Podstawy Fizyki III
Optyka z elementami fizyki współczesnej

wykład 27, 19.01.2018

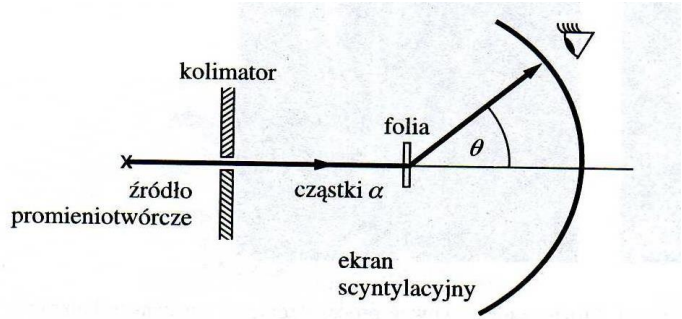
wykład:	Czesław Radzewicz
pokazy:	Mateusz Winkowski, Łukasz Zinkiewicz
ćwiczenia:	Radosław Łapkiewicz

Wykład 26 - przypomnienie

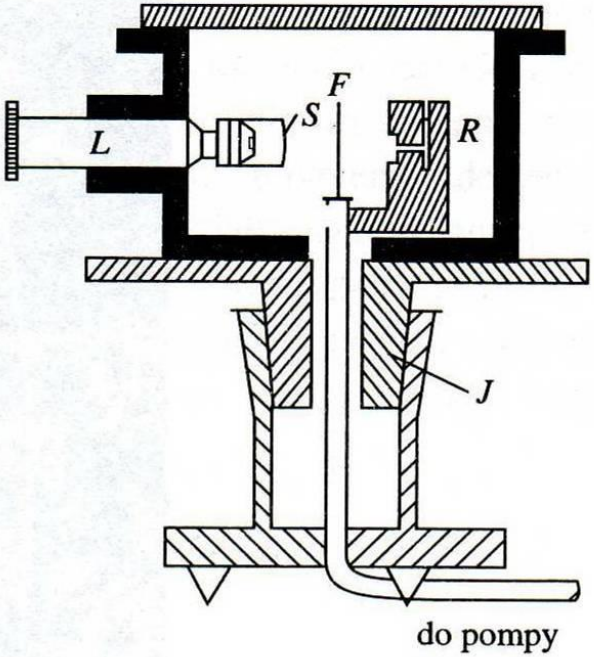
- równanie Schrődingera
- co oznacza funkcja falowa
- stany stacjonarne
- studnie potencjału, 1-D, 3-D
- schodek potencjału
- tunelowanie przez barierę, STM
- oscylator harmoniczny, rotacje cząsteczek

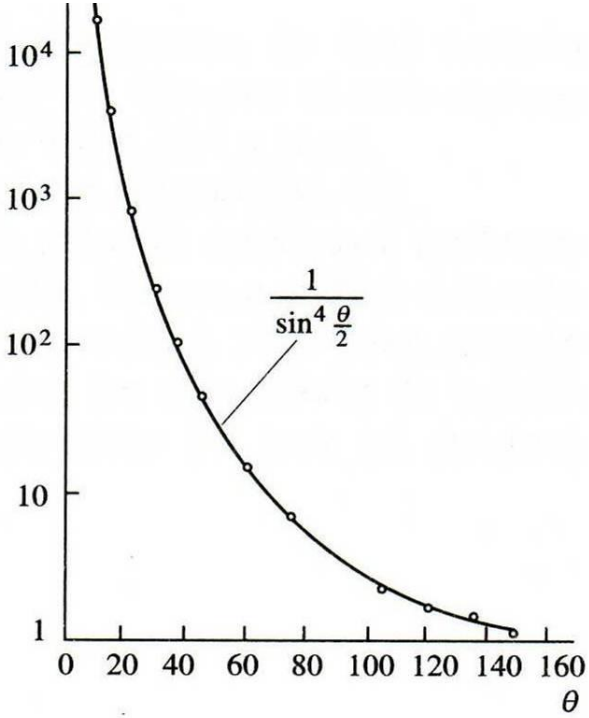
Doświadczenie Rutherforda, 1

1911

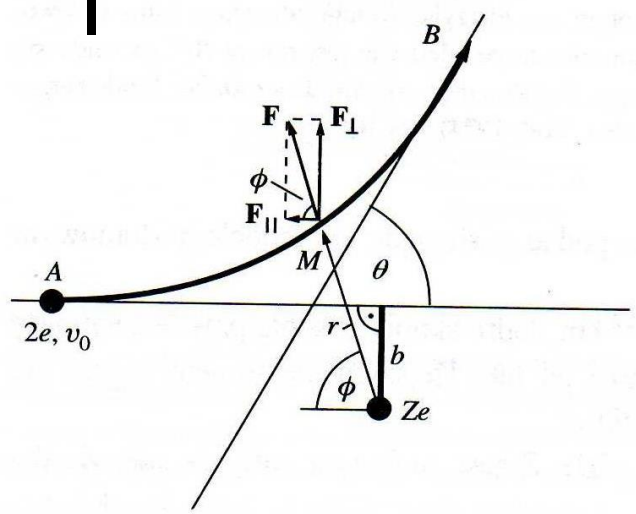


Ernest Rutherford
(1871-1937)





Doświadczenie Rutherforda, 2



1) siła:

$$\vec{F} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\frac{\vec{r}}{r}$$

$$F_\perp = F\sin\phi$$

$$F_\parallel = F\cos\phi$$

2) zachowanie momentu pędu:

$$(mv_0 b)_A = \left(mr^2\frac{d\phi}{dt}\right)_M$$

$$\frac{1}{r^2} = \frac{d\phi}{dt}/v_0 b$$

z 1) i 2) mamy

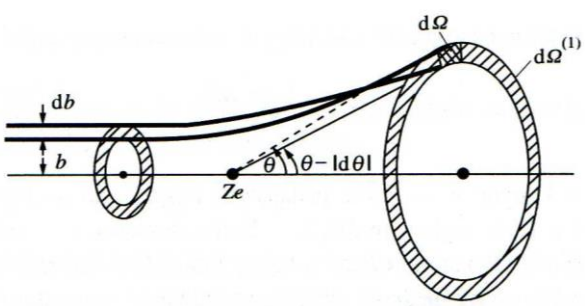
$$m\frac{dv_\perp}{dt} = F_\perp = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r^2}\sin\phi = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{v_0 b}\frac{d\phi}{dt}\sin\phi$$

$$\int_{t_A}^{t_B}\frac{dv_\perp}{dt}dt = \frac{\kappa}{mv_0 b}\int_{t_A}^{t_B}\sin\phi\frac{d\phi}{dt}dt\,, \qquad \kappa = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$$

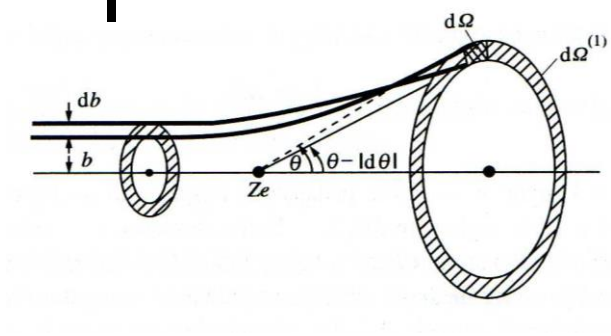
$$\int_0^{v_0\sin\Theta} dv_\perp = \frac{\kappa}{mv_0 b}\int_0^{\pi-\Theta}\sin\phi\,d\phi \Rightarrow v_0\sin\Theta = \frac{\kappa}{mv_0 b}(1+\cos\Theta)$$

...

$$b = \frac{\kappa}{m{v_0}^2}\cot(\Theta/2)$$



Doświadczenie Rutherforda, 3



$$b = \frac{\kappa}{m{v_0}^2}\cot(\Theta/2)$$

$$db = \frac{\kappa}{m{v_0}^2}\frac{1}{\sin^2(\Theta/2)}d\Theta$$

różniczkowy przekrój czynny na rozpraszanie:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega)d\Omega = \frac{\text{liczba czastek rozproszonych w kąt bryłowy } d\Omega \text{ w jednostce czasu}}{\text{natężenie wejściowe}}$$

$$\left.\begin{aligned} 2\pi I b db &= I\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega \\ d\Omega &= 2\pi\sin\Theta d\Theta \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{\frac{d\sigma}{d\Theta} = \frac{b}{\sin\Theta}\left|\frac{db}{d\Theta}\right| = \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2}\right)^2\frac{1}{\sin^4(\Theta/2)}}$$

wynik dla ładunku punktowego

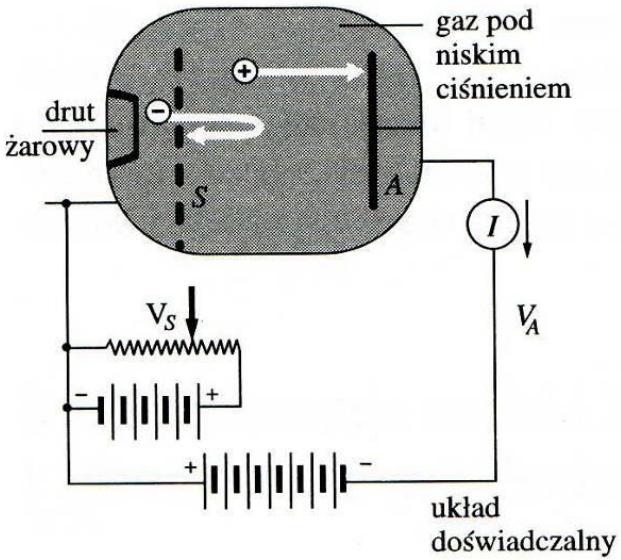
Promień jądra atomowego

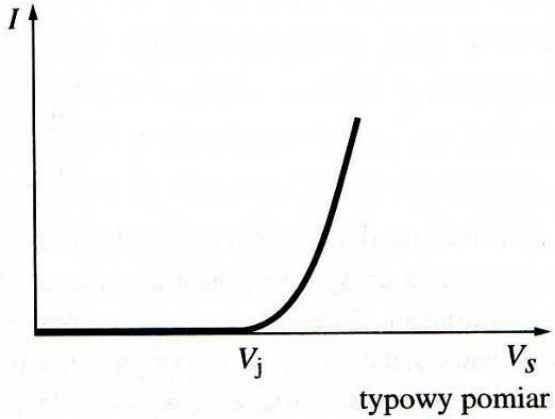
$$R \cong 10^{-15}\text{m}$$

atom jest pusty!

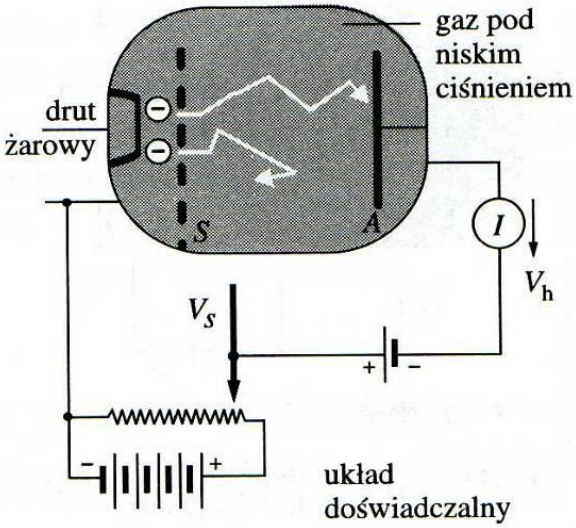
Doświadczenie Franka-Hertza

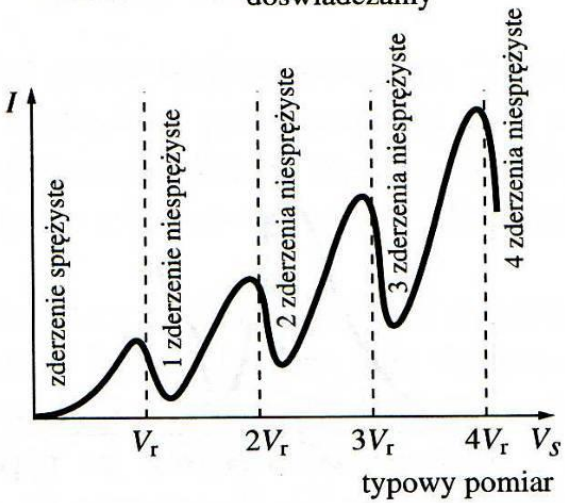
1902 Lenard



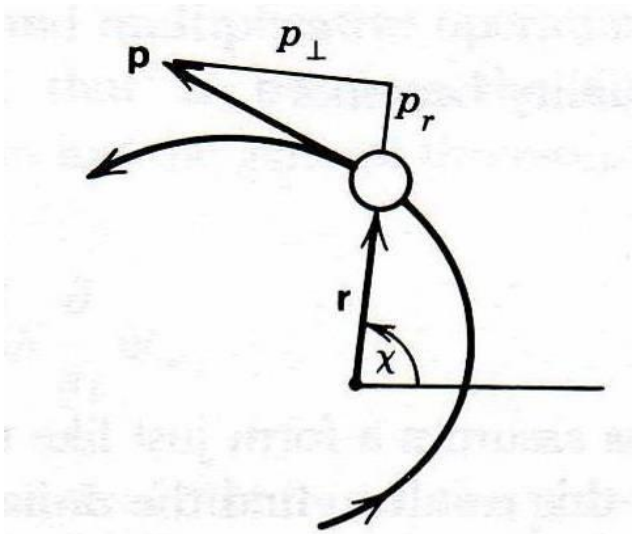


1913 Franck i Hertz





Rotacja i klasyczny moment pędu



klasyczny pęd i moment pędu:

$$\vec{p} = \mu \frac{d\vec{r}}{dt}, \qquad \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

dla sił centralnych moment pędu jest zachowany:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F} = 0$$

trajektoria cząstki leży w płaszczyźnie prostopadłej do $\vec{L}$

Rozkładamy pęd na składową radialną i prostopadłą:

$$p_r = \mu \frac{dr}{dt}, \qquad p_\perp = \mu r \frac{d\chi}{dt}$$

i liczmy energię kinetyczną

$$E_k = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{{p_r}^2 + {p_\perp}^2}{2\mu} = \frac{{p_r}^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

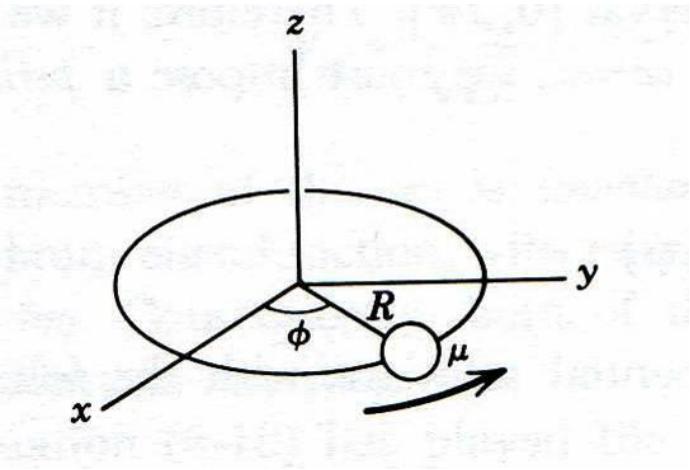
oraz energię całkowitą

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) = \frac{{p_r}^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) = \frac{{p_r}^2}{2\mu} + V_{eff}(r)$$

gdzie $V_{eff}(r) = \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)$ to potencjał efektywny

kwantowy moment pędu, 1

przykład 1 (niefizyczny): kwantowy koralik na okrągłym drucie



(klasyczna) energia koralika to:

$$E = \frac{{p_\perp}^2}{2\mu} = \frac{{L_z}^2}{2\mu R^2}$$

kwantowo:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} = E\psi$$

rozwiązania: $\psi = Ae^{\pm i\lambda\phi}$, $\lambda^2 = \frac{2\mu R^2}{\hbar^2}$

Dodatkowo, żądamy okresowości $\psi(\phi + 2\pi) = \psi(\phi) \rightarrow \lambda = m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

możemy, równocześnie, wyznaczyć dokładnie energię układu i rzut momentu pędu

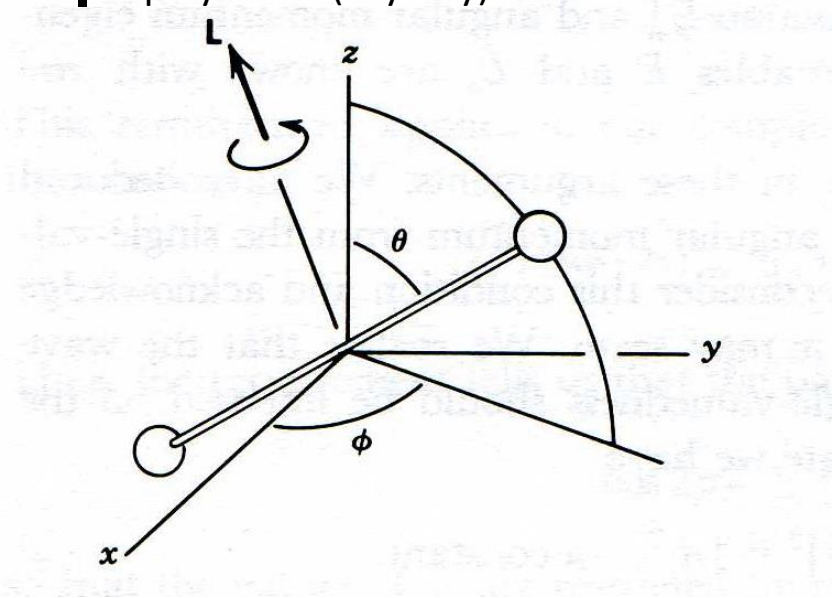
$$E_m = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} m^2$$

$$L_{z,m} = m\hbar$$

Ale dotyczy to nieistniejącego układu

hamiltonian hantli

przykład 2 (fizyczny): hantla



energia kinetyczna obrotu (środek masy pozostaje nieruchomy):

$$\frac{p^2}{2\mu} = \frac{{p_\perp}^2}{2\mu}$$

ale:

$$p_\perp = \frac{L}{r}$$

Zatem

$$\frac{p^2}{2\mu} = \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

$$L^2 = {L_x}^2 + {L_y}^2 + {L_z}^2$$

$$\left.\begin{aligned} L_z = xp_y - yp_x \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(r\sin\Theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial y} - r\sin\Theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial x}\right) \\ \frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{\partial x}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial z} = -r\sin\Theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial y} + r\sin\Theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}\right\} \quad L_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

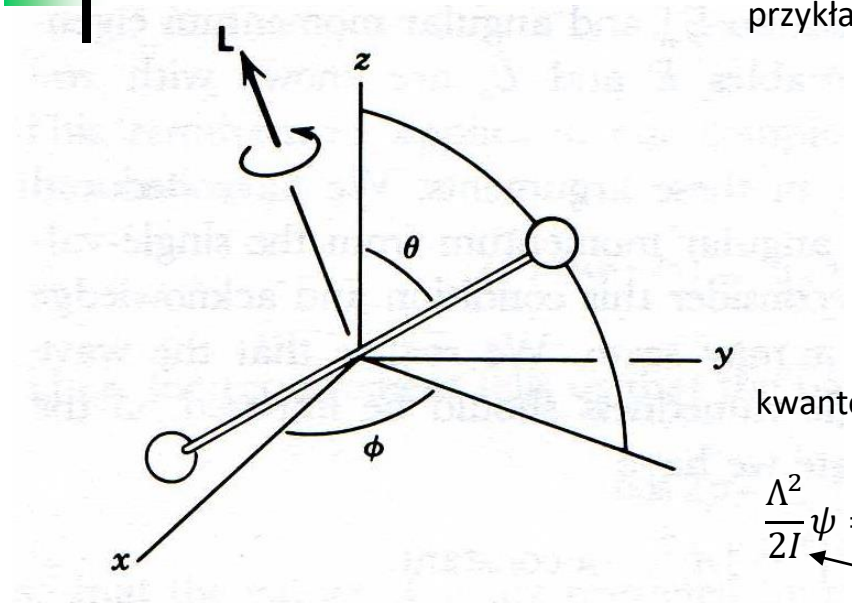
$$L_x \to \ldots$$

$$L_y \to \ldots$$

$$\boxed{\Lambda^2 \to -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta} + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)}$$

operator momentu pędu

kwantowy moment pędu, 2



przykład 2 (fizyczny): hantla

(klasyczna) energia hantli to:

$$E = \frac{L^2}{2I}$$

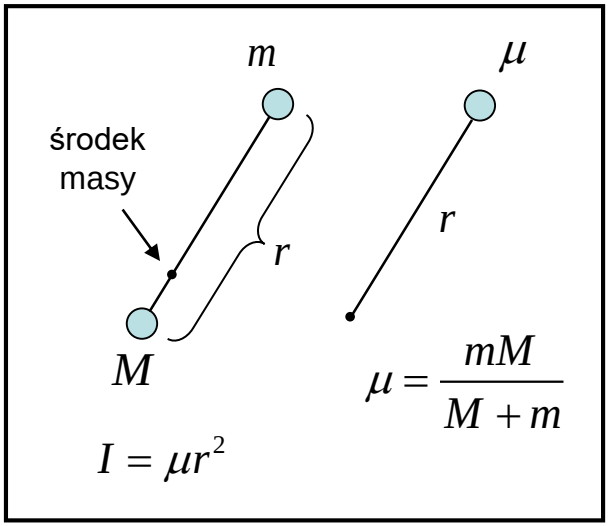
moment pędu

moment bezwładności

kwantowo:

$$\frac{\Lambda^2}{2I}\psi = E\psi$$

moment pędu



$$\Lambda^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta} + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

+ bardzo wredna matematyka ...

rozwiązania: harmoniki sferyczne Y_{lm}, $l = 0,1,2,\ldots$, $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$

$l = 0 \;\; m = 0$

$l = 1 \;\; m = -1,01$

$l = 2 \;\; m = -2,-1,0,1,2$

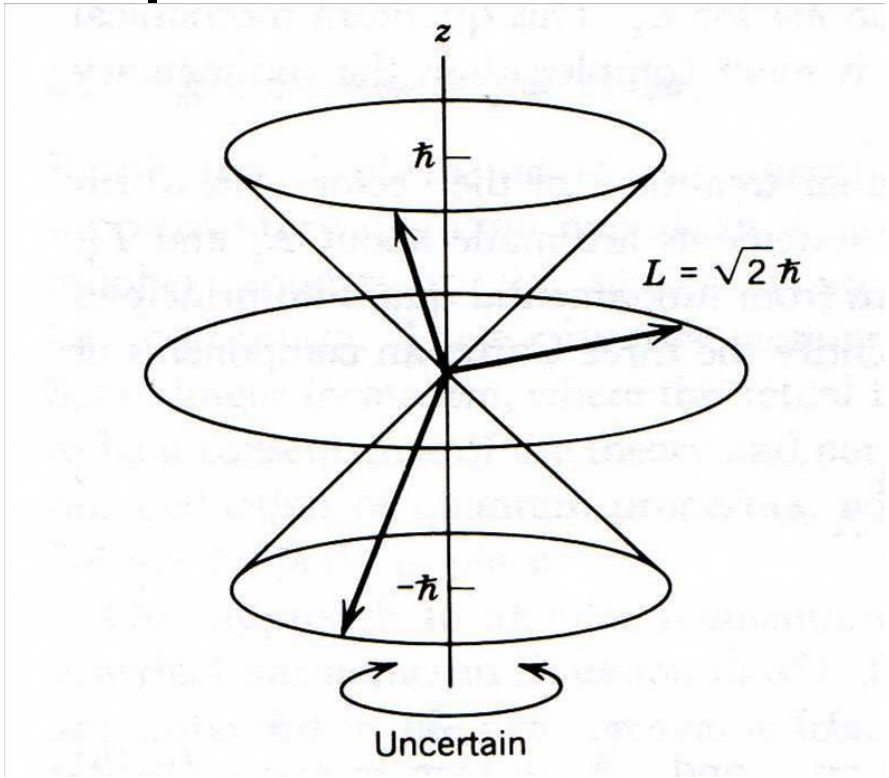
...

$$\Lambda^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}$$

$$L_z Y_{lm} = mY_{lm}$$

$$E_{lm} = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

kwantowy moment pędu, 3



$$l = 1$$
$$m = -1,0,1$$

Równocześnie możemy wyznaczyć tylko całkowity moment pędu *l* oraz jego rzut na jedną z osi m (zwyczajowo jest to oś z). Nie wiemy nic na temat dwóch pozostałych składowych.
Teoretycy mówią wtedy o operatorach, które nie komutują.

widma rotacyjne cząsteczek

$$\Lambda^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}$$

$l =$

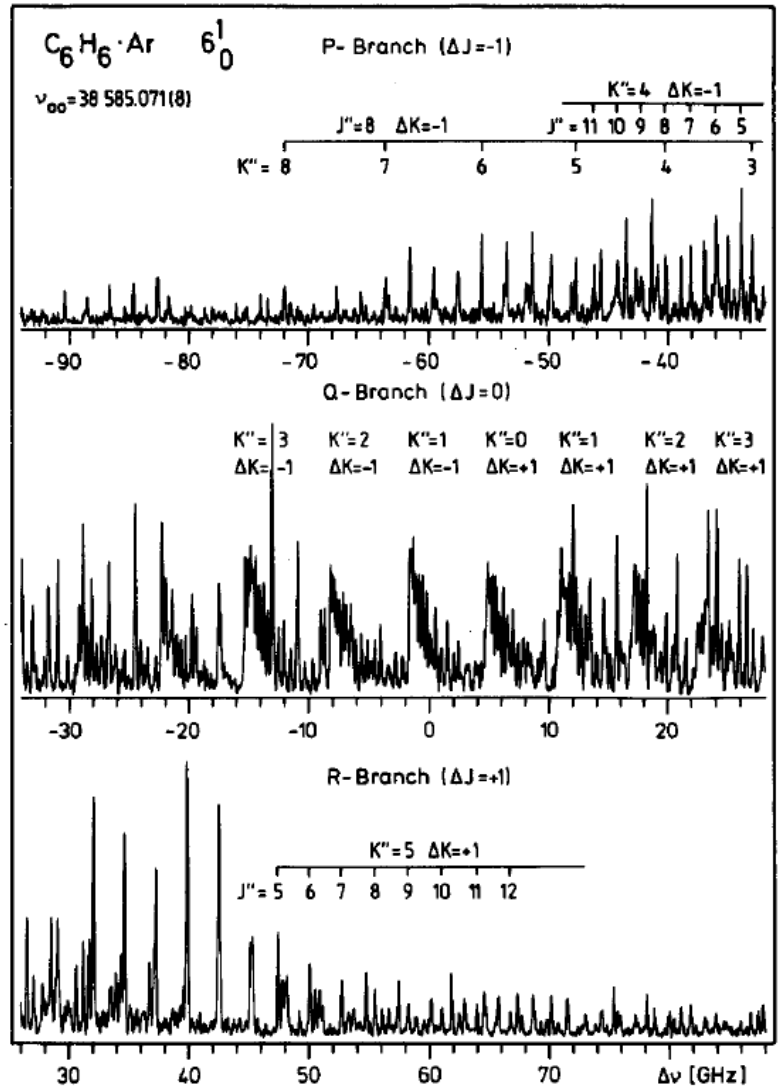
....

3

2

1

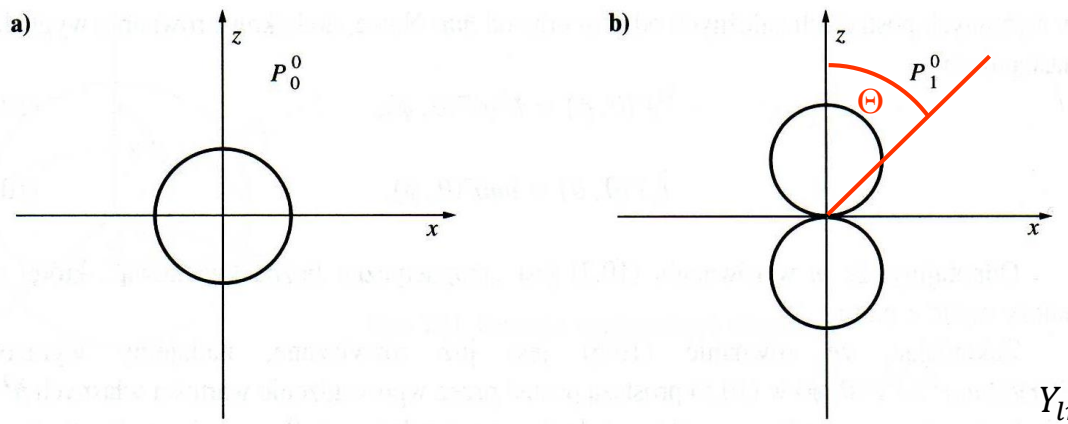
0



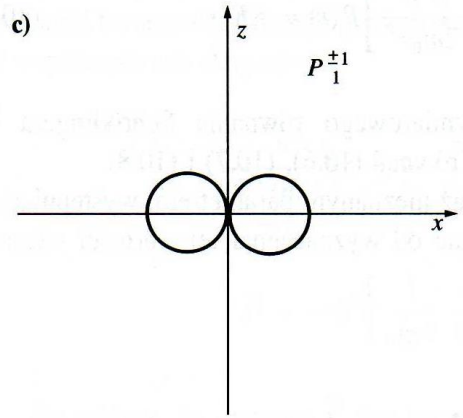
T. Weber et al. J. Chem. Phys. 92, 90-96 (1990)

harmoniki sferyczne, 1

2 liczby kwantowe: l, m



$$Y_{lm} = e^{im\phi} P_l^{\,m}(\Theta)$$



$$l = 0 \quad Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$l = 1 \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\Theta \,, Y_{1\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\Theta \, e^{\pm i\phi}$$

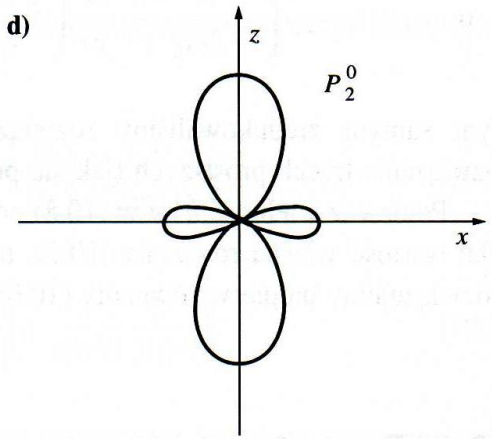
harmoniki sferyczne, 2

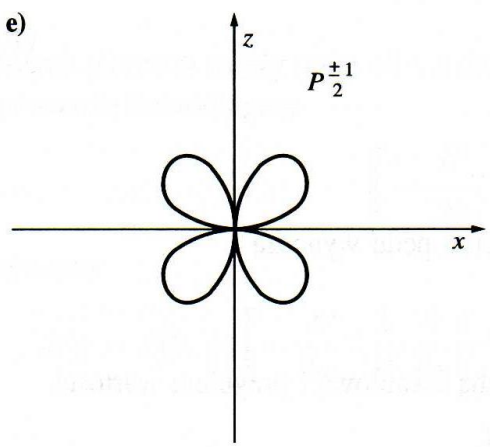
$l = 2$

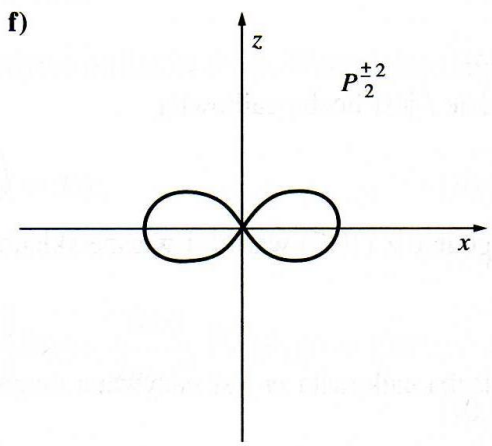
$$Y_{20} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}(3\cos^2\Theta - 1)$$

$$Y_{2\pm1} = \pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin\Theta\cos\Theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{2\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\Theta e^{\pm i2\phi}$$

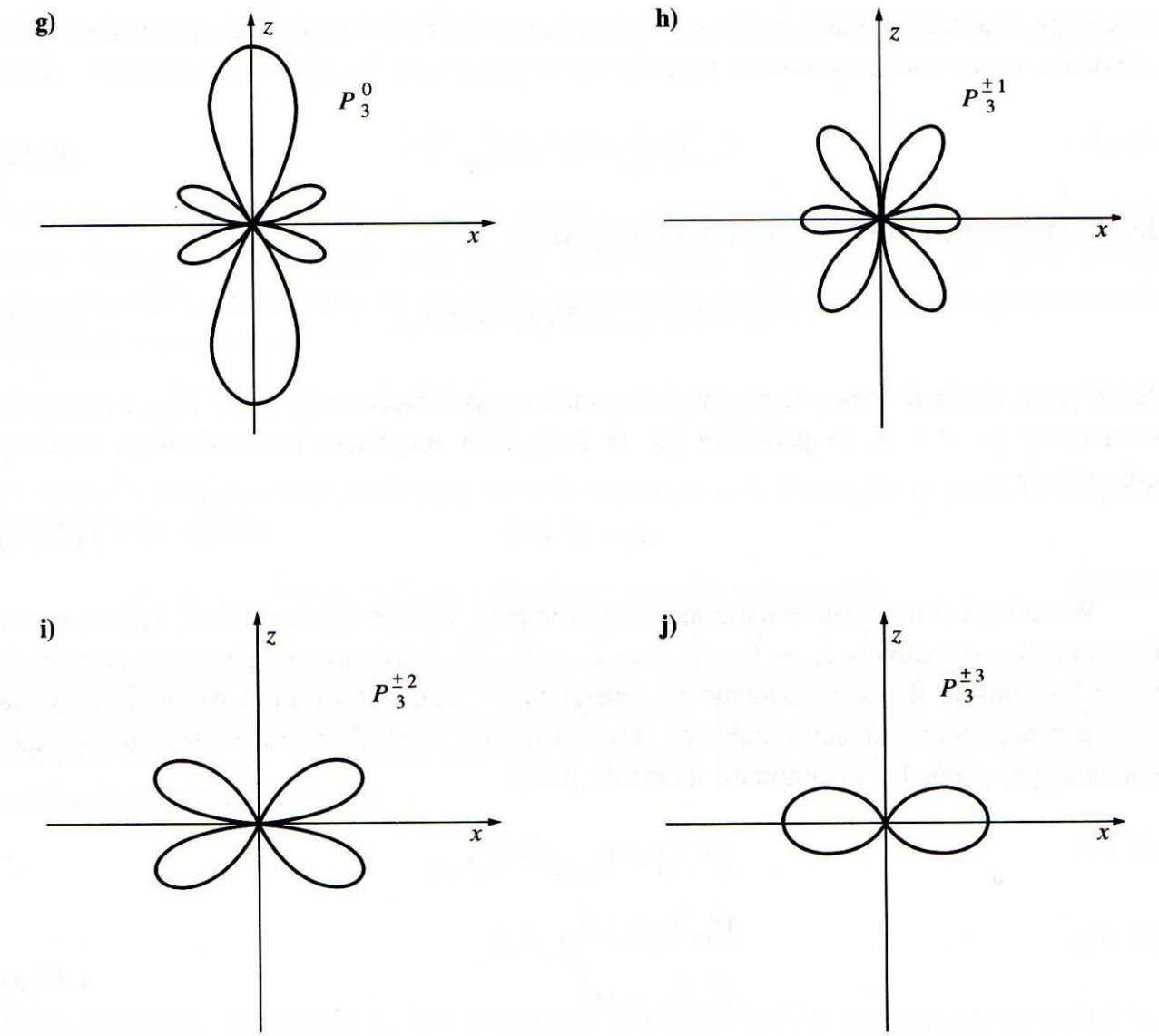




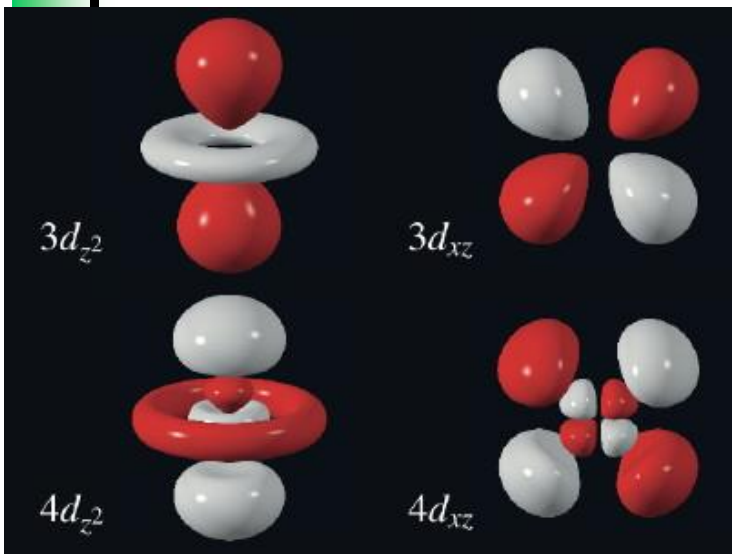


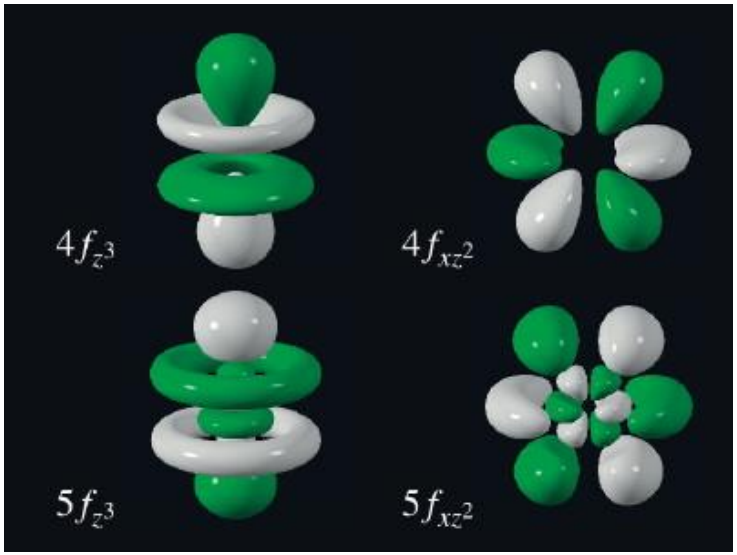
harmoniki sferyczne, 3

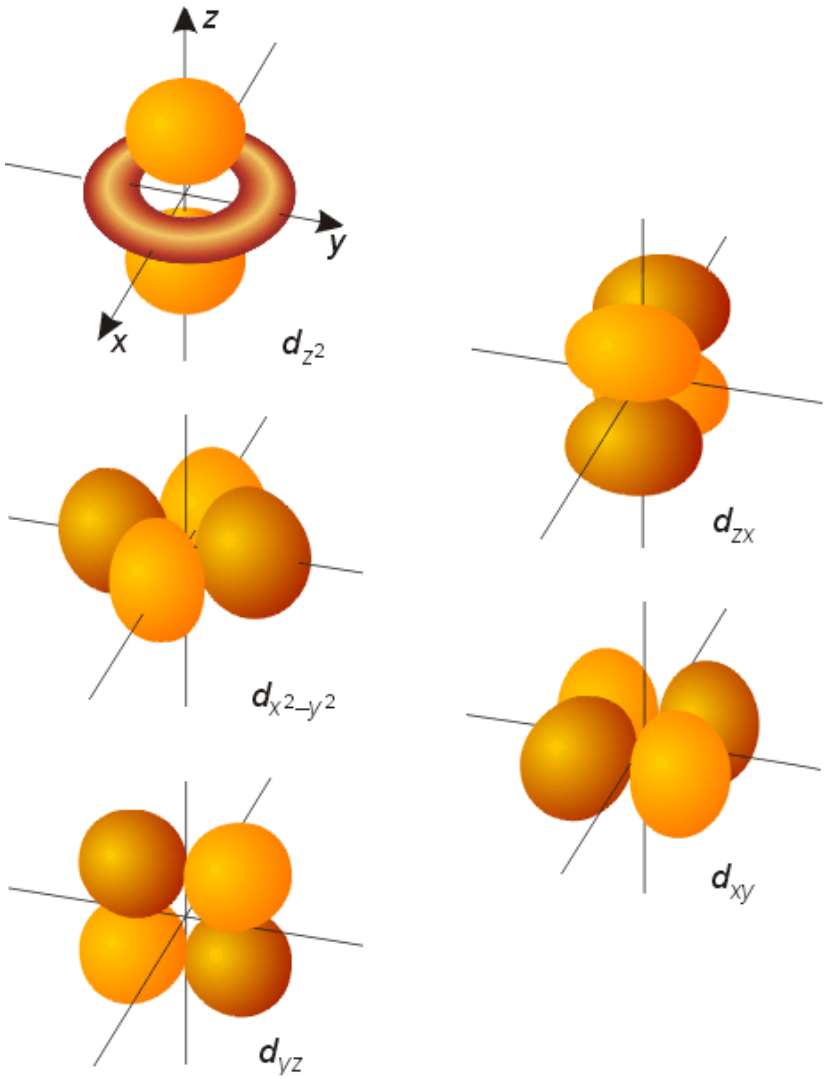
$l = 3$



orbitale atomowe





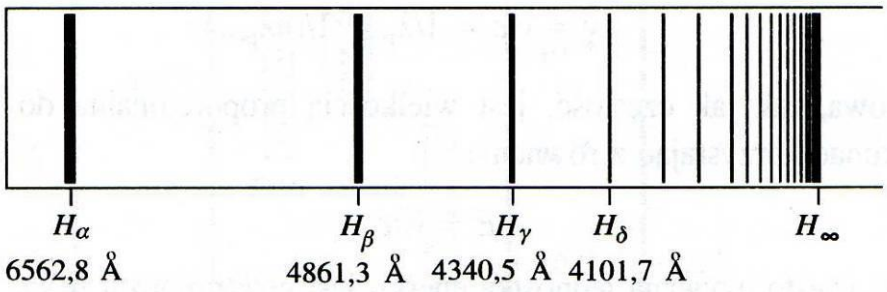


widmo fluorescencji atomu wodoru

1855 Balmer, empiryczny wzór na część widma wodoru, tzw. serię Balmera

$$\lambda = \frac{n^2}{n^2 - 4} G \quad n = 3,4,5, \ldots$$

$$G = const$$



$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$R_H \cong 109677.58 \text{ cm}^{-1}$$

stała Rydberga

1889, Rydberg podaje ogólny wzór na widmo atomu wodoru

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \qquad m < n$$

m, n -główna liczba kwantowa

n \ n'	1 Lyman	2 Balmer	3 Paschen	4 Brackett
2	1216 Å 82 257 cm^{-1}			
3	1026 Å 97 466 cm^{-1}	6563 Å 15 233 cm^{-1}		
4	973 Å 102 807 cm^{-1}	4861 Å 20 565 cm^{-1}	18 751 Å 5333 cm^{-1}	
5	950 Å 105 263 cm^{-1}	4340 Å 23 033 cm^{-1}	12 818 Å 7801 cm^{-1}	40 500 Å 2467 cm^{-1}
Rok odkrycia	1906	1885	1908	1922

Model atomu wodoru wedle Bohra, 1

1913 model Bohra - analog układu słonecznego

równowaga siły ośrodkowej i elektrostatycznej:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = mr\omega^2$$

$$E = E_{kin} + E_{pot}$$

$$E = \frac{1}{2}mr^2\omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Postulaty Bohra:

1. Klasyczny ruch ale dyskretne orbity, warunek $mvr = n\hbar,\ n = 0,1,2 \ldots \Rightarrow r_n, E_n$
2. Na orbitach ruch bezpromienisty
3. Przejścia promieniste $\hbar\omega = E_m - E_{m,}\ E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$
4. Stała Rydberga R wzięta z doświadczenia
5. Zasada korespondencji – w granicy dostajemy fizykę klasyczną

Model atomu wodoru wedle Bohra, 2

$$R = \frac{me^4}{8{\epsilon_0}^2 h^3 c}$$

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

„rozmiar” atomu wodoru:

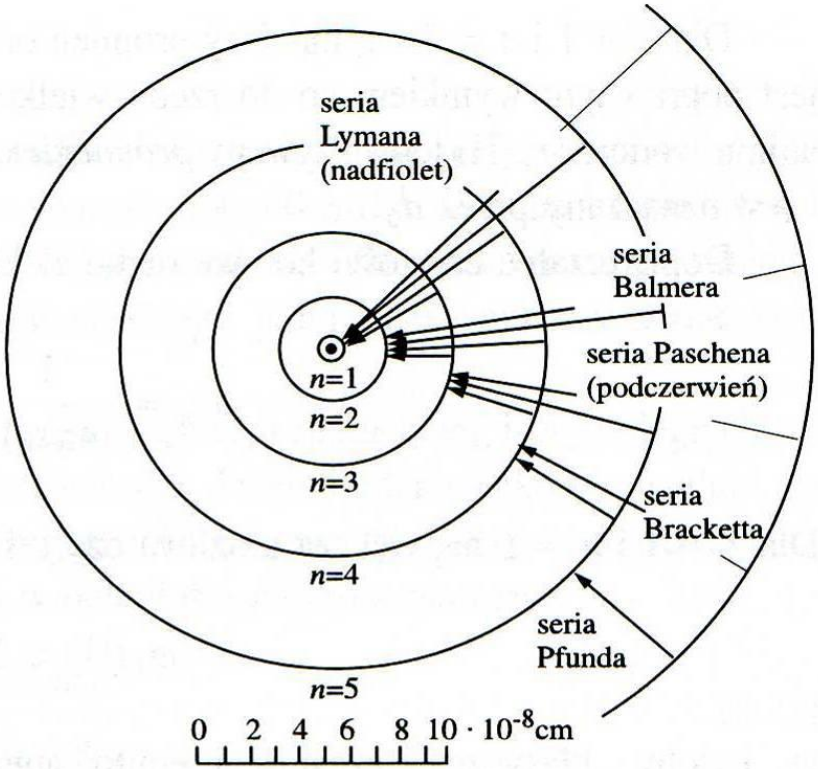
$$r_1(H) \cong 0.529\text{Å} = 0.0529\text{nm}$$

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

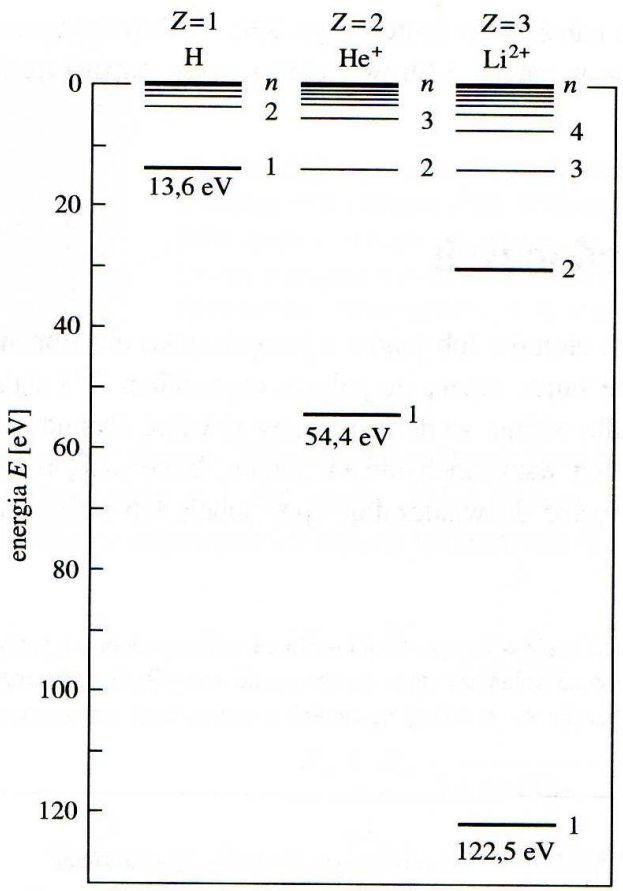
$$E_1 = \frac{me^4}{32\pi^2 {\epsilon_0}^2 \hbar^2}$$

energia jonizacji atomu wodoru:

$$E_1 = \frac{me^4}{32\pi^2 {\epsilon_0}^2 \hbar^2} \cong 13.59\text{eV}$$



jony wodoropodobne



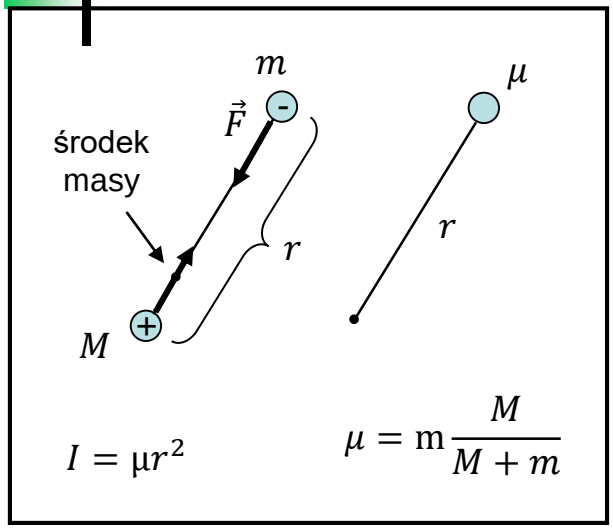
$$E_{n,Z} = Z^2 E_{n,H}$$

Tabela 8.7. Porównanie linii widmowych z serii Balmera widma wodoru z liniami serii Pickeringa widma jonu helu, w Å

He^+	H
6560,1	6562,8 (H_α)
5411,6	
4859,3	4861,3 (H_β)
4561,6	
4338,7	4340,5 (H_γ)
4199,9	
4100,0	4101,7 (H_δ)

	$1+\frac{m_0}{m_{jądra}}$	$R_{jądra}$ [cm^{-1}]	λ_{12} (obliczone) [Å]	λ_{12} (zmierzone) [Å]
^1H	1,00054447	109 677,6	1215,66	1215,66
^2H	1,00027148	109 707,4	1215,33	1215,33
$^4He^+$	1,00013704	109 722,3	303,8	303,6
$^7Li^{2+}$	1,00007817	109 728,7	135,0	135,0
$^9Be^{3+}$	1,00006086	109 730,6	75,9	75,9
$^{10}B^{4+}$	1,00005477	109 731,3	48,6	48,6
$^{11}B^{4+}$	1,00004982	109 731,8		
$^{12}C^{5+}$	1,00004571	109 732,3	33,7	33,7

atom wodoru wedle Schrődingera, 1



m - masa elektronu
M - masa protonu

siła elektrostatyczna, potencjał:

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

potencjał jest centralny – można wprowadzić potencjał efektywny :

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) = \frac{{p_r}^2}{2\mu} + \underbrace{\frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)}_{\text{efektywny potencjał}} = \frac{{p_r}^2}{2\mu} + V_{eff}(r)$$

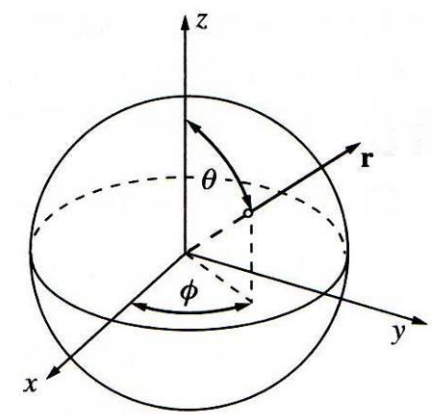
$$V_{eff}(r) = \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

r-nie Schrodingera:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(r)\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

atom wodoru wedle Schrodingera, 2

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi(\vec{r},t)+V(r)\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$



szukamy rozwiązań stacjonarnych:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi(\vec{r})+[V(r)-E]\psi(\vec{r})=0$$

w sferycznym układzie odniesienia:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\Lambda^2\right)\psi(\vec{r})+[V(r)-E]\psi(\vec{r})=0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi(\vec{r})+\left[V_{eff}(r)-E\right]\psi(\vec{r})=0$$

szukamy rozwiązań iloczynowych:

$$\psi(\vec{r})=\mathrm{R(r)Y}(\Theta,\phi)$$

$$-\Lambda^2 Y=\lambda Y$$

$$-\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi(\vec{r})+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left[E-V_{eff}(r)\right]\psi(\vec{r})=0$$

wredne rachunki ...

atom wodoru wedle Schrodingera, 3

$$-\Lambda^2 Y = \lambda Y \quad \Rightarrow \quad \lambda_{lm} = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1), \quad Y_{lm}$$

Część kątowa f.f.: $-\Lambda^2 Y = \lambda Y \Rightarrow \lambda_{lm} = \frac{\hbar^2}{2\mu} l(l+1),\ Y_{lm}$

harmoniki sferyczne

Część radialna f.f.:

$$-\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi(\vec{r}) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left[E - V_{eff}(r)\right]\psi(\vec{r}) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$R_{nl}(r), E_{nl} = \frac{\mu}{m}\frac{E_0}{n^2}$$

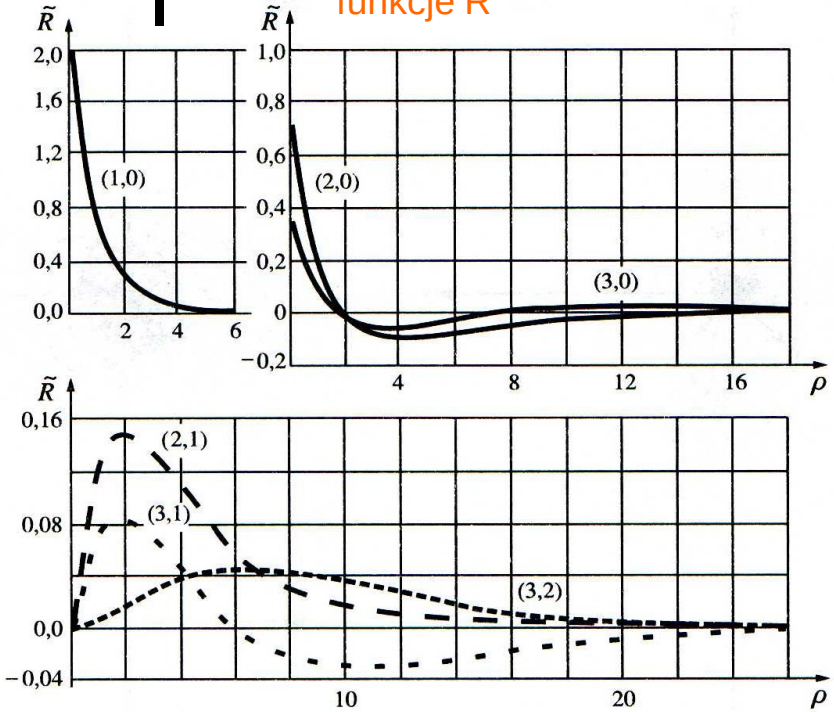
$$E_0 = \frac{me^4}{32\pi^2 {\epsilon_0}^2 \hbar^2}$$

główna liczba kwantowa

energia atomu <u>nie</u> zależy od l - degeneracja poziomów energetycznych

funkcja radialna

funkcje R



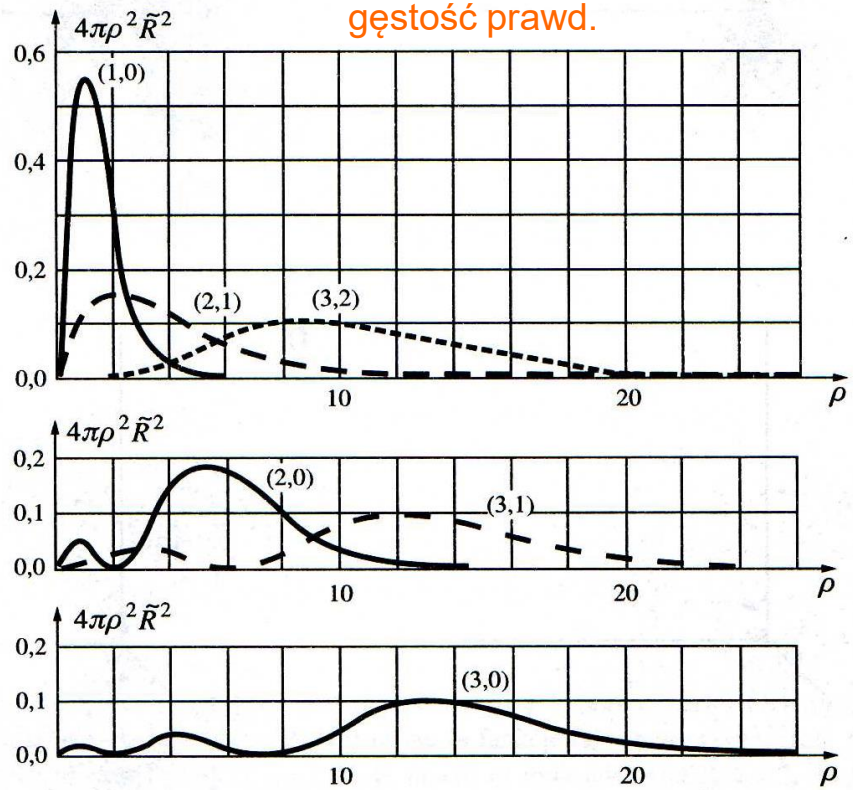
$$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-\varrho}$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} (1 - \varrho/2) e^{-\varrho}$$

$$\varrho = \frac{r}{a}$$

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$$

gęstość prawd.

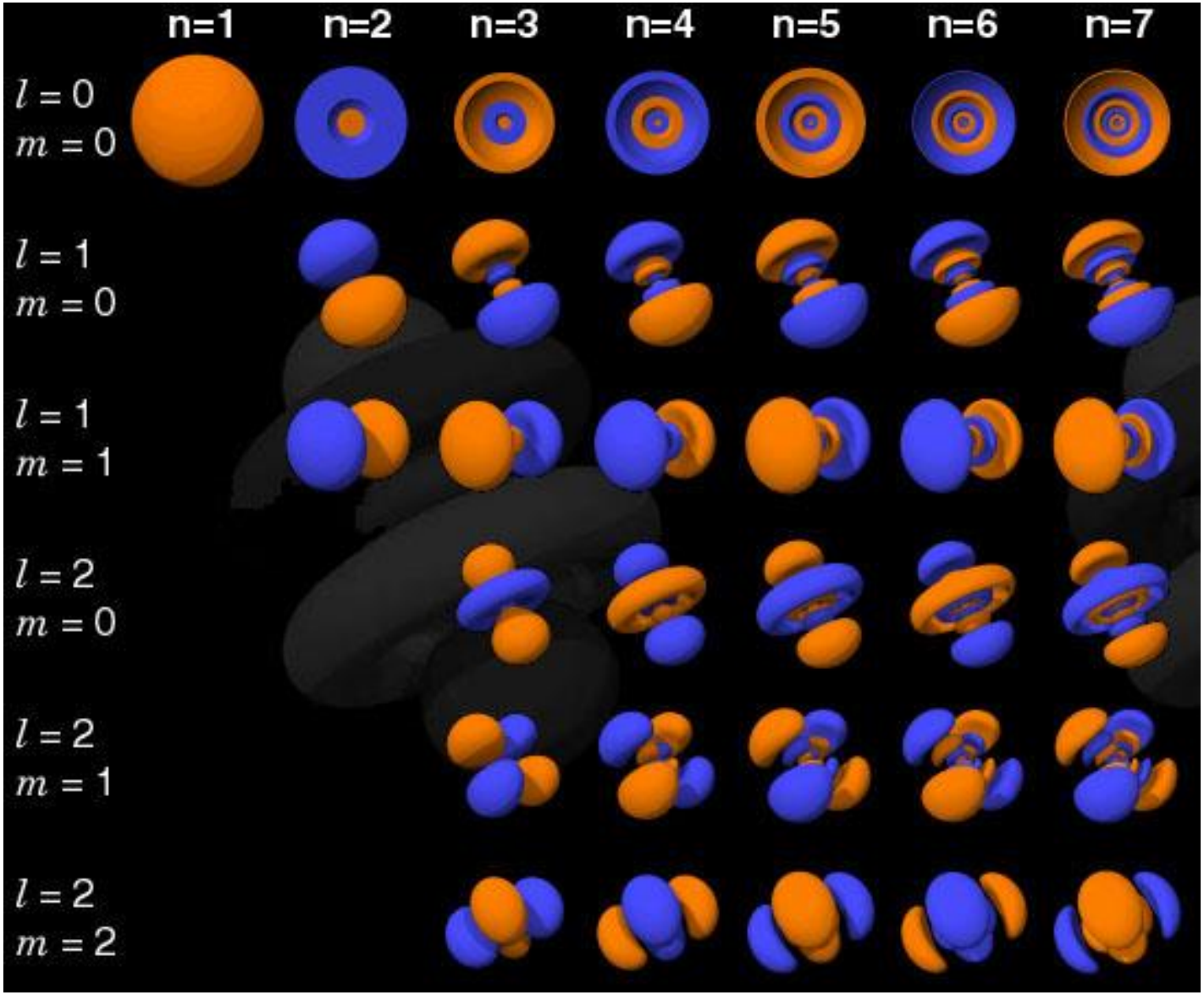


$$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a^3}} \left(1 - \frac{2}{3}\varrho + \frac{2}{27}\varrho^2\right) e^{-\varrho}$$

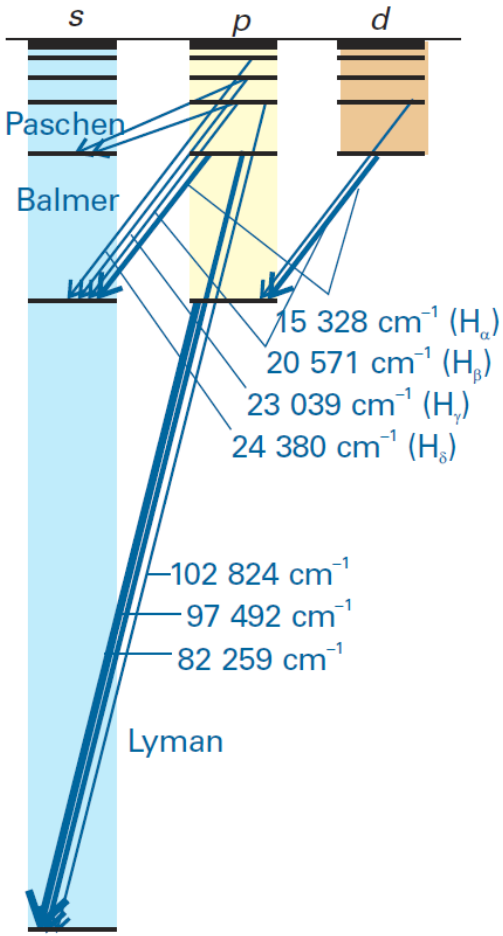
$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a^3}} \varrho \left(1 - \frac{\varrho}{6}\right) e^{-\varrho}$$

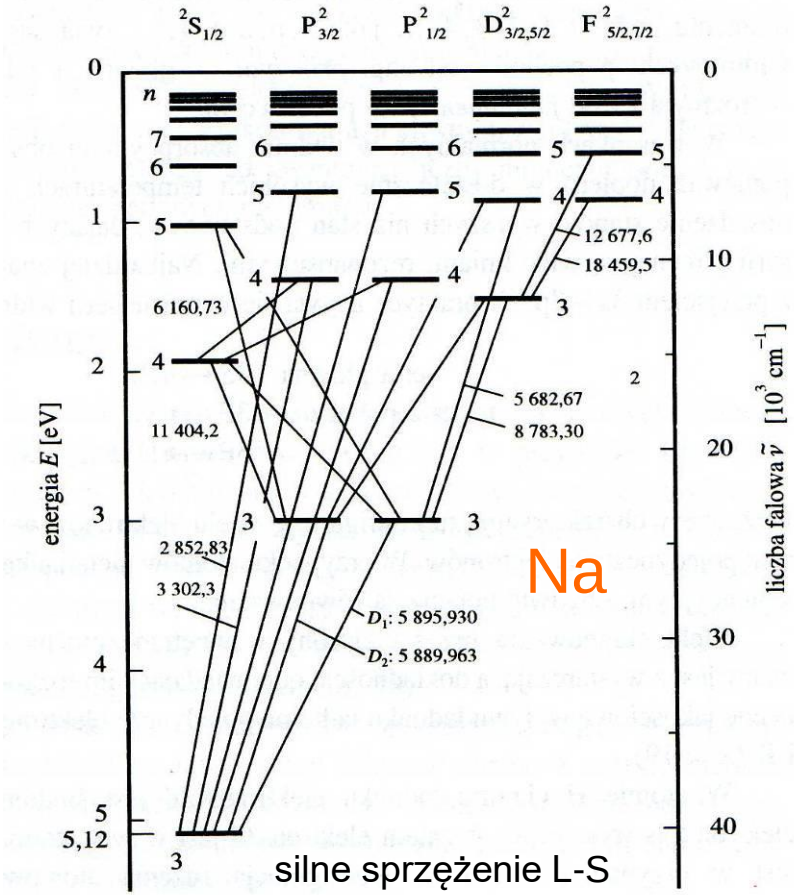
$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a^3}} \varrho^2 e^{-\varrho}$$

f. falowe atomu wodoru, 3D



Diagramy Grotriana





konwencja

l	0	1	2	3
nazwa	S	P	D	F

orbitalny moment pędu

spin

atomy wielo-ektronowe

- powłoki atomowe, na przykład: 1s, 2s, 2p, ….

główna liczba kwantowa

orbitalna liczba kwantowa

Nie są to powłoki jonów wodoropodobnych; energia potencjalna kolejnych elektronów jest mniejsza bo mamy ekranowanie.

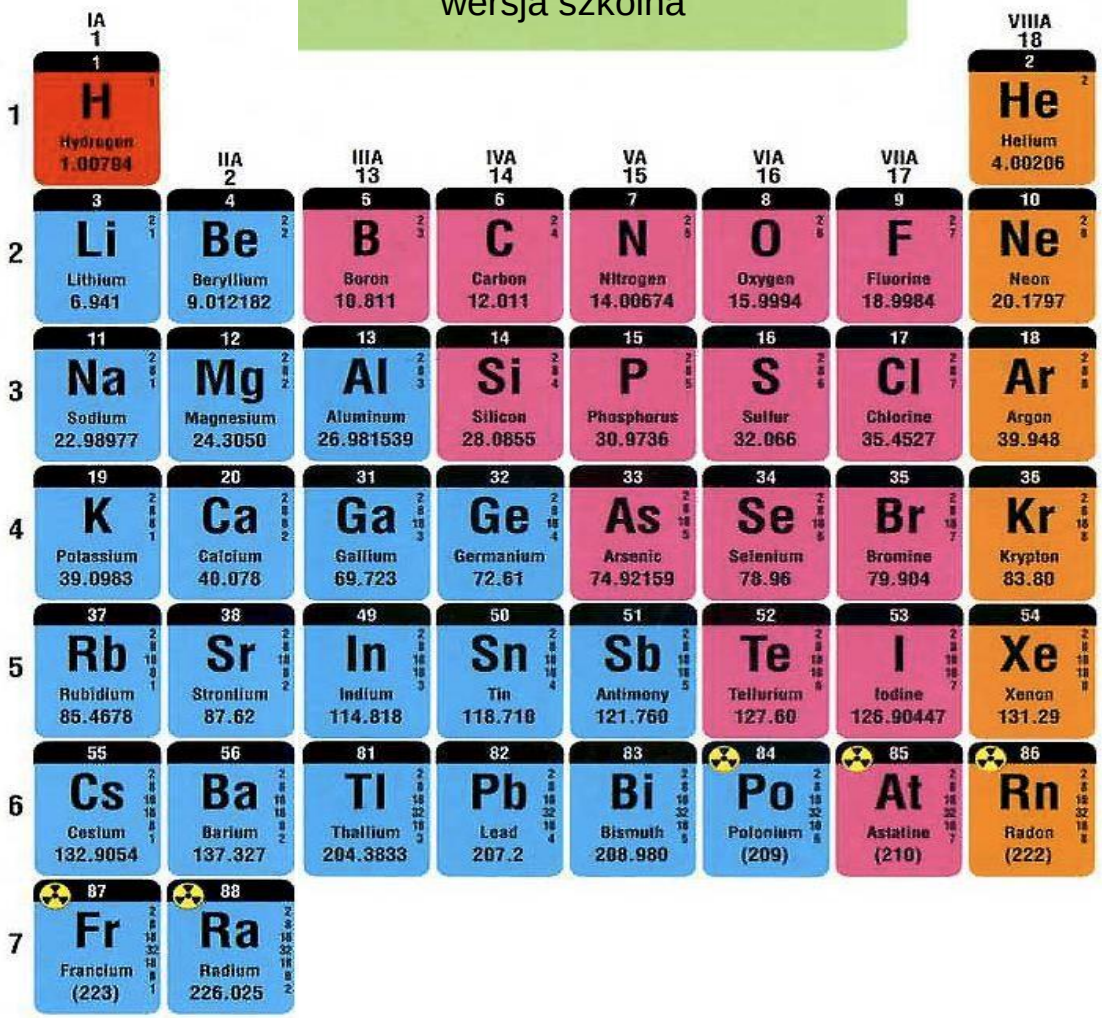
Synoptic table 10.2* Effective nuclear charge, $Z_{eff} = Z - \sigma$

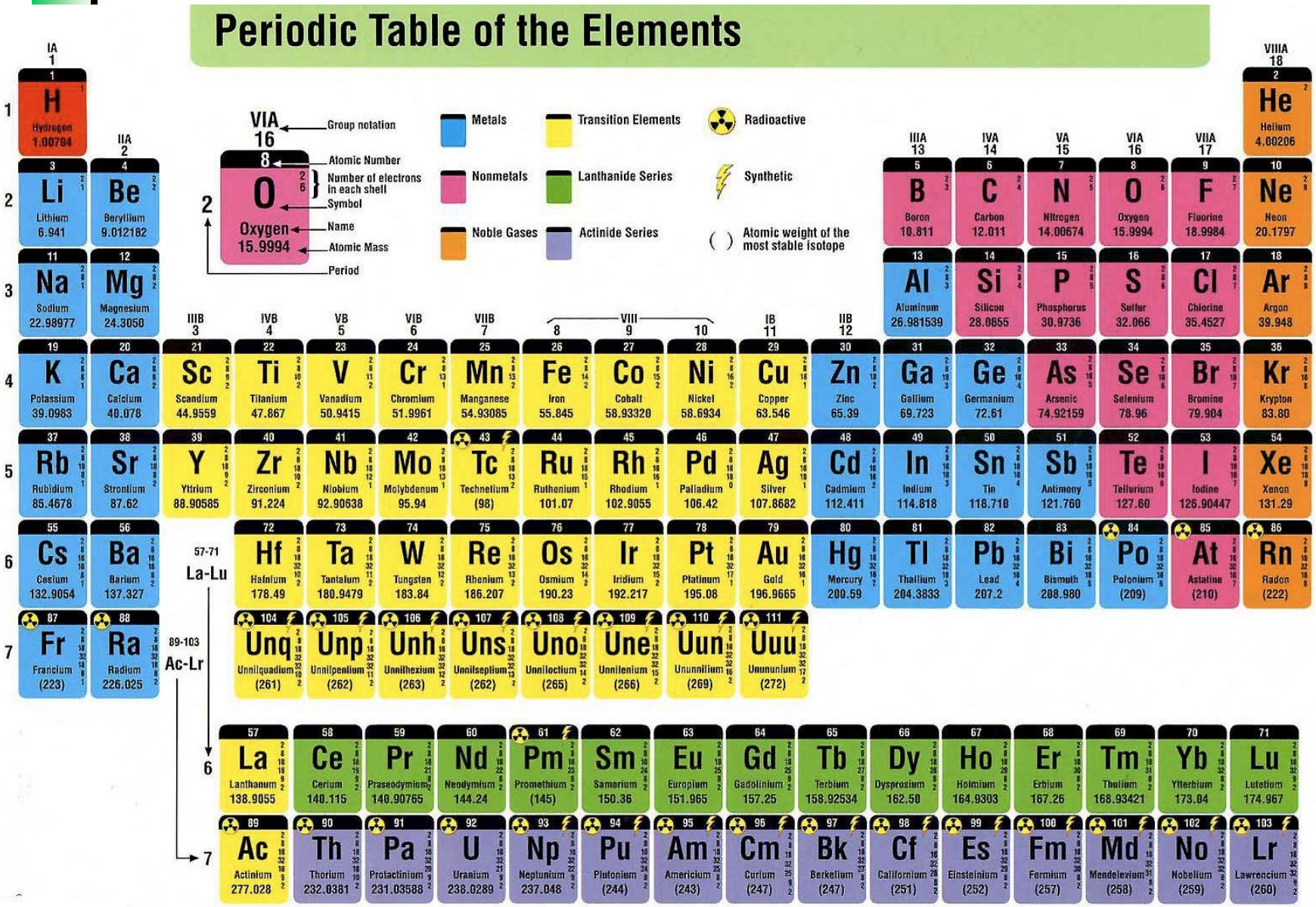
Element	Z	Orbital	Z_{eff}
He	2	1*s*	1.6875
C	6	1*s*	5.6727
		2*s*	3.2166
		2*p*	3.1358

- podpowłoki atomowe, $2l + 1$
- reguła Pauli'ego (Wolfgang Pauli, 1900-1950): na danej podpowłoce mogą być co najwyżej dwa elektrony. Reguła Pauli'ego jest szczególnym przypadkiem statystyki fermionów czyli cząstek o spinie ułamkowym.
- zamknięte powłoki – gazy szlachetne
- kolejność obsadzania popowłok atomowych: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s
- przykład: atom węgla – 6 elektronów. Konfiguracja elektronowa: $1s^2 2s^2 2p^2$.

tablica Mendelejewa dla dzieci

wersja szkolna



1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s

tablica Mendelejewa dla dorosłych