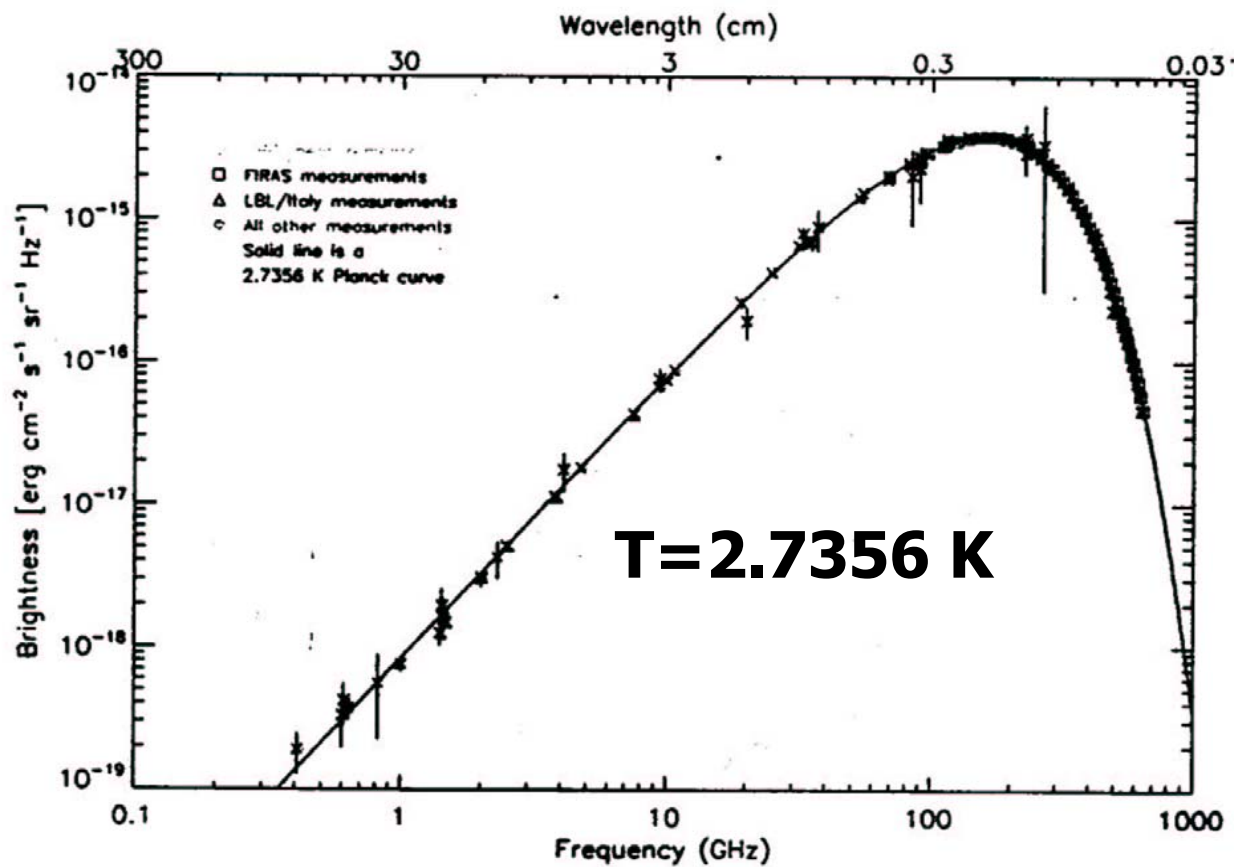
$$R(T) = \int_0^{\infty} d\lambda e(\lambda, T)$$

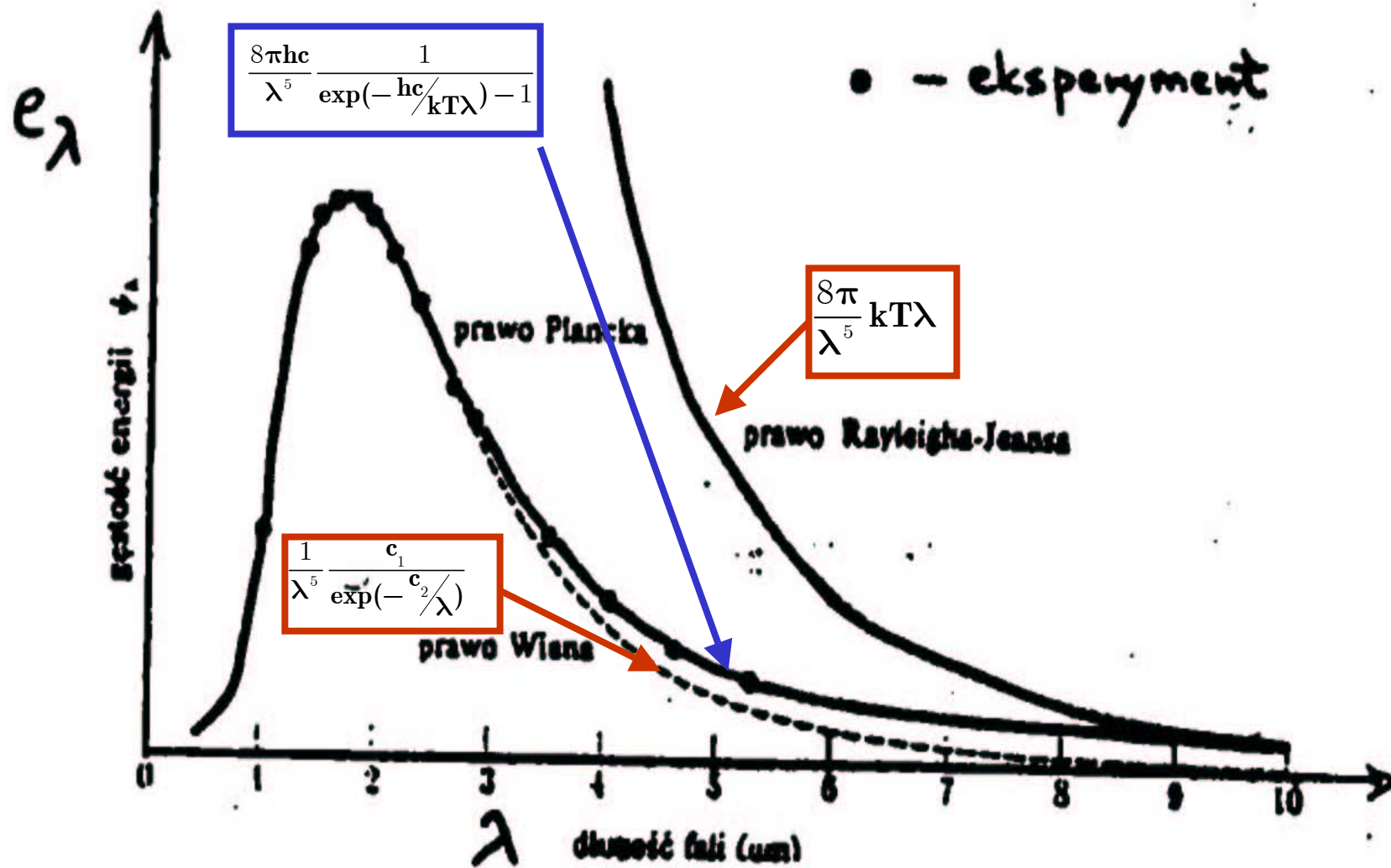
I.1.2

CIAŁO DOSKONAŁE CZARNE

Przykład widma CDCz

Kosr





Wzór empiryczny Plancka

$$u(\lambda, T)d\lambda = \frac{c_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1} d\lambda$$

Wzór Plancka

$$u(\lambda, T)d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} d\lambda$$

$$u(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu$$

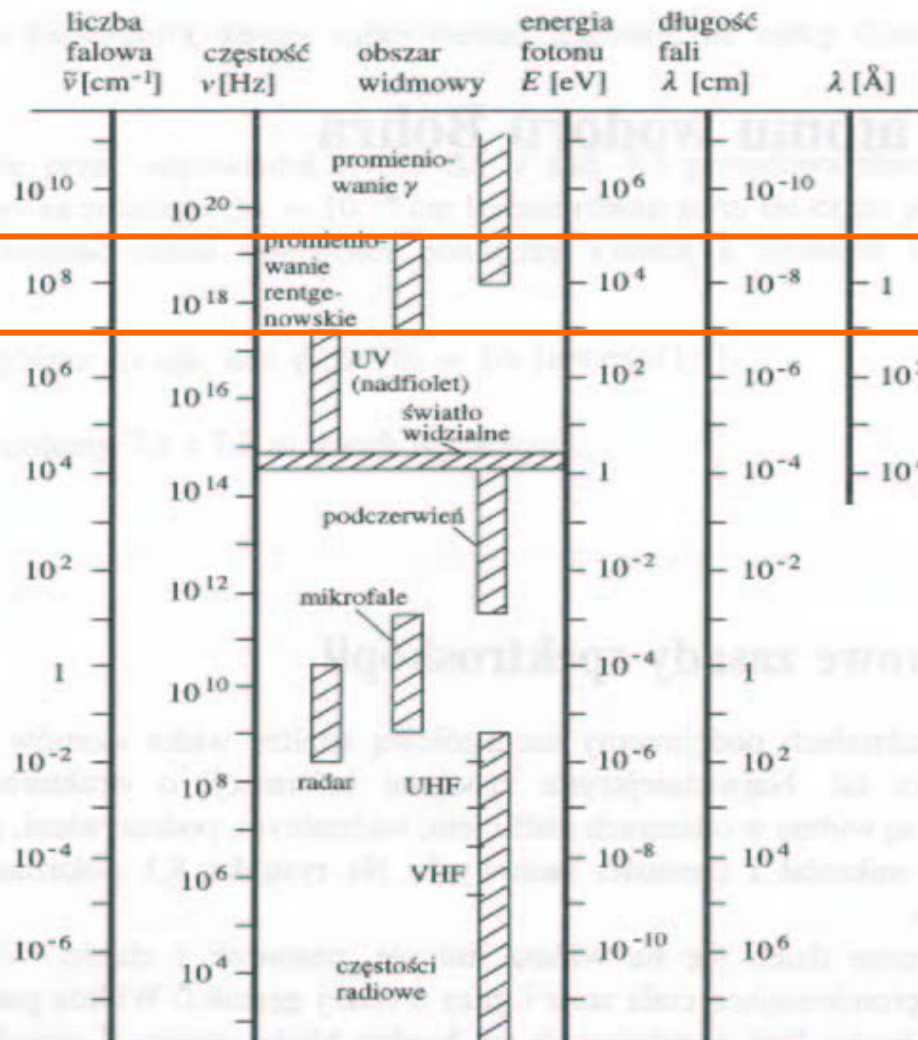
I.2 Efekt fotoelektryczny

Wzór Einsteina (1905):

$$E_k = 1/2mV^2 = h\nu - W$$

I.3 Promieniowanie rentgenowskie. Efekt Comptona

- **Otrzymywanie promieniowania X**
- **Pochłanianie X przez materię**
- **Efekt Comptona**



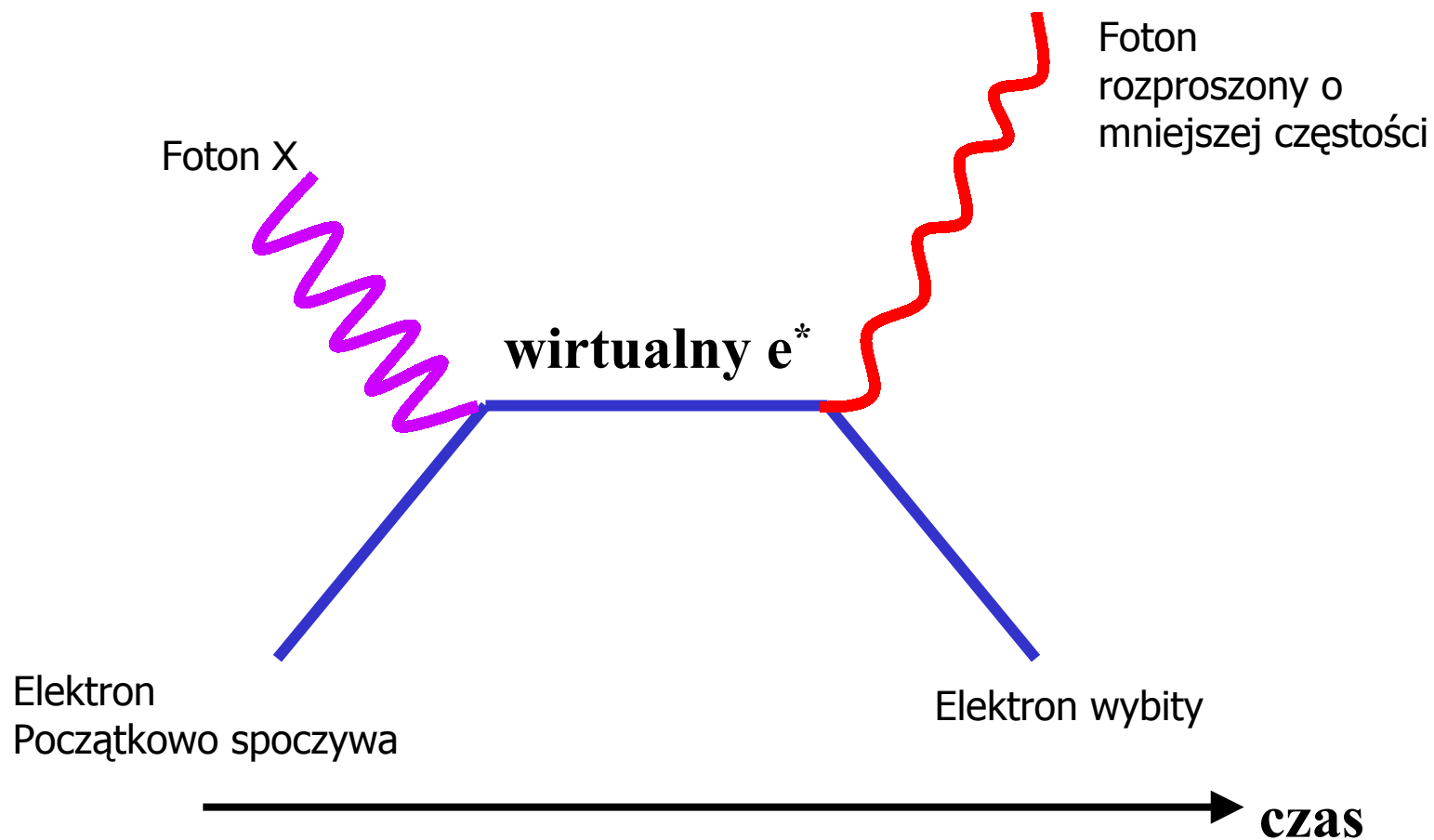
0.01 nm = 0.1 Å

100 keV

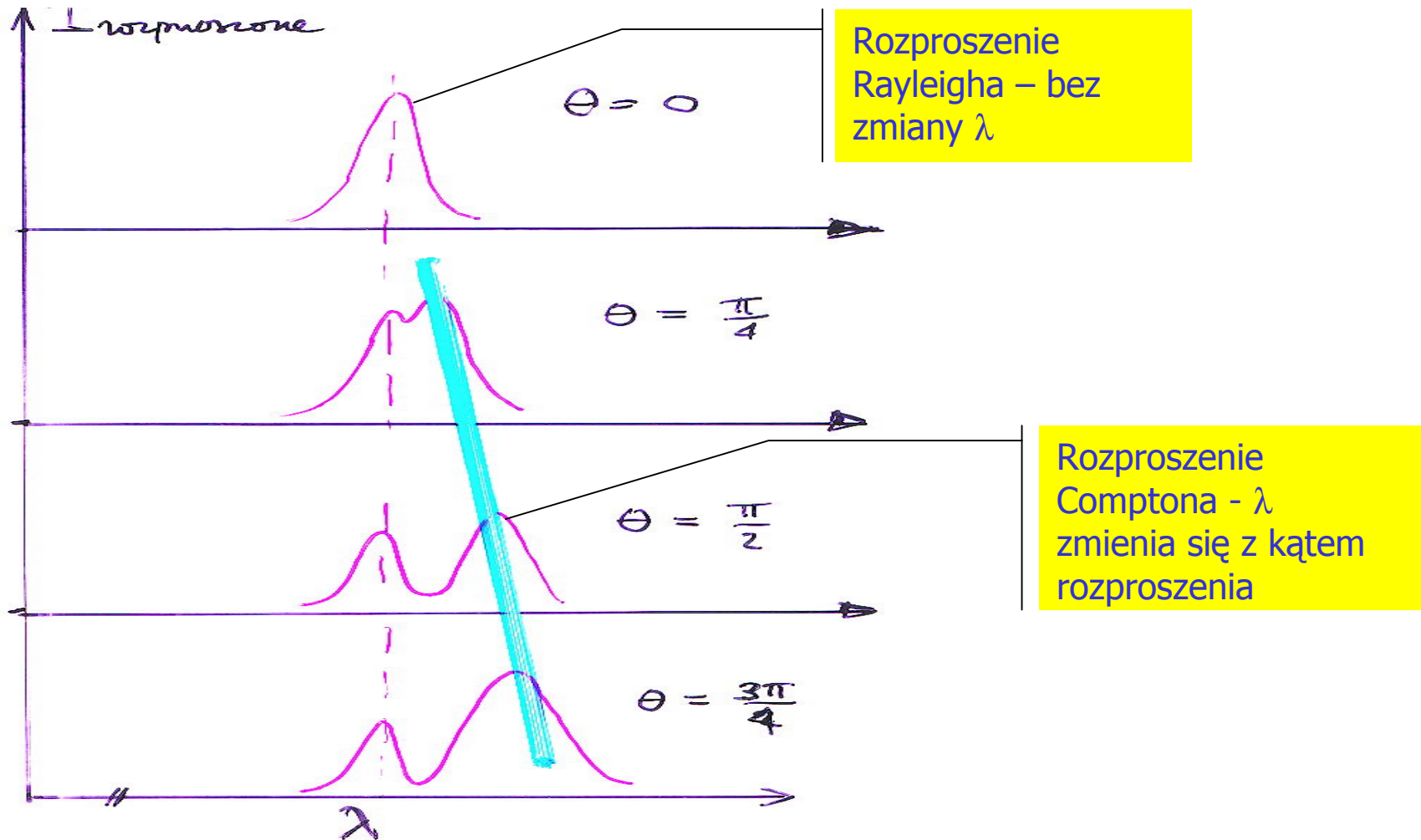
1 nm = 10 Å

1 keV

Diagram Feynmana przedstawiający proces Comptona



Wyniki A. Comptona



Wyprowadzenie wzoru Comptona cd.

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta)$$

Paczki falowe. Fale materii. Zasada nieoznaczoności Heisenberga. Równanie Schroedingera

- **Fale materii. Wzór de Broglie'a.**
- **Lokalizacja. Pakiety falowe.**
- **Interpretacja probabilistyczna**
- **Zasada nieoznaczoności**
- **Równanie Schroedingera**

E-M+EF+EC: fale są cząstkami/ Cząstki są falami?

Fale e-m są cząstkami:

- EF, E. Comptona: fotony są zlokalizowane

Elektrony czy neutrony (niewątpliwe cząstki) są falami:

- Obserwujemy dyfrakcję e i n na kryształach (Davisson & Germer 1927)

E-M: fale są cząstkami/ Cząstki są falami

Związek między pędem i długością fali dla fotonu:

$$E_{\gamma} = h\nu, \quad p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Louis de Broglie (1923): fale materii;

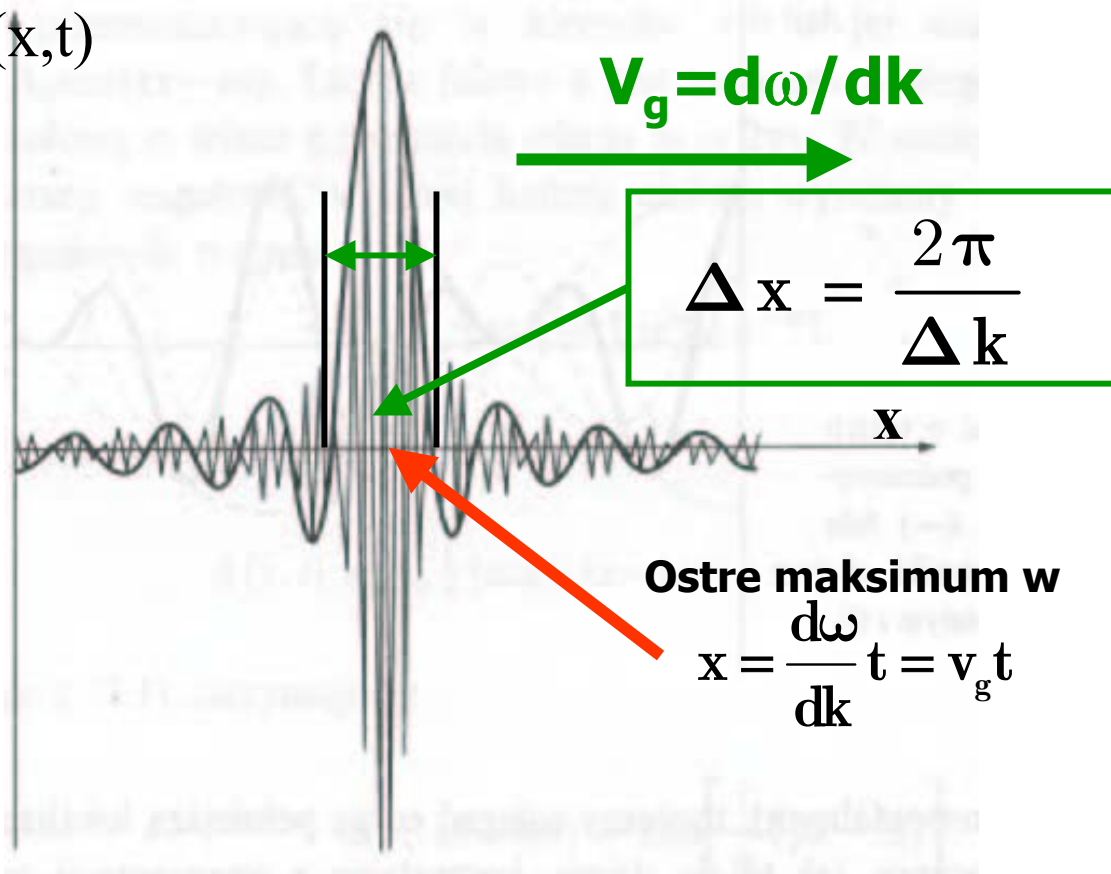
Cząstkom o pędzie p przyporządkowujemy falę materii. Długość fali przez analogię z fotonem:

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

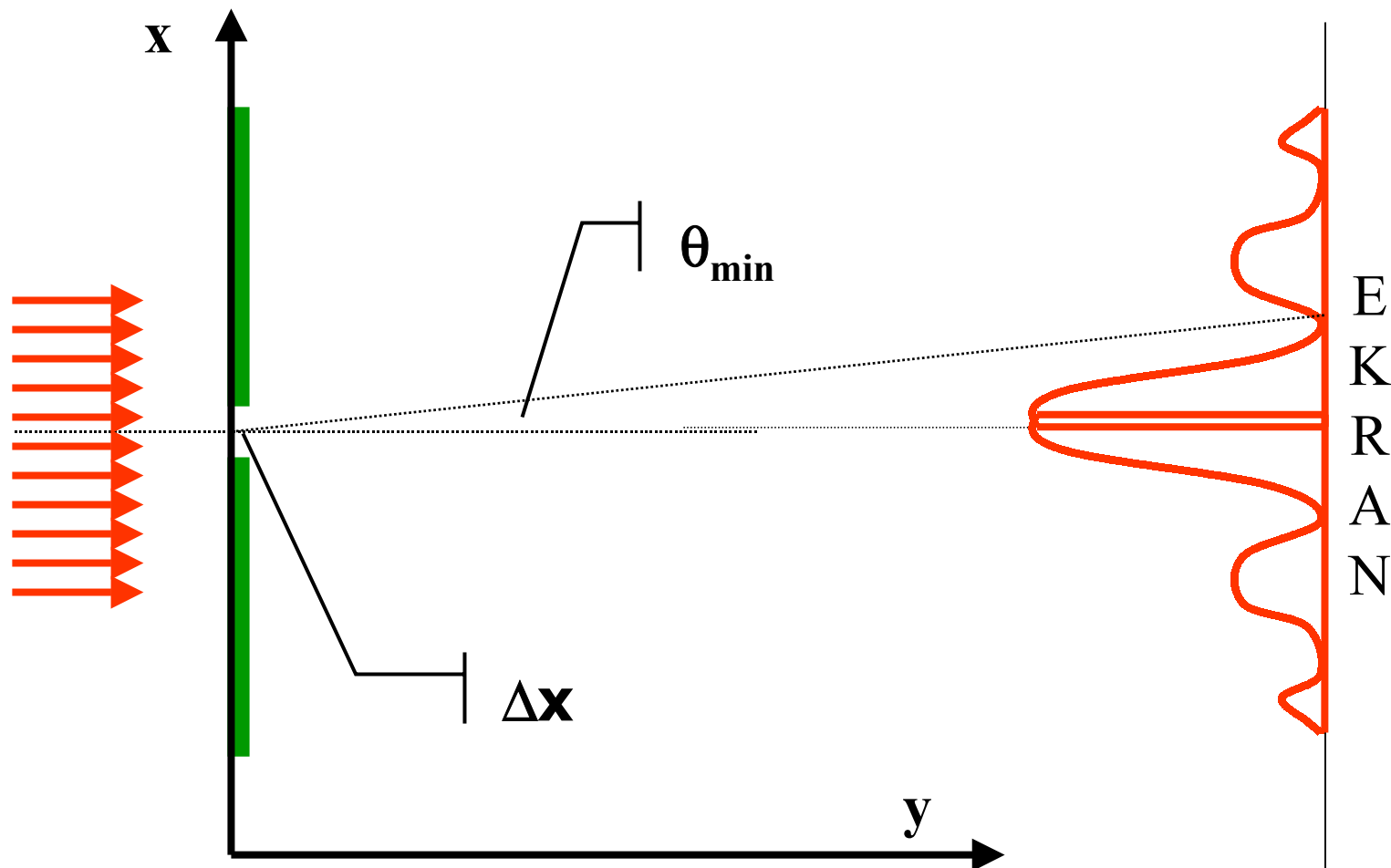
$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

Pakiety falowe: lokalizacja fotonów cd

$\text{Re}\Psi(x,t)$



Interpretacja probabilistyczna cd.



Interpretacja probabilistyczna cd.

Natężenie jest proporcjonalne do prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w objętości d_3r dookoła punktu \vec{r} .

$$p(\vec{r}, t)d_3r = |\Psi|^2 d_3r$$

Zasada nieoznaczoności cd.

Rozmycie statystyczne x-owej składowej pędu jest nie mniejsze niż $p \cdot \sin \theta_{\min}$:

$$\Delta p_x \geq p \sin \theta_{\min} = \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{\Delta x}$$

czyli

$$\Delta p_x \Delta x \geq h$$

Jest to zasada nieoznaczoności Heisenberga

Zasada nieoznaczoności i stany związane cd.

Poszukajmy minimalnej energii:

$$E \approx \frac{h^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{h^2}{mr_{\min}^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\min}^2} = 0 = -4\pi\epsilon_0 h^2 + me^2 r_{\min}$$

$$r_{\min} = \frac{4\pi\epsilon_0 h^2}{me^2} = 2.07 \cdot 10^{-9} \text{ m} \quad \text{wynik dokładny} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

$$E_{\min} = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0 h^2)^2} = -0.35 \text{ eV}$$

wynik dokładny $(2\pi)^2$ większy = 13.6 eV

Interpretacja probabilistyczna cd.

Natężenie jest proporcjonalne do prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w objętości d_3r dookoła punktu \vec{r} .

$$p(\vec{r}, t)d_3r = |\Psi|^2 d_3r$$

Równanie Schroedingera cd.

Uogólnienie na przypadek cząstki w potencjale V:

$$i \hbar \frac{\partial \Psi (\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(- \frac{\hbar^2}{2 m} \Delta + V \right) \Psi (\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi$$

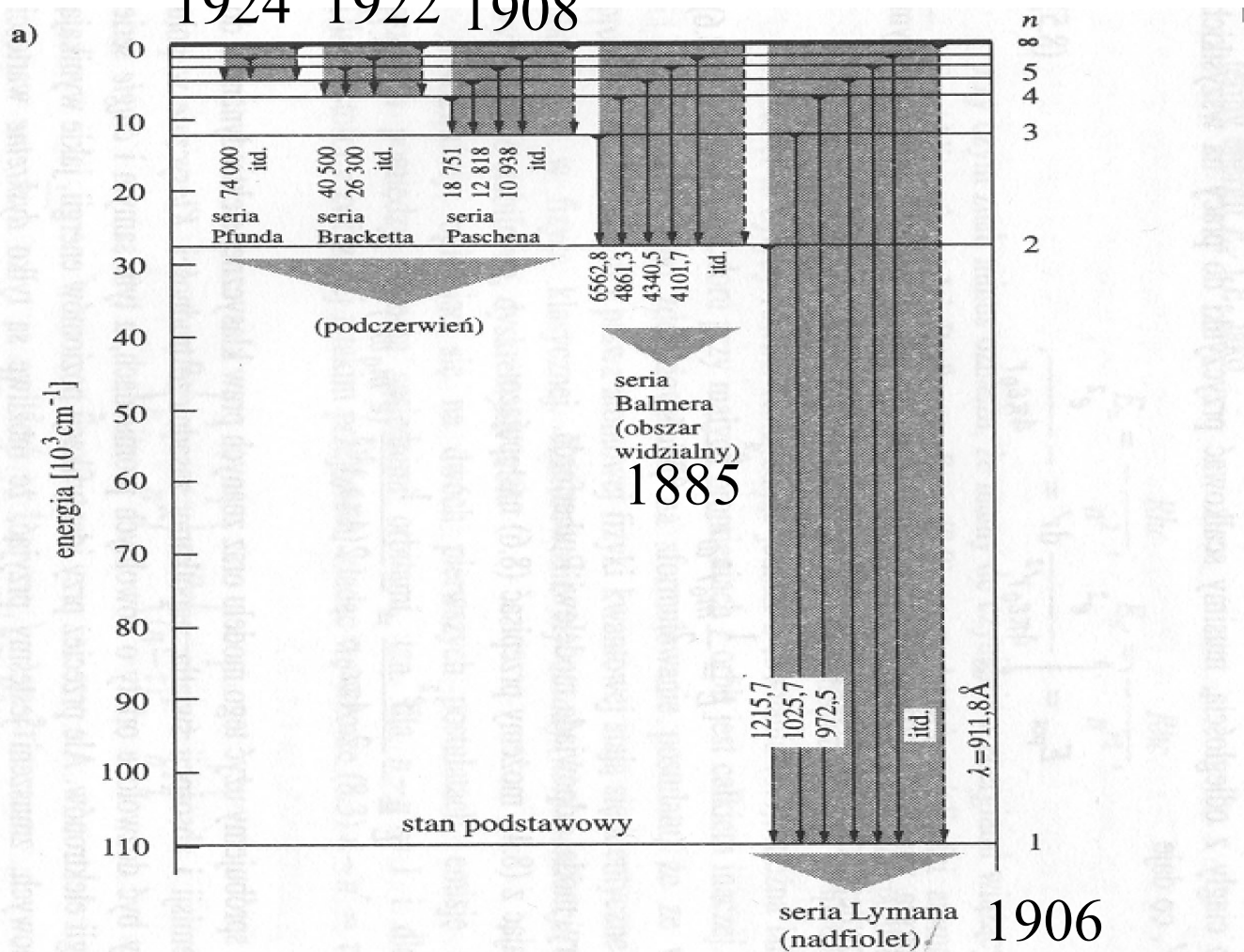
II.1-6 Atomy jednoelektronowe. Atom w polu magnetycznym

II.1 Atom wodoru i atomy jednoelektronowe

- 1. Serie widmowe atomu wodoru Postulaty Bohra i wzór na energię poziomów. Orbitalny moment pędu.**
- 2. Zgodność z doświadczeniem- konieczność wprowadzenia orbitalnej liczby kwantowej**
- 3. Spin elektronu**
- 4. Rozszczepienie subtelne: relatywistyczne poprawki Sommerfelda i rozszczepienie spin-orbita**
- 5. Doświadczenie Franka_Hertza i wzbudzanie atomów w zderzeniach**
- 6. Widma elektronów walencyjnych atomów metali alkalicznych**

Serie widmowe wodoru cd.

1924 1922 1908



Model atomu Bohra cd.

Promień n-tej orbity:

$$r_n = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2 Z} n^2$$

Promień 1-szej orbity wodoru = promień Bohra:

$$a_0 = r_1(\text{H}) = 0.0529 \text{ nm}$$

Model atomu Bohra cd.

Częstość obiegu n-tej orbity:

$$\Omega_n = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \left(\frac{mZ^2e^2}{\hbar^3 n^3} \right)$$

Model atomu Bohra cd.

Energia n-tego poziomu:

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

n nazywamy główną liczbą kwantową.

Model atomu Bohra cd.

Orbitalny moment pędu: $\vec{L}_n = \vec{r}_n \times m(\vec{\Omega}_n \times \vec{r}_n)$

Długość L jest skwantowana: $|\vec{L}| = n\hbar$

Na obwodzie orbity Bohra mieści się n długości fal de Broglia elektronu:

$$l_n = |\vec{r}_n \times \vec{p}_n| = \left| \lambda = \frac{h}{p} \right| = \frac{2\pi r_n}{\lambda} \hbar$$

Z drugiej strony możemy policzyć długość bezpośrednio:

$$l_n = m\Omega_n r_n^2 = m \left(\frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^3 \hbar^3} \right) \left(\frac{n^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)}{m e^2} \right)^2 = n\hbar$$

Czyli

$$\frac{2\pi r_n}{\lambda} = n$$

Model atomu Bohra cd.

W modelu Bohra elektrony na orbitach kołowych mają maksymalny moment pędu dozwolony dla danej wartości głównej liczby kwantowej n .

Wprowadza się orbitalną liczbę kwantową l (Sommerfeld 1916), która w mechanice kwantowej przyjmuje n wartości dyskretne:

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

Kwadrat długości wektora momentu pędu jest skwantowany: $|\vec{L}|^2 = \ell(\ell + 1)\hbar^2$

Orbita o $l < n-1$ jest eliptyczna. Energia elektronu słabo zależy od l (rozszczenie subtelne, patrz poniżej).

Model Bohra. Widma metali alkalicznych cd.

Efektywny potencjał w którym porusza się elektron walencyjny pierwiastka alkalicznego.

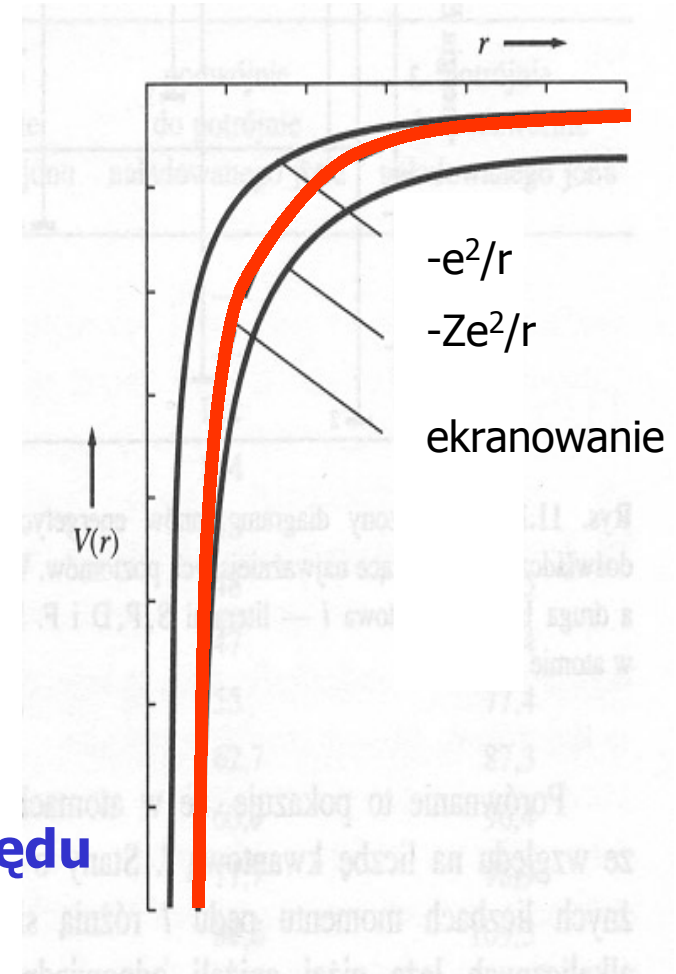
Dla małych odległości potencjał zachowuje się jak:

$$V(Ze^2) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Zaś dla dużych jak:

$$V(e^2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Następuje zniesienie degeneracji Ze względu na orbitalny moment pędu



Model Bohra. Widma metali alkalicznych cd.

Energie przejść elektronów walencyjnych dla pierwiastka alkalicznego można opisać wzorem podobnym do wzoru Bohra:

$$h\nu = E_{n,l} - E_{n',l'}$$

$$E_{n,l} = -R_{\text{alkaliczny}} hc \frac{1}{n_{\text{ef}}^2} = -R_{\text{alkaliczny}} hc \left(\frac{1}{(n - \Delta(n, l))^2} \right)$$

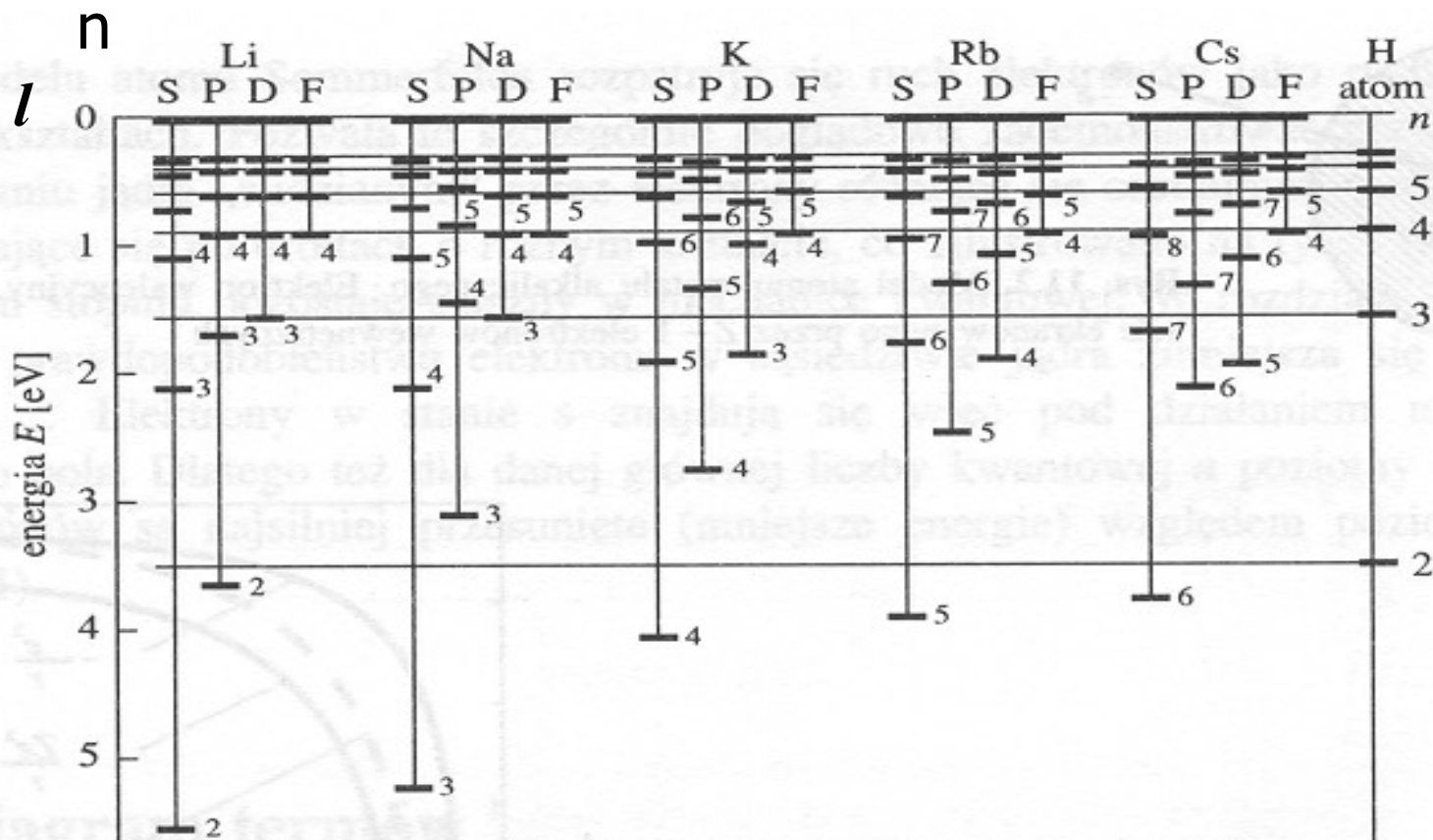
$n_{\text{ef}} = (n - \Delta(n, l))$ jest efektywną główną liczbą kwantową (na ogół nie jest to liczba całkowita), zaś poprawkę $\Delta(n, l)$ nazywamy *defektem kwantowym*.

Dla ustalonego l defekt kwantowy słabo zmienia się z n .

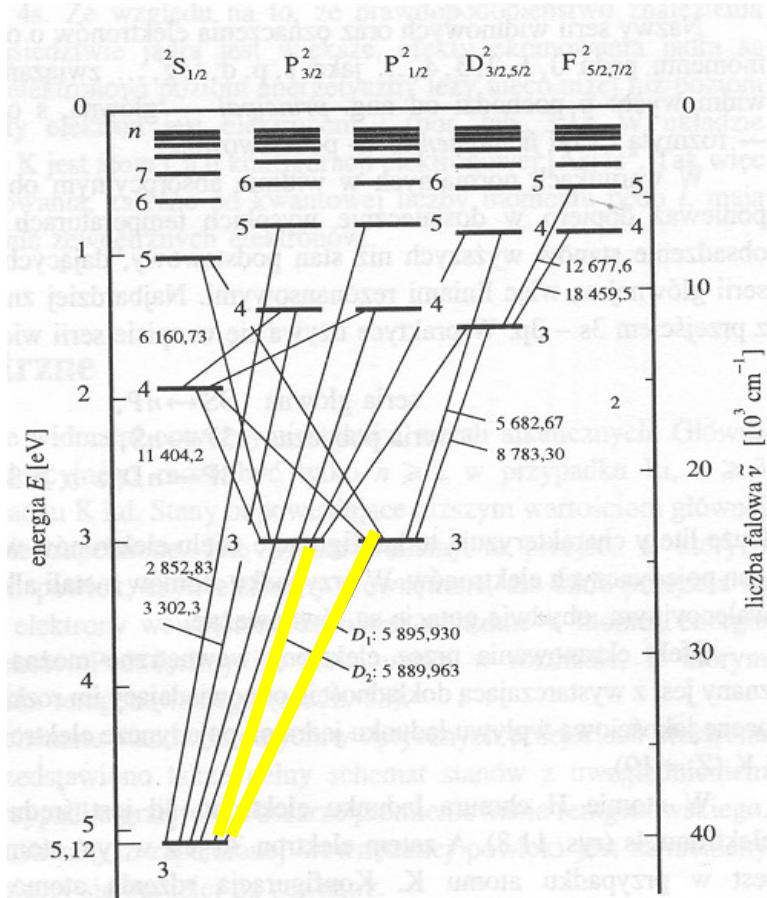
Defekt kwantowy maleje ze wzrostem l (orbity stają się bardziej kołowe i potencjał efektywny bardziej podobny do wodorowego).

Model Bohra. Widma metali alkalicznych cd.

Poziomy energetyczne elektronów walencyjnych pierwiastków alkalicznych



Przejścia walencyjne w atomie sodu



Żółty dublet sodu:

D_1 o długości fali 589.5930 nm

D_2 o długości fali 589,9963 nm

Są to przejścia ze stanów

$3^2P_{1/2}$ i $3^2P_{3/2}$ do stanu $3^2S_{1/2}$

Zgodność z doświadczeniem modelu Bohra

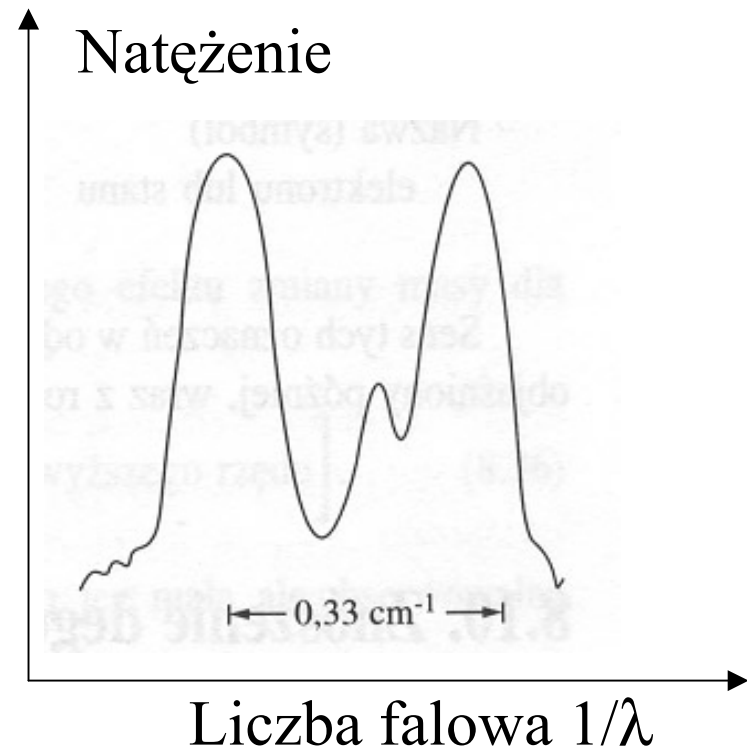
Linia H_α (przejście z $n=3$ do $n=2$) jest multipletem kilku linii (co najmniej trzech odległych o 0.33 cm^{-1}). W atomie wodoru występuje *rozszerzenie subtelne* linii widmowych.

Poziomy Bohra rozszczepiają się na bardzo blisko leżące podpoziomy

Jest to efekt na poziomie

$$\frac{\Delta E}{E} \approx 10^{-4}$$

Linia H_α $1/\lambda = 15223.21 \text{ cm}^{-1}$



Dygresja: symbole spektroskopowe

Poziomy (termy, stany) w atomach oznaczamy symbolami spektroskopowymi np..:

Główna liczba kwantowa n .
Tu $n=2$.

Multipletowość $2s+1$;
Tu $s=1/2$.

Wartość orbitalnej liczby kwantowej l . Tradycyjnie oznaczana literami: S ($l=0$), P ($l=1$), D ($l=2$), F ($l=3$) itd.
Tu $l=0$.

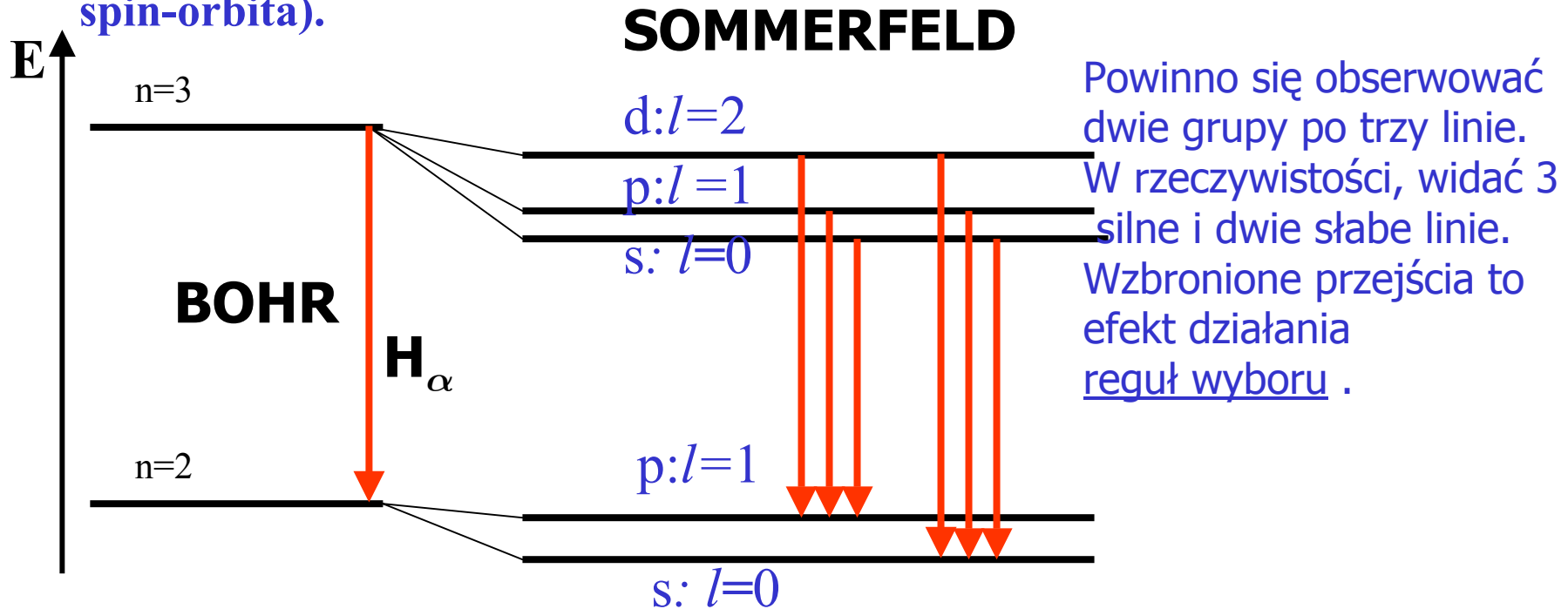
Wartość liczby całkowitego momentu pędu $j=1/2$

2 ²S_{1/2}

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Rozszczepienie subtelne cd. Poprawka relatywistyczna

Podstawową konsekwencją uzupełnienia modelu Bohra jest pojawienie się zależności energii poziomów nie tylko od głównej liczby kwantowej n ale także od orbitalnej liczby kwantowej l (*poprawki relatywistyczne*) i/lub liczby kwantowej j związanej z całkowitym momentem pędu (*poprawki spin-orbita*).



Rozszczepienie subtelne cd. Poprawka relatywistyczna

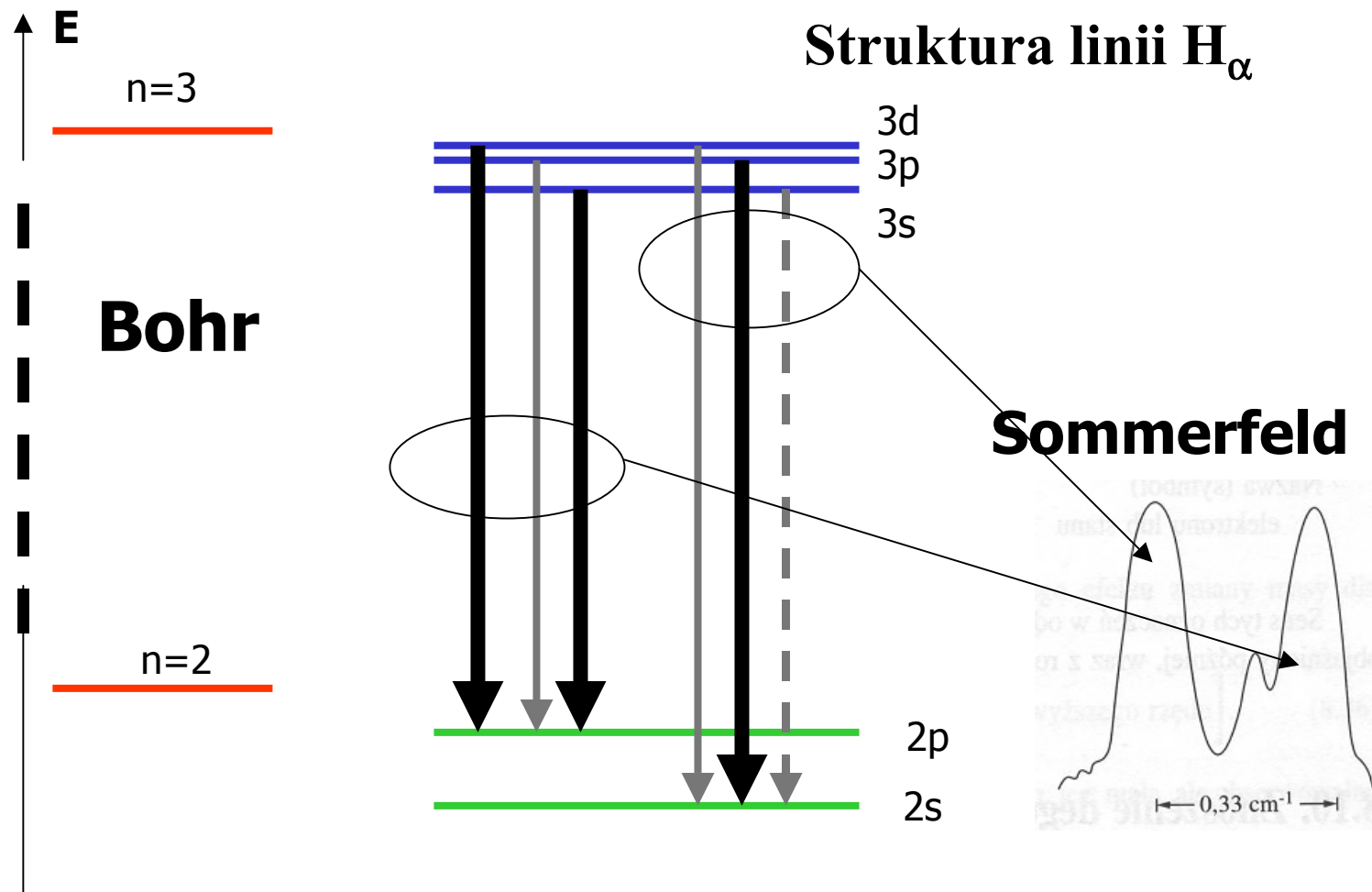
Wzór Sommerfelda na energie poziomów atomów wodoropodobnych uwzględniający pierwszą poprawkę relatywistyczną (rzędu $(v/c)^2 \approx \alpha^2$):

$$E_{n,\ell} = -R_{\infty}hc \left\{ \frac{Z^2}{n^2} + \frac{Z^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{\ell + 1} - \frac{3}{4} \right) \right\}$$

gdzie stała struktury subtelnej dana jest wzorem:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \approx \frac{v(1 - \text{sza orbita Bohra})}{c}$$

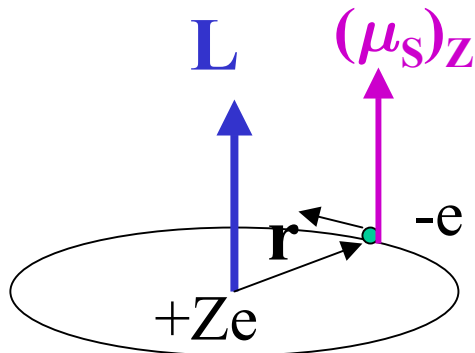
Rozszczepienie subtelne cd. Poprawka relatywistyczna



Klasyczne obliczenie poprawki spin- orbita cd.

Obliczenie rozszczepienia spin-orbita

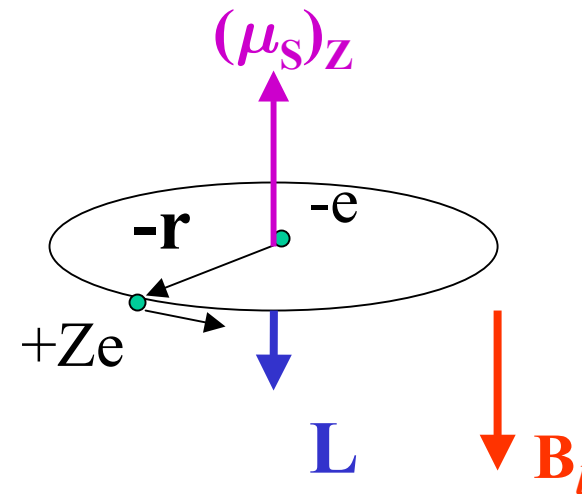
W układzie spoczynkowym jądra



W układzie elektronu

$$\vec{B}_l = + \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{v} \times (-\vec{r})] = - \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{v} \times (\vec{r})] = \frac{Ze\mu_0}{4\pi m_0 r^3} \vec{L}$$

Pole obliczamy w układzie spoczynkowym elektronu.



Klasyczne obliczenie poprawki spin- orbita cd.

Energia elektronu (w tym przybliżeniu) dana jest więc ostatecznie następującym wzorem:

$$E_{n,l,j} = E_{n,l} (\text{Bohr} - \text{Sommerfeld}) + E_{LS}$$

gdzie

$$E_{LS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_\ell \frac{Ze^2 \mu_0}{8\pi m_e^2 r^3} (\vec{s} \cdot \vec{L})$$

Poprawka spin orbita

$$E_{LS} = \frac{a(r)}{\hbar^2} \left(|\vec{L}| |\vec{s}| \cos(\angle \vec{L}, \vec{s}) \right) \quad \text{gdzie } a(r) = \frac{Ze^2 \mu_0}{8\pi m_e^2 r^3}$$

Klasyczne obliczenie poprawki spin- orbita cd.

Ostatecznie dostajemy:

$$E_{LS} = \frac{a(r)}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

Współczynnik $a(r) \sim Z/r^3 \sim Z^4/n^3$. Dokładniejszy wynik oparty o obliczenia z równania Schroedingera (r. Pauliego) daje nam:

$$a(r) \sim \frac{Z^4}{n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right) (l+1) l}$$

Jak to jest naprawdę czyli w pełni relatywistyczna poprawka na rozszczepienie subtelne

Zarówno poprawka relatywistyczna Sommerfelda jak i wyprowadzona półklasycznie poprawka spin-orbita zostały wyprowadzone bardziej dokładnie przez Diraca z jego równania relatywistycznego. Dirac otrzymał następujące wyrażenie na sumę tych efektów:

$$E_{SS} = E_{rel} + E_{LS} = -E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right)$$

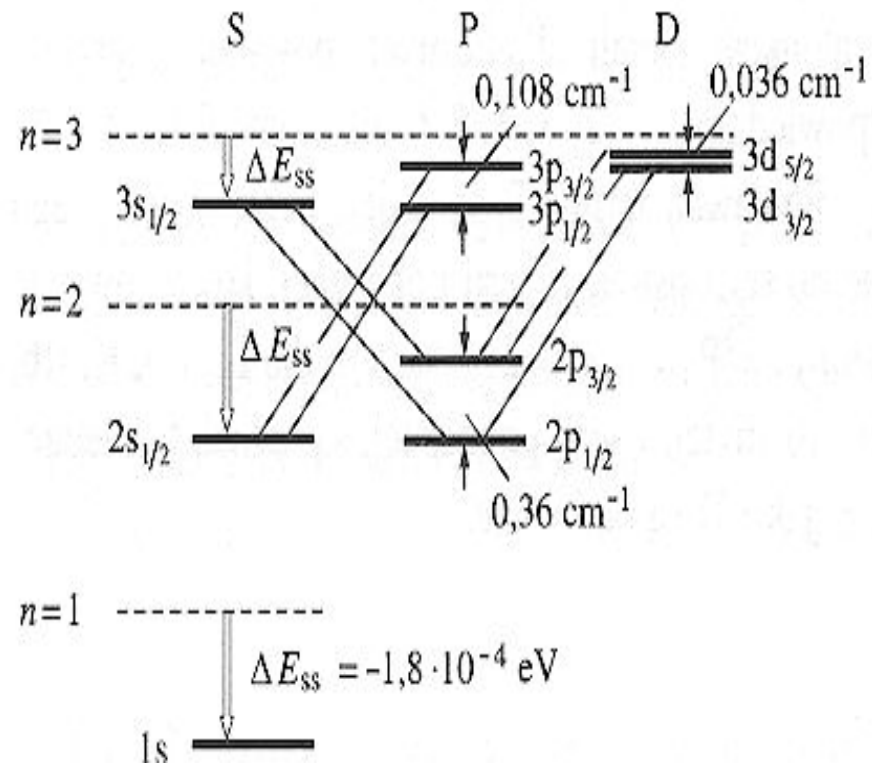
Na następnej transparencji widzimy schemat rozszczepień poziomów wodoru dany przez teorie Diraca

Rozszczepienie subtelne w wodorze wg. Diraca

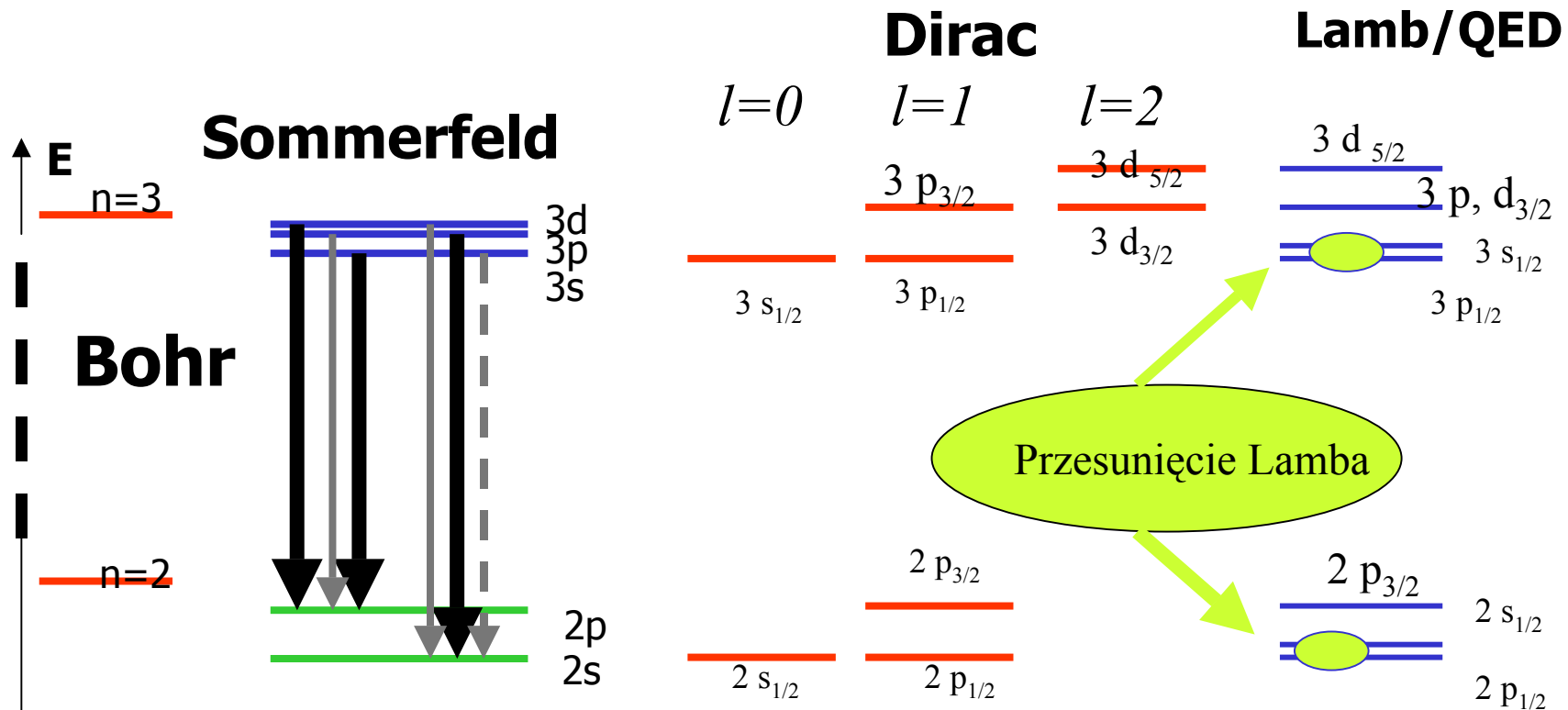
Schemat rozszczepień subtelnych wodoru wg. Diraca.

Rozszczepienie poziomu $n=2$ jest takie same jak w teorii Sommerfelda ale mamy 3 stany:

$s_{1/2}$, $p_{1/2}$ i $p_{3/2}$; dwa pierwsze w teorii Diraca mają taką samą energię. (gdyż zależy ona tylko od liczby kwantowej j)



Struktura linii wodoru H_α uwzględniająca przesunięcie Lamba i QED
 Dla większej przejrzystości rysunku rozszczepienia wg. Diraca i QED zostały sztucznie powiększone w stosunku do obliczeń Sommerfelda. Rachunki D. i S. dotyczące rozszczepienia np. 2p i 2s zgadzają się doskonale.

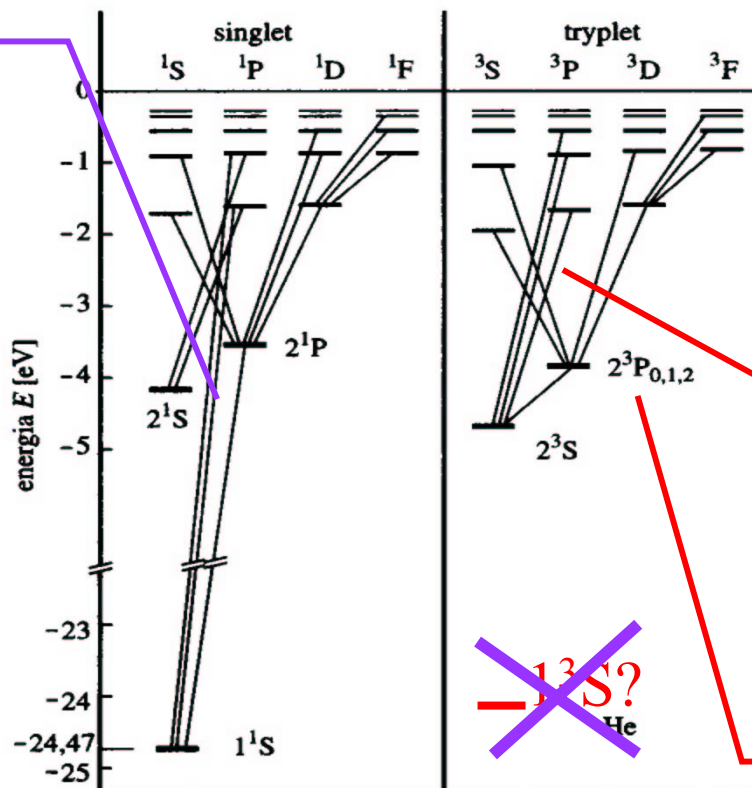


III.1 Atom helu i zakaz Pauliego. Atomy wieloelektronowe. Układ okresowy

1. Atom helu: struktura poziomów, reguły wyboru,
2. Zakaz Pauliego,
3. Moment pędu w atomach wieloelektronowych: sprzężenie LS i jj,
4. Układ okresowy: powłoki, widma rentgenowskie, konfiguracje elektronowe gazów szlachetnych, reguły Hunda.

Ustalony doświadczalnie układ poziomów helu

parahel **ortohel**



Przejścia w UV

Brak przejść
singlet- tryplet z
 $\Delta S \neq 0$

Przejścia
widzialne i IR

Rozszczepienie
subtelne

Zakaz Pauliego

Brak stanu ortohelu 1^3S ($1s^2$ ze spinami elektronów ustawionymi równolegle) doprowadziły Wolfganga Pauliego (1925) do sformułowania zasady noszącej jego nazwisko:

Stany elektronowe w atomie mogą być obsadzone wyłącznie w taki sposób, że żadne dwa elektrony nie mają takich samych liczb kwantowych n, l, m, m_s, j, m_j .

Zasada Pauliego jest bardziej ogólna: obowiązuje dla dowolnych układów identycznych fermionów (cząstek o spinie połówkowym).

Układ okresowy

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS																					
1 IA																	18 VIIIA				
1 H Hydrogen 1.00794																	2 He Helium 4.002602				
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012182															5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.0107	7 N Nitrogen 14.00674	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.9984032	10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.989770	12 Mg Magnesium 24.3050	3 IIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII	9	10	11 IB	12 IIB	13 Al Aluminum 26.981538	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosph. 30.973761	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.4527	18 Ar Argon 39.948				
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955910	22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938049	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933200	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.39	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge German. 72.61	33 As Arsenic 74.92160	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.80				
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybd. 95.94	43 Tc Technet. 97.907215	44 Ru Ruthen. 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.29				
55 Cs Cesium 132.90545	56 Ba Barium 137.327	57-71 Lanthanides	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.9479	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.217	78 Pt Platinum 195.078	79 Au Gold 196.96655	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98038	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (209)	86 Rn Radon (222)				
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89-103 Actinides	104 Rf Rutherford. (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborg. (263)	107 Bh Bohrium (263)	108 Hs Hassium (265)	109 Mt Meitner. (266)	110 (269, 273)	111 (272)	112 (277)		114 (289)		116 (289)		118 (293)				
Lanthanide series		57 La Lanthan. 138.9055	58 Ce Cerium 140.116	59 Pr Praseodym. 140.90765	60 Nd Neodym. 144.24	61 Pm Prometh. (144.912748)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolin. 157.25	65 Tb Terbium 158.92534	66 Dy Dyspros. 162.50	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.26	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutetium 174.967					
Actinide series		89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232.0381	91 Pa Protactin. 231.03588	92 U Uranium 238.0289	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americ. (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Californ. (251)	99 Es Einstein. (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelev. (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrenc. (262)					

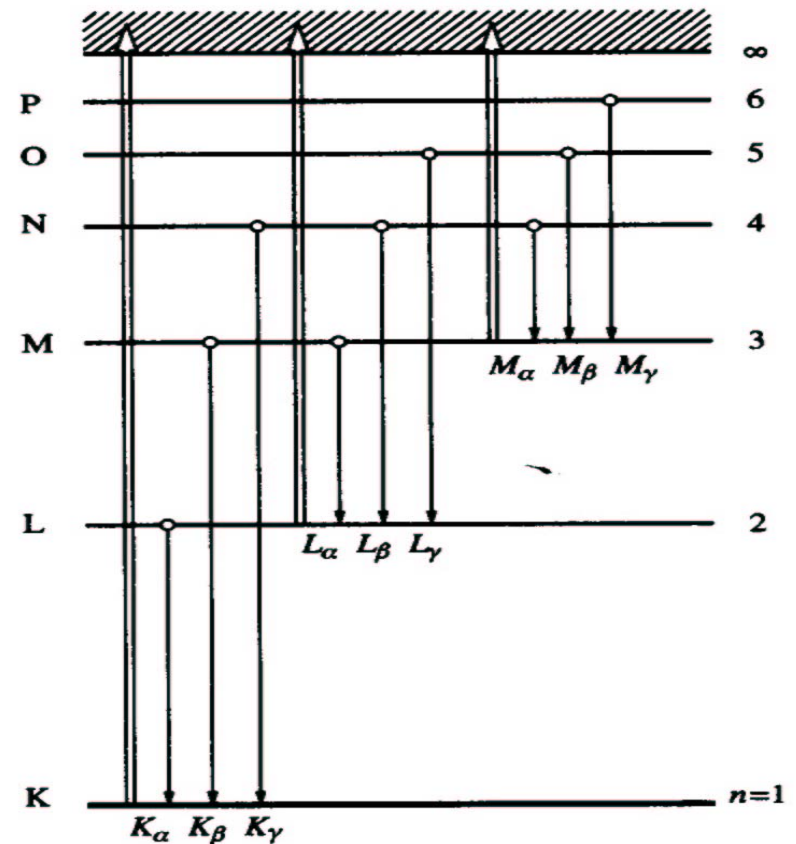
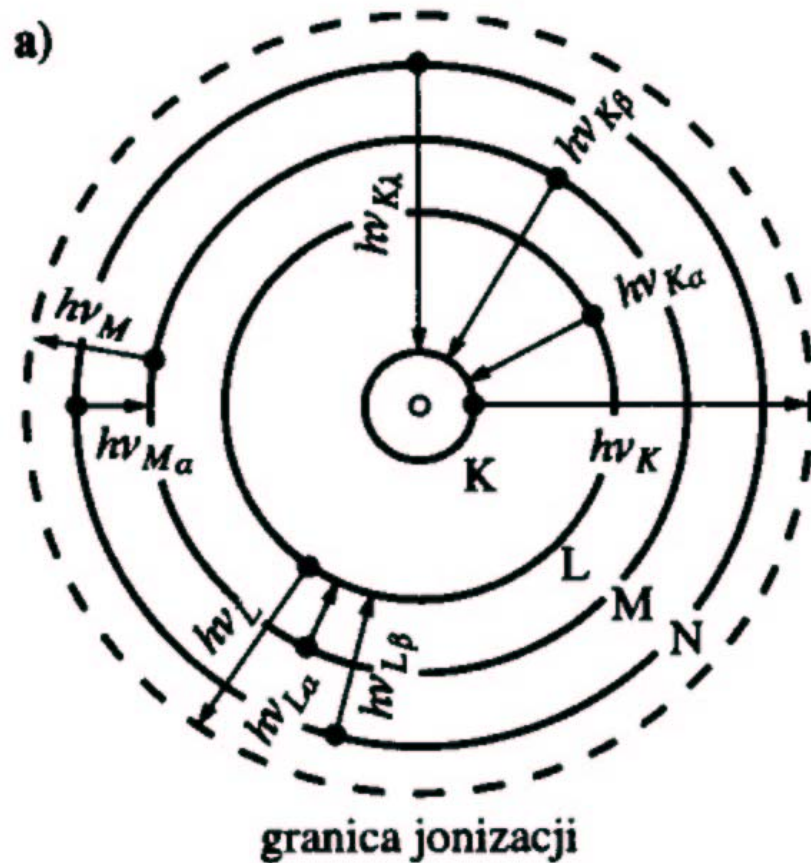
4. Periodic table of the elements

Układ okresowy i struktura powłokowa

Układ okresowy pierwiastków to ich uszeregowanie w rodziny wykazujące powinowactwo chemiczne tj. podobieństwo tworzenia wiązań chemicznych. Wyjaśnienie i potwierdzenie poprawności uporządkowania w ramach układu okresowego wynika:

- **Od strony doświadczalnej**- z badania reakcji chemicznych, systematyki widm rentgenowskich i doświadczenia Franka-Hertza (wzbudzenia zderzeniowe),
- **Od strony teoretycznej**- z budowy elektronowej atomów tj. systematyki liczb kwantowych n, L, m_L, S, m_S uzupełnionych zakazem Pauliego.
-

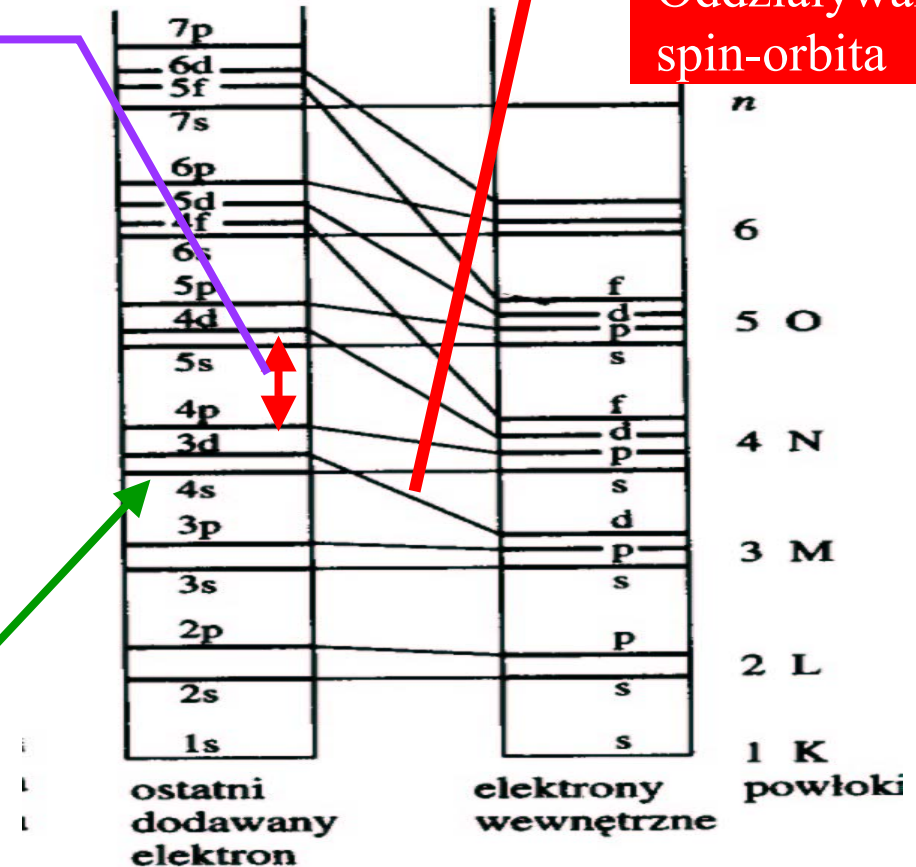
Poziomy elektronów wewnętrznych – widma rentgenowskie cd.



Struktura powłokowa i porządek poziomów dla ostatniego dodanego elektronu

Szczególnie duża przerwa pomiędzy poziomem ns i poziomem $(n-1)p$

Dla potasu K bardziej korzystne jest wejście elektronu na powłokę $4s$ zamiast na $3d$.



Bardziej dokładnie np. Hacken&Wolf, Tabela 19.3a

Kolejność wypełniania podpowłok: reguły Hunda

W przypadku sprzężenia LS momenty pędów atomów i kolejność stanów w stanie podstawowym są określane przez reguły Hunda:

1. Zapełnione powłoki nie wnoszą wkładu do L i S .
2. W stanie podstawowym elektrony o tej samej wartości l są rozmieszczane tak, żeby wypadkowy spin S był maksymalny. Stany o wyższej multipletowości mają więc niższe energie.
3. Po osiągnięciu maksymalnej wartości S elektrony są rozmieszczane pomiędzy stany o m_l w taki sposób, żeby zmaksymalizować $m_L = \sum m_l$. Dla danej $2S+1$, stany o niższej energii mają większe L .
4. Po uwzględnieniu energii LS najniższe energie mają:
 - **Termy o najmniejszych wartościach J dla podpowłok zapełnionych mniej niż w połowie,**
 - **Termy o największych wartościach J dla podpowłok zapełnionych więcej niż w połowie (zmienia się znak pola magnetycznego działającego na elektron).**

III.4 Gaz Fermiego. Struktura pasmowa ciał stałych

Gaz Fermiego

Gaz Fermiego to gaz swobodnych, nieoddziałujących, identycznych fermionów w objętości $V=a^3$.

Poszukujemy $N(E)dE$ funkcji rozkładu liczby elektronów (fermionów) o energiach w przedziale $\langle E, E+dE \rangle$.

Metoda: podobna jak dla fotonów CDCz- obliczymy liczbę fal stojących w objętości $V=a^3$. Tym razem fale stojące będą falami prawdopodobieństwa; będziemy żądać, żeby funkcje falowe elektronów (fermionów) zniknęły na krawędziach pudła. Podobnie jak dla pola elektrycznego fotonów prowadzi to do warunku periodyczności:

$$\left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \text{ czyli } k^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Skwantowana energia kinetyczna związana jest z liczbą falową wzorem

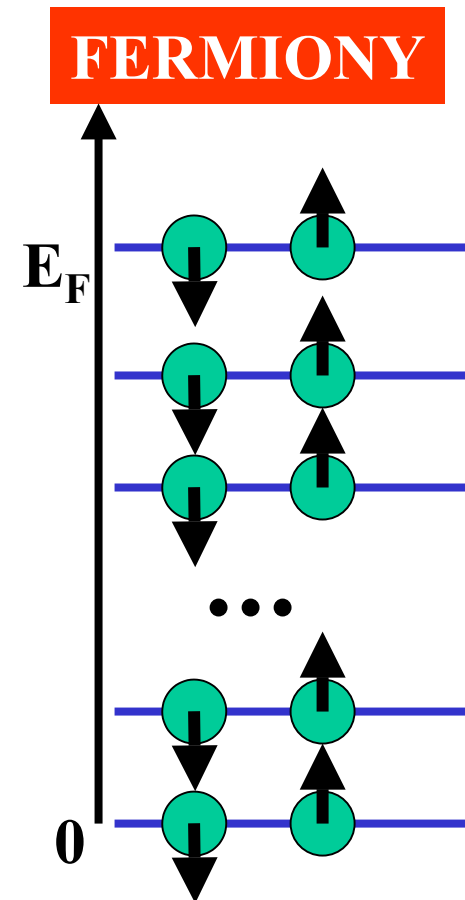
$$\mathbf{E} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Gaz Fermiego cd.

Dla fermionów obowiązuje zakaz Pauliego: nie więcej niż dwa elektrony w stanie o tej samej energii.

Dla N elektronów w $T=0$ wszystkie stany od $E=0$ do $E=E_F$ (energii Fermiego) są wypełnione.

Dla bozonów w $T=0$ wszystkie cząstki znajdują się w stanie o zerowej energii.



Gaz Fermiego cd.

Energia Fermiego i liczba elektronów w $T=0$:

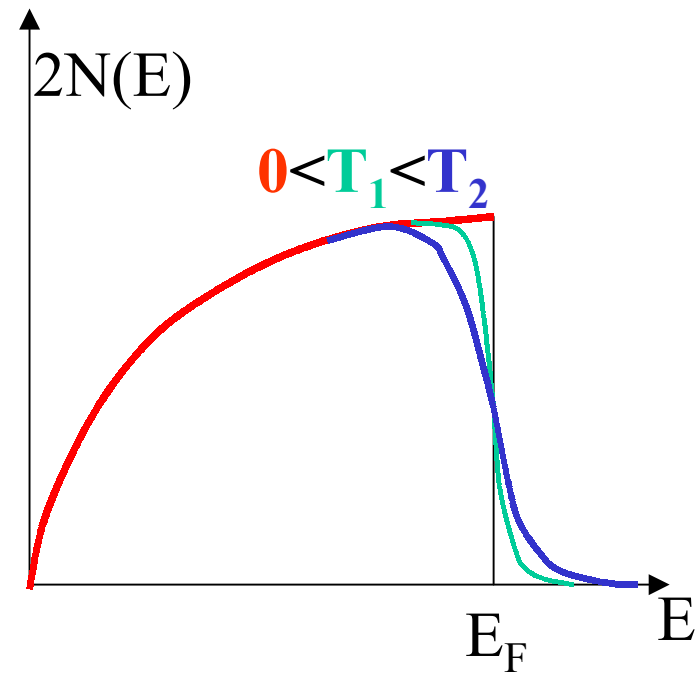
$$N = 2 \int_0^{E_F} N(E) dE = \frac{\sqrt{2} m^{3/2} V}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{(\sqrt{2})^3 m^{3/2} V}{3\pi^2 \hbar^3} (E_F)^{3/2}$$

skąd:

$$E_F = \left(3\right)^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

Średnia energia fermionów:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F$$



Gaz Fermiego cd.

Zależność od temperatury:

$$N(E, T) dE = 2 N(E) F(E, T) dE$$

gdzie

$$F(E, T) = \frac{1}{e^{(E - E_0)/kT} + 1}$$

$$\text{oraz } E_0(T) = E_0 = E_F \text{ gdy } kT \ll E_F$$

Dla fotonów rozkład Plancka jest szczególnym przykładem rozkładu Bosego- Einsteina; zamiast funkcji F wstawiamy funkcję B:

$$B(E, T) = \frac{1}{e^{(E - E_0)/kT} - 1}$$

Gaz Fermiego cd.

Konsekwencje praktyczne: niemal swobodne elektrony przewodnictwa w metalu tworzą gaz Fermiego.

Gęstość elektronów przewodnictwa w metalu np. miedzi:

$$\left(\frac{N}{V}\right) \approx \frac{N_{Av} \rho_{Cu}}{A_{Cu}} \approx \sim 6 \cdot 10^{23} \frac{9}{64} \approx \sim 8 \cdot 10^{22} \text{ elektronów / cm}^3$$

Energia Fermiego:

$$E_F \approx 7 \text{ eV}$$

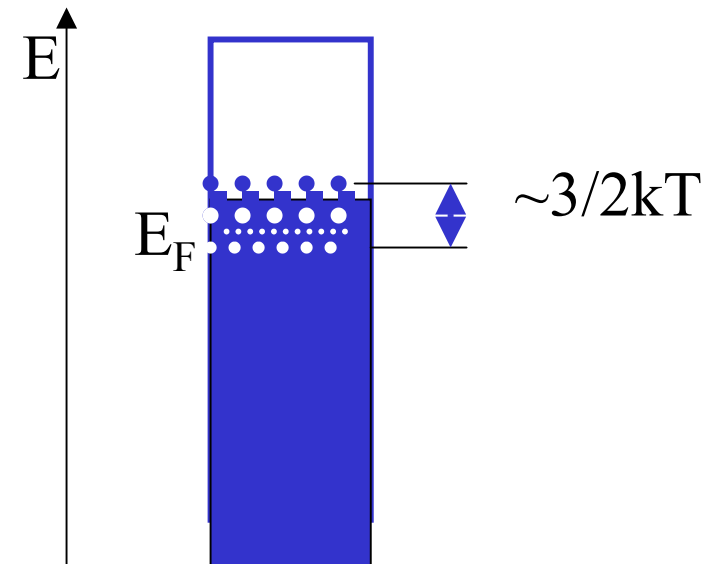
Średnia energia elektronów:

$$\langle E \rangle = 0.6 E_F = 4 \text{ eV}$$

Energia termiczna dla $T = 300\text{K}$:

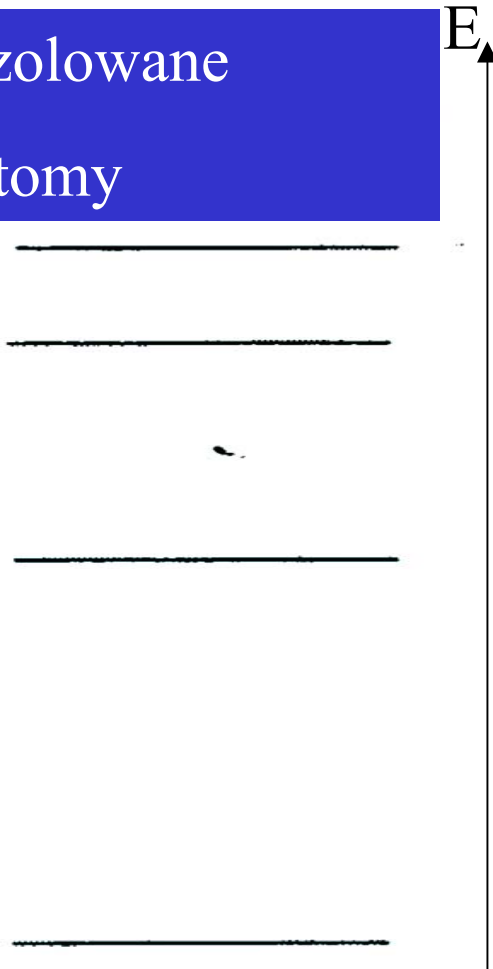
$$3 / 2 kT = 0.025 \text{ eV} \ll \langle E \rangle$$

Wszystkie stany poniżej E_F są zapełnione. Nieliczne elektrony są powyżej.



Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa ciał stałych

Izolowane
atomy



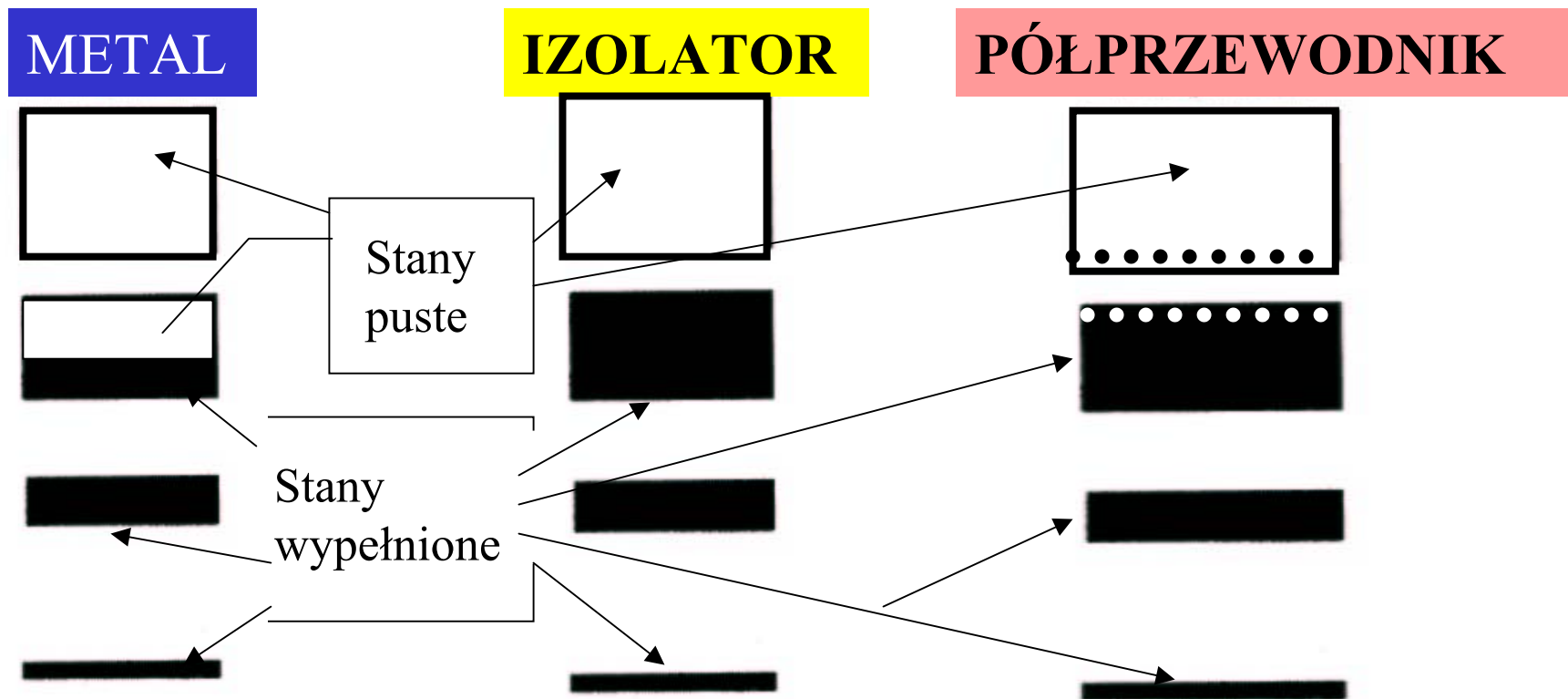
Zasada Pauliego wymaga, żeby poziomy atomów bliskich sobie przesunęły się tak, żeby żadne dwa elektrony o tych samych liczbach kwantowych nie miały tej samej energii. W ten sposób w ciałach stałych powstają pasma wspólnych elektronów.

Atomy w kryształach



Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa ciał stałych

Zależnie od stanu obsadzenia pasm i wielkości przerw energetycznych między nimi ciała stałe są metalami (przewodnikami), półprzewodnikami lub izolatorami.

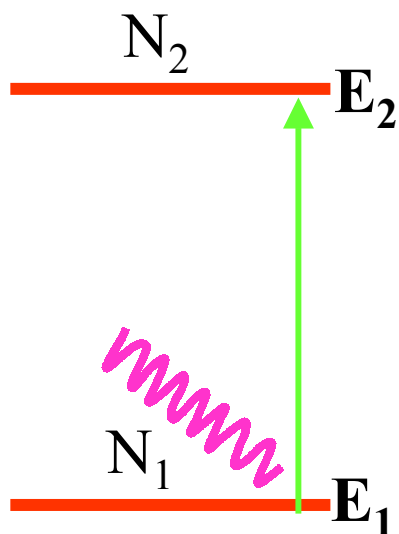


III.3 Emisja wymuszona. Lasery

1. Wyprowadzenie wzoru Plancka metodą Einsteina.
Emisja wymuszona
2. Koherencja ciągów falowych. Laser jako źródło koherentnego promieniowania e-m
3. Zasada działania lasera. Warunki zaistnienia akcji laserowej
4. Kilka przykładów realizacji praktycznych

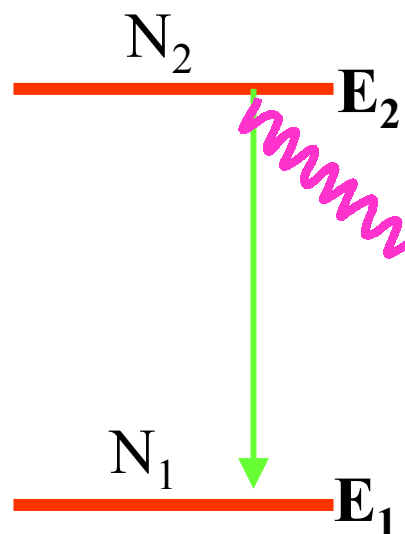
Trzy procesy w modelu Einsteina

Absorpcja



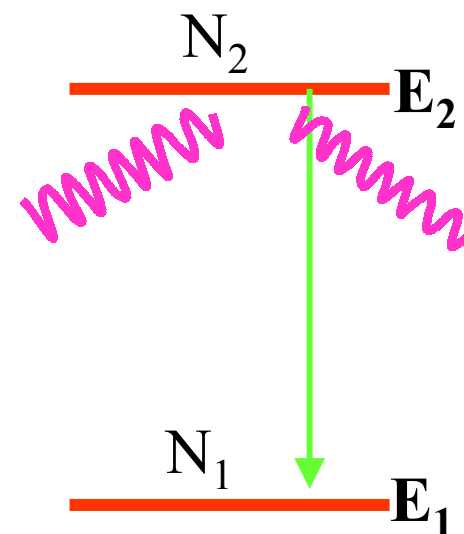
Emisja

spontaniczna

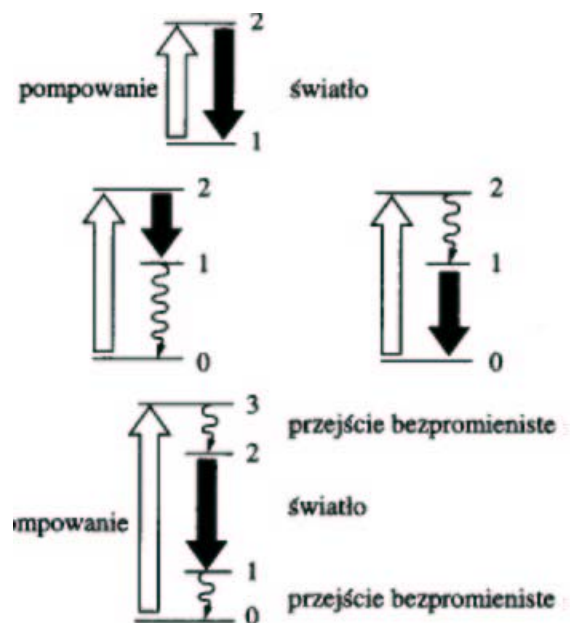
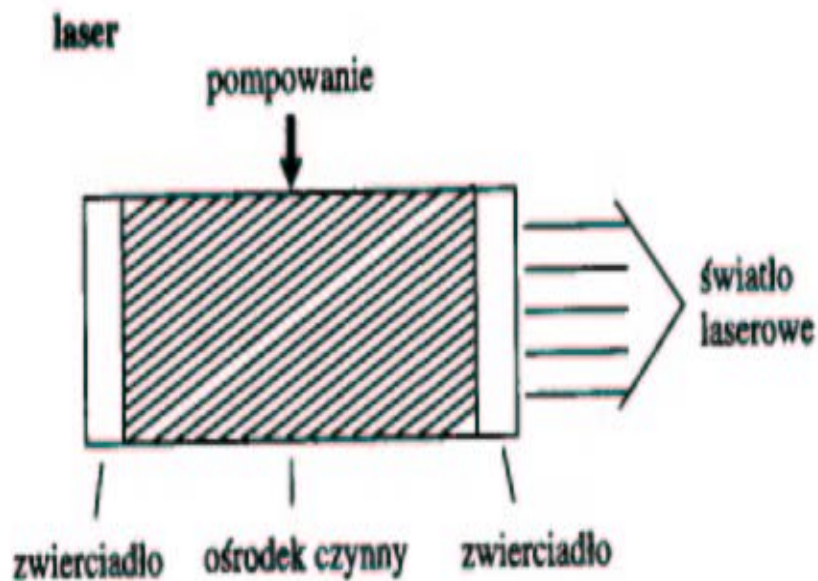


Emisja

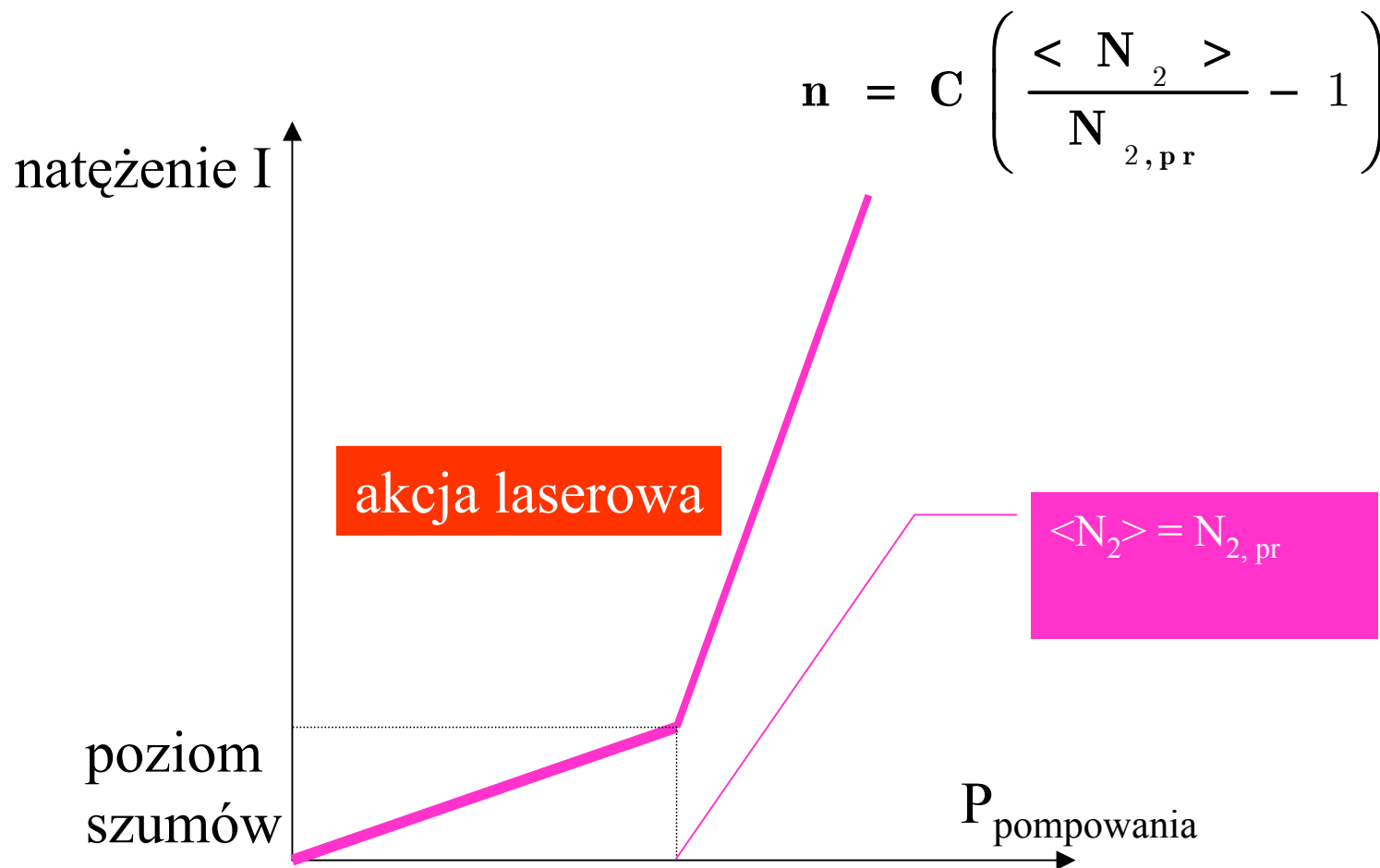
wymuszona



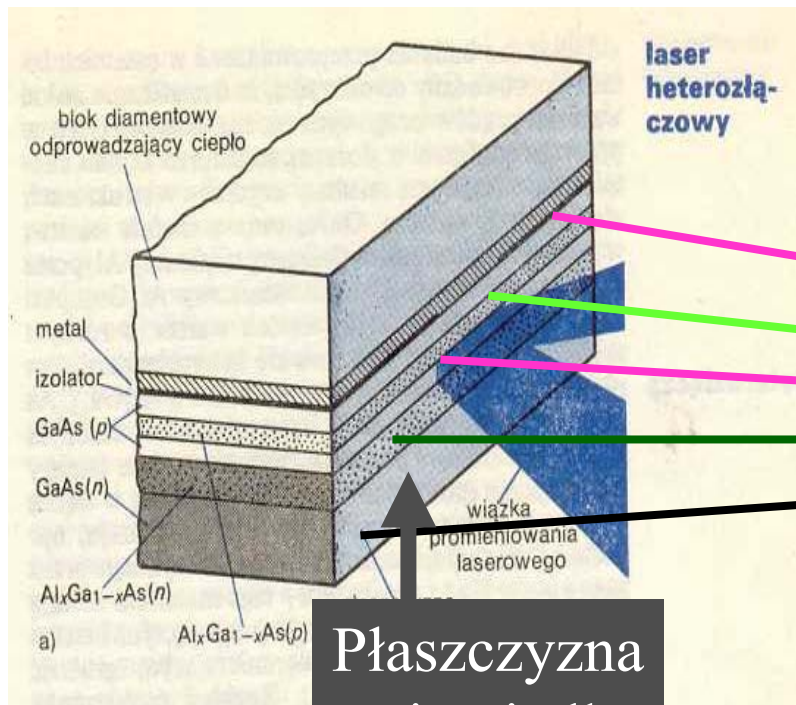
Zasada działania lasera



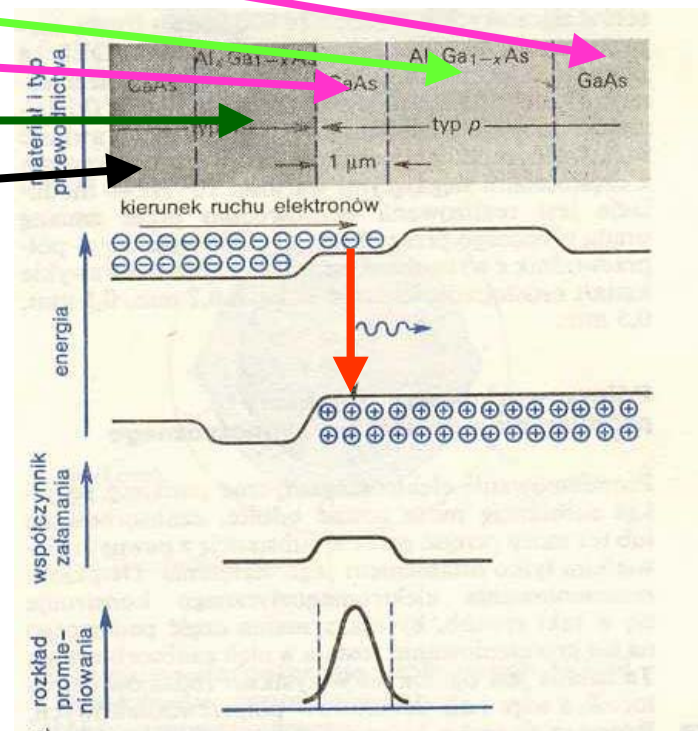
Warunki akcji laserowej cd.



Laser półprzewodnikowy heterozłączowy



Płaszczyzna zwierciadła



Lasery cząsteczkowe

Lasery CO₂: wypełnione mieszaniną CO₂ i azotu.

Azot wykorzystywany jest do pompowania optycznego i wzbudzania pasm oscylacyjno-rotacyjnych w cząsteczkach CO₂. Występuje ok. 100 dyskretnych częstości laserowych o długościach fal ok. 10.6 μm.

Lasery barwnikowe: są to lasery, których substancją czynną są roztwory barwników organicznych.

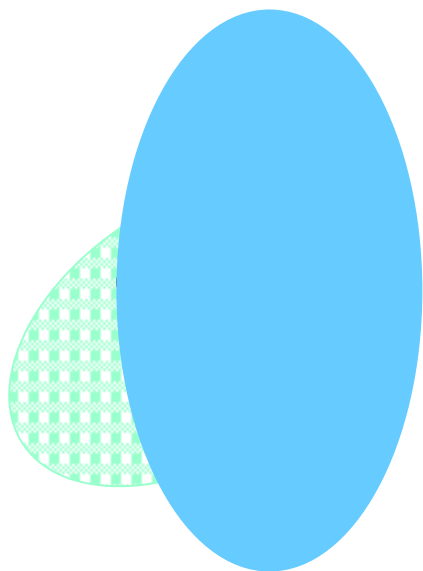
Podstawową zaletą jest przestrajalność: częstość pracy tych laserów można w pewnych granicach zmieniać.

Masery (M- microwave): pierwszy historycznie laser (1955) oparty o drgania inwersyjne cząsteczki NH₃.

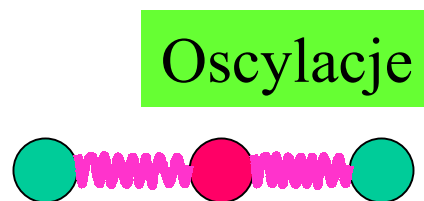
III.2 Dygresja: widma cząsteczkowe

Hierarchia przejść

Energie od największych do najmniejszych

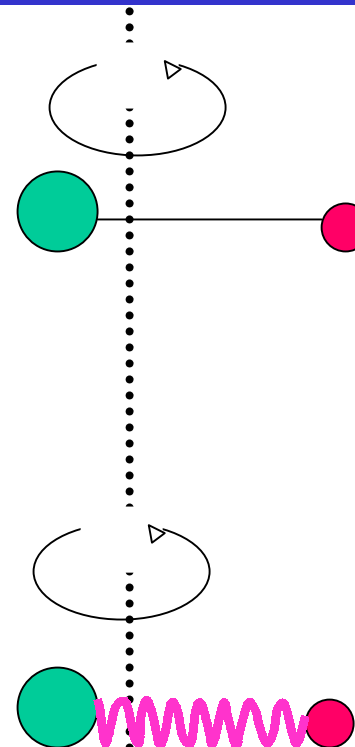


Wzbudzenia elektronowe



Oscylacje

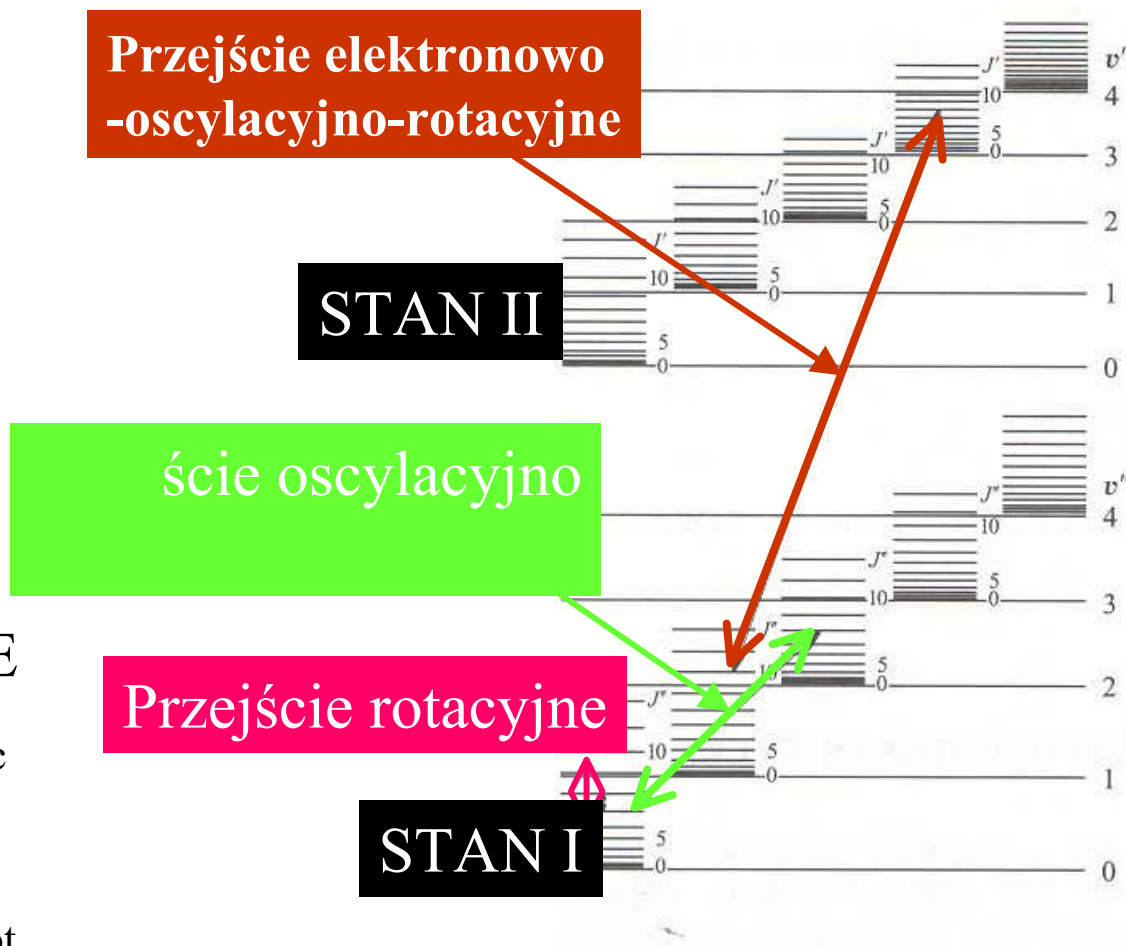
Sztywna rotacja



Rotacja z oscylacją

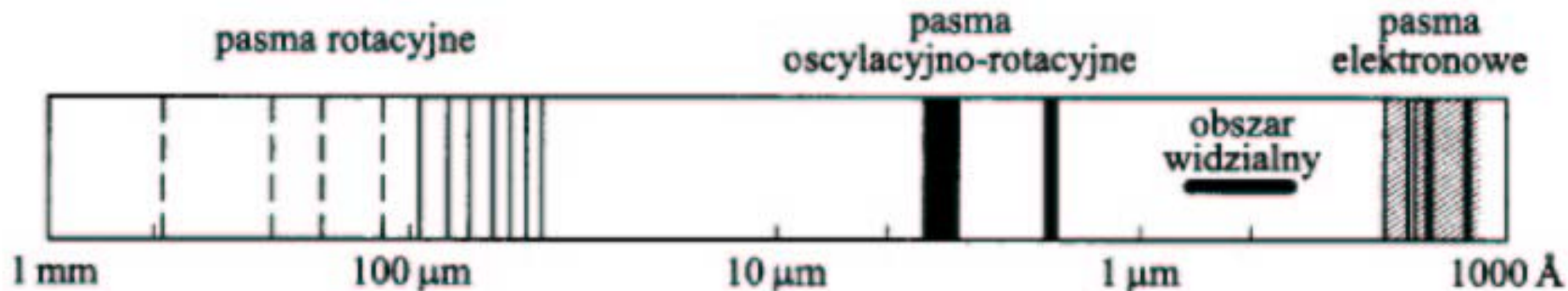
Hierarchia przejść

Całkowita energia wzbudzenia cząsteczki E jest sumą wzbudzeń poziomów rotacyjnych, oscylacyjnych i elektronowych: $E = E_{el} + E_{rot} + E_{osc}$ oraz $E_{el} \gg E_{osc} \gg E_{rot}$



Cząsteczki- obszary widmowe

Położenie pasm widma (małej) cząsteczki HCl



Poziomy oscylacyjne cząsteczki dwuatomowej (CO)

Obserwowane z dużą zdolnością rozdzielczą widmo w okolicy $\tilde{\nu}_1$ jest widmem oscylacyjno-rotacyjnym.

