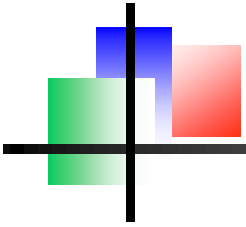


Podstawy Fizyki IV

Optyka z elementami fizyki współczesnej

wykład 26, 28.05.2012

wykład:	Piotr Fita
pokazy:	Radosław Chrapkiewicz, Filip Ozimek
ćwiczenia:	Ernest Grodner

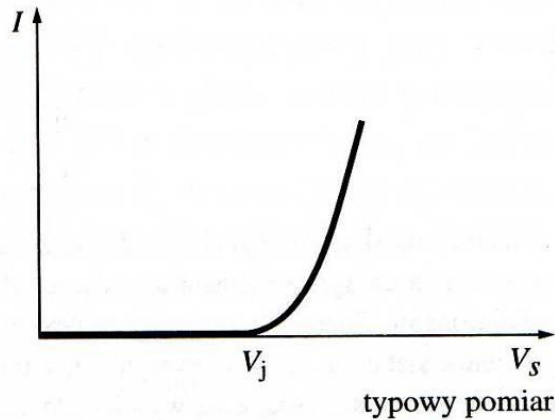
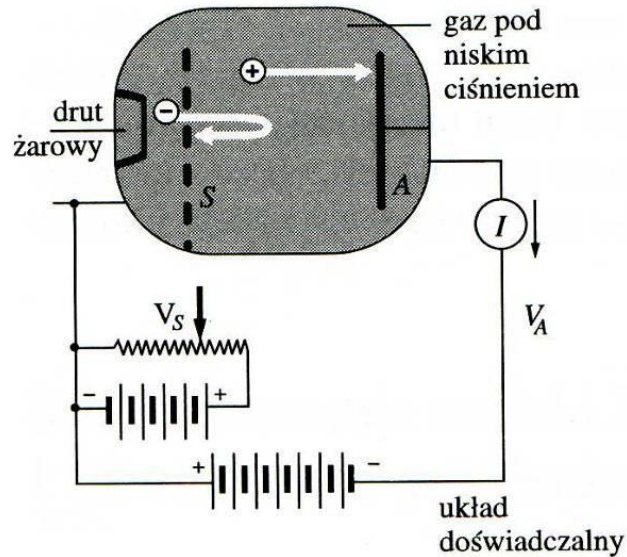


Wykład 26 - przypomnienie

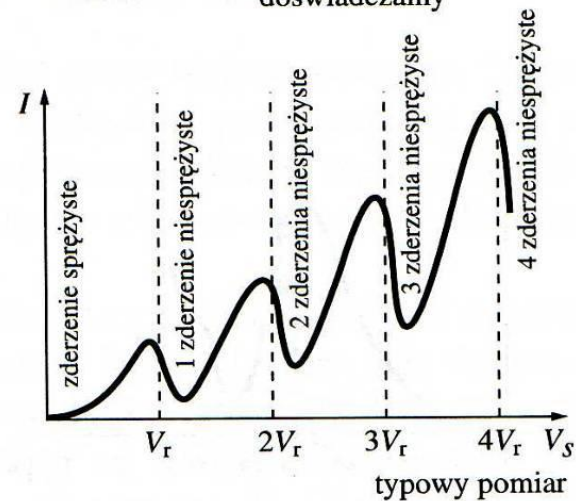
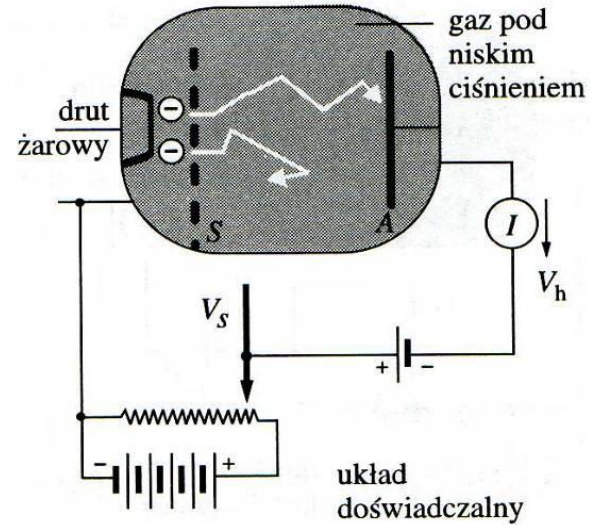
- studnie potencjału, 1-D, 3-D
- schodek potencjału
- tunelowanie przez barierę, STM
- oscylator harmoniczny, rotacje cząsteczek
- doświadczenie Rutherforda
- doświadczenie Franka-Hertza

Doświadczenie Franka-Hertza

1902 Lenard



1913 Franck i Hertz



Rotacja i klasyczny moment pędu

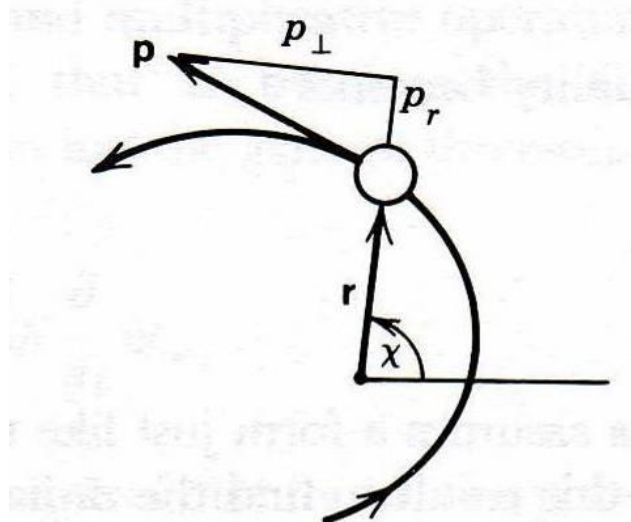
klasyczny pęd i moment pędu:

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

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:

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

i liczymy energię kinetyczną

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

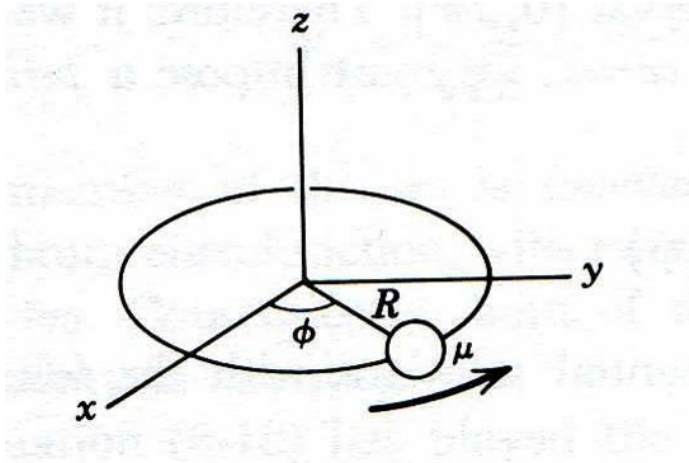
oraz energię całkowitą

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

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 $\psi(\phi + 2\pi) = \psi(\phi) \rightarrow \lambda = m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

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

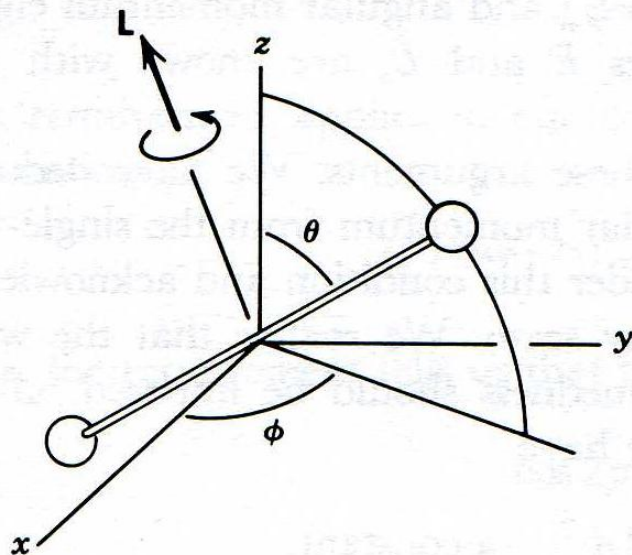
$$E_m = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} m^2$$

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

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

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

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

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

$$L_x \rightarrow \dots$$

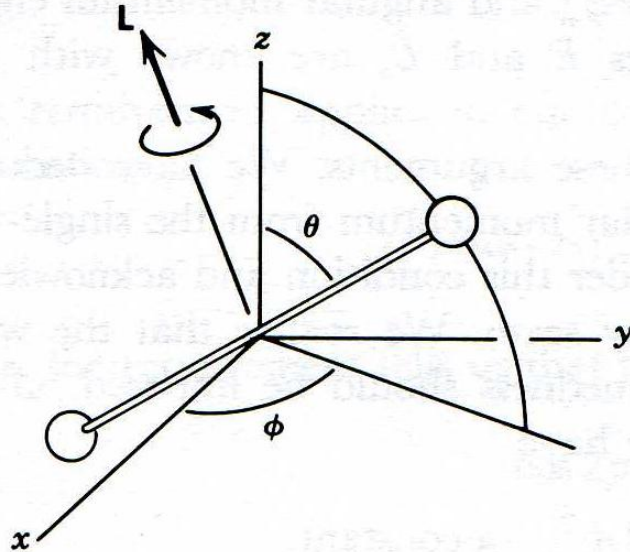
$$L_y \rightarrow \dots$$

$$L^2 \rightarrow \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

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:

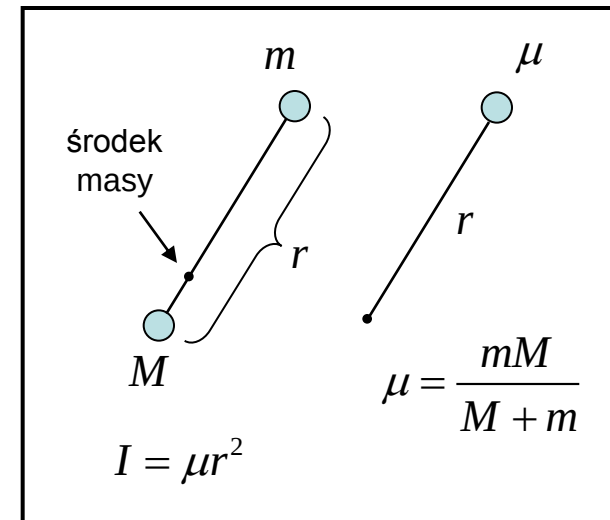
$$\frac{\Lambda^2}{2I} \psi = E \psi$$

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}



$$l = 0 \quad m = 0$$

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

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

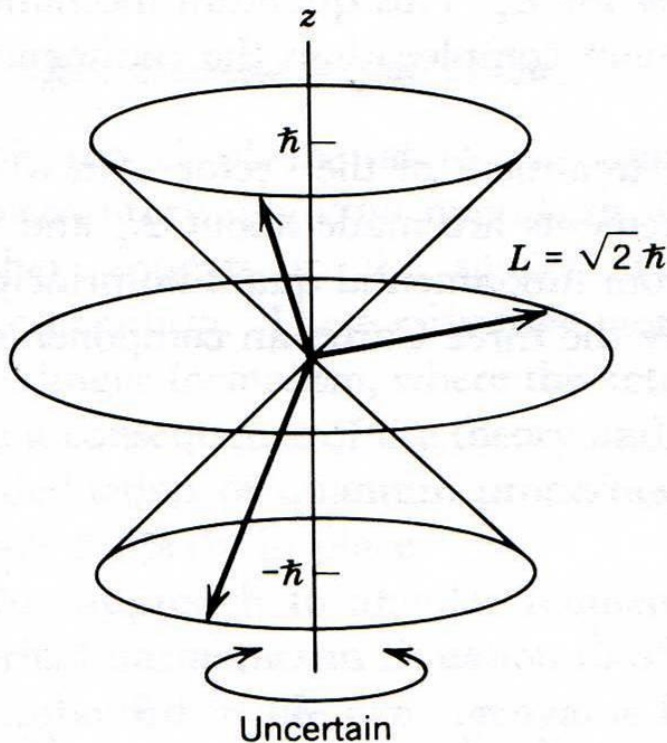
...

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

$$L_z Y_{lm} = m Y_{lm}$$

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

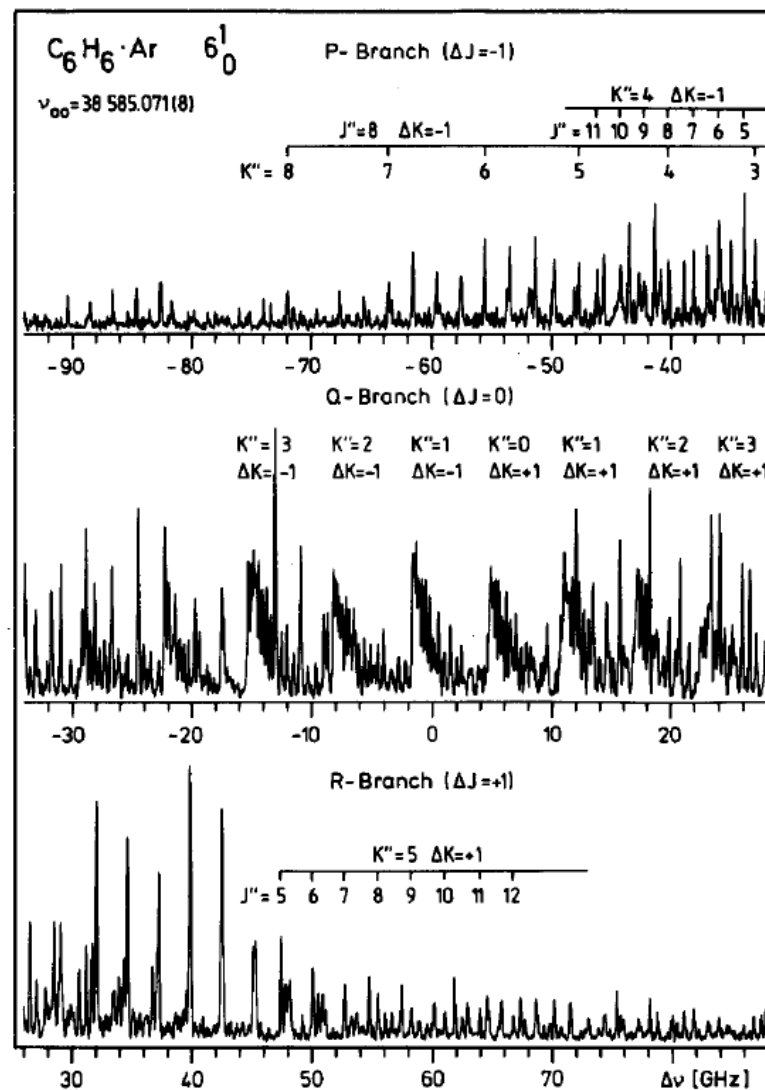
kwantowy moment pędu, 3

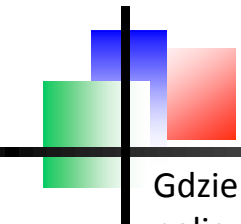


$$l = 1$$
$$m = -1, 0, 1$$

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.

Przykład: widma ro-wibracyjne





Wartości mierzone i operatory

Gdzie jest cząstka? Nie wiemy ale możemy
policzyć wartość średnią położenia na przykładzie 1D

$$\bar{z} = \int_{-\infty}^{\infty} z |\psi(z)|^2 dz = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(z) z \psi(z) dz$$

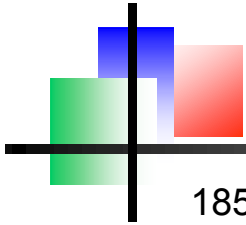
z jest operatorem położenia

wielkość fizyczna	klasycznie	operator kwantowy
położenie	$z(t)$	z
pęd	$p(t)$	$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dz}$
moment pędu	$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$l_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$
energia	$E_k + E_p$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + V(z, t)$

3-D

$\hat{A}$ - operator: $\bar{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(z) \hat{A} \psi(z) dz$

wartość oczekiwana

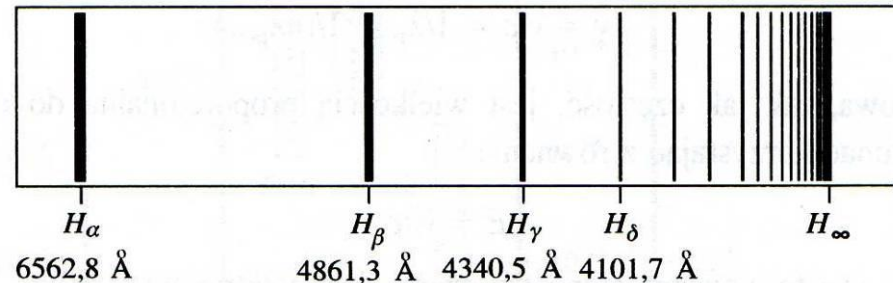


widmo fluorescencji atomu wodoru

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

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

$$G = \text{const}$$



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

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

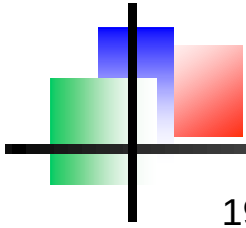
stała Rydberga

1889, Rydberg podaje ogólny wzór na widmo atomu wodoru

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

główne liczby kwantowe

$n \backslash n'$	1 Lyman	2 Balmer	3 Paschen	4 Brackett
2	1216 Å 82257 cm ⁻¹			
3	1026 Å 97466 cm ⁻¹	6563 Å 15233 cm ⁻¹		
4	973 Å 102807 cm ⁻¹	4861 Å 20565 cm ⁻¹	18751 Å 5333 cm ⁻¹	
5	950 Å 105263 cm ⁻¹	4340 Å 23033 cm ⁻¹	12818 Å 7801 cm ⁻¹	40500 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:

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

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

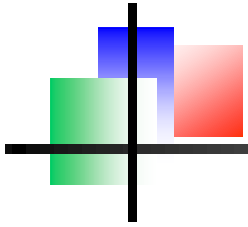
Postulaty Bohra:

1. Klasyczny ruch ale dyskretne orbity, warunek $mvr = n\hbar$, $n = 0, 1, 2, \dots \Rightarrow r_n, E_n$
2. Na orbitach ruch bezpromienisty

3. Przejścia promieniste $\hbar\omega = E_m - E_n, E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$

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:

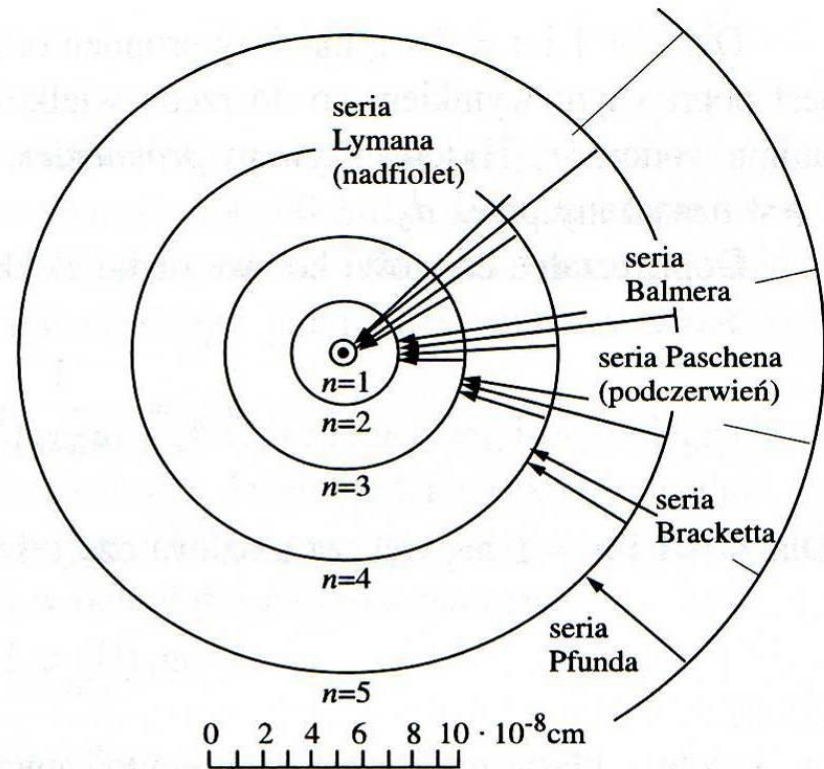
$$r_1(H) \cong 0.529 \text{Å} = 0.0529 \text{nm}$$

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

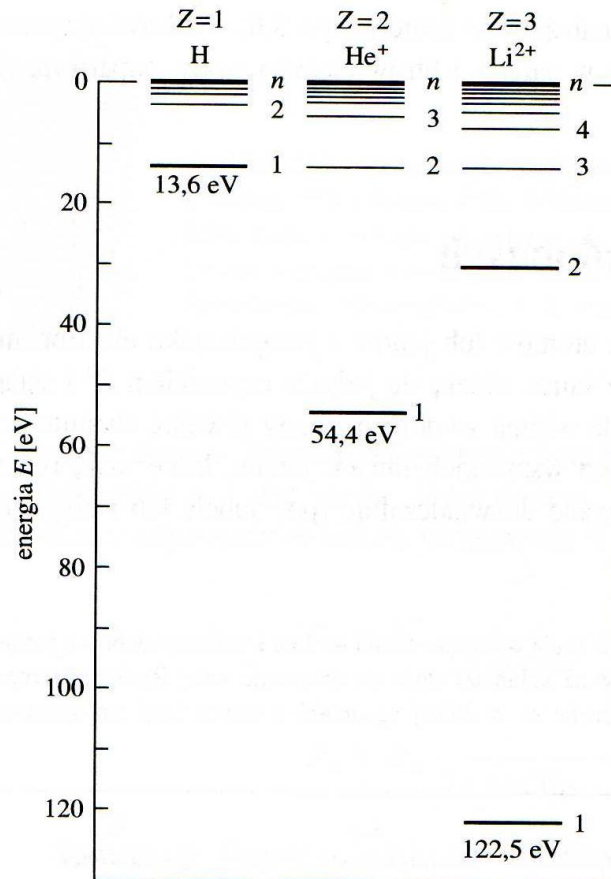
$$E_1 = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2 \hbar^2}$$

energia jonizacji atomu wodoru:

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



jony wodoropodobne



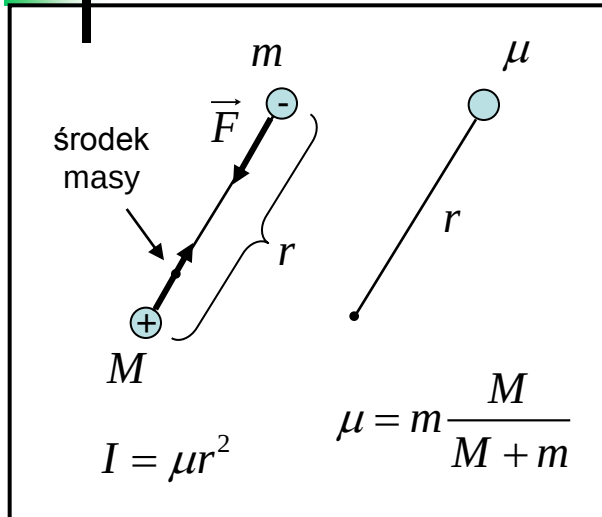
$$E_{n,Z} = Z^2 E_{n,H}$$

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)

	$1 + \frac{m_0}{m_{\text{jądra}}}$	$R_{\text{jądra}}$ [cm ⁻¹]	λ_{12} (obliczone) [Å]	λ_{12} (zmierzone) [Å]
¹ H	1,00054447	109 677,6	1215,66	1215,66
² H	1,00027148	109 707,4	1215,33	1215,33
⁴ He ⁺	1,00013704	109 722,3	303,8	303,6
⁷ Li ²⁺	1,00007817	109 728,7	135,0	135,0
⁹ Be 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 Schrodingera, 1



m - masa elektronu
 M - masa protonu

siła elektrostatyczna, potencjał:

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

potencjał jest centralny – można wprowadzić potencjał efektywny :

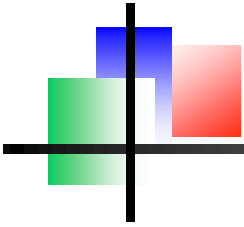
$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) = \frac{p_r^2}{2\mu} + \underbrace{\frac{L^2}{2\mu r^2}} + V(r) = \frac{p_r^2}{2\mu} + V_{eff}(r)$$

efektywny potencjał

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

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

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

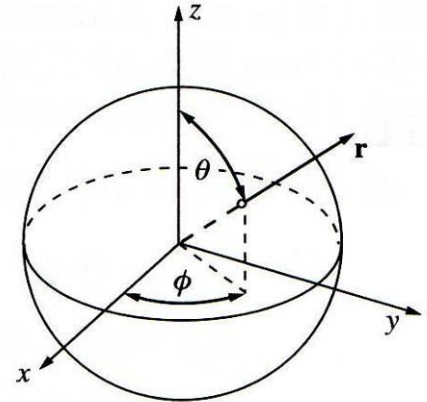
szukamy rozwiązań stacjonarnych:

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

w sferycznym układzie odniesienia:

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

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



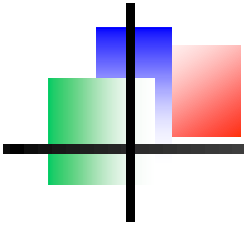
szukamy rozwiązań iloczynowych:

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

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

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

wredne rachunki ...



atom wodoru wedle Schrodingera, 3

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

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

harmoniki sferyczne

Część radialna f.f.:

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

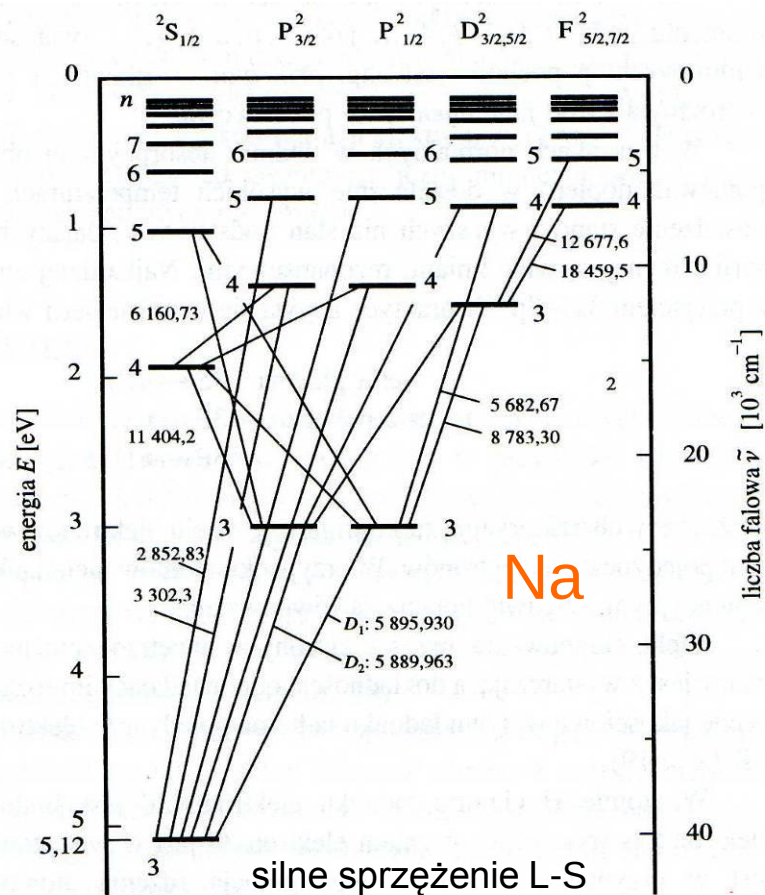
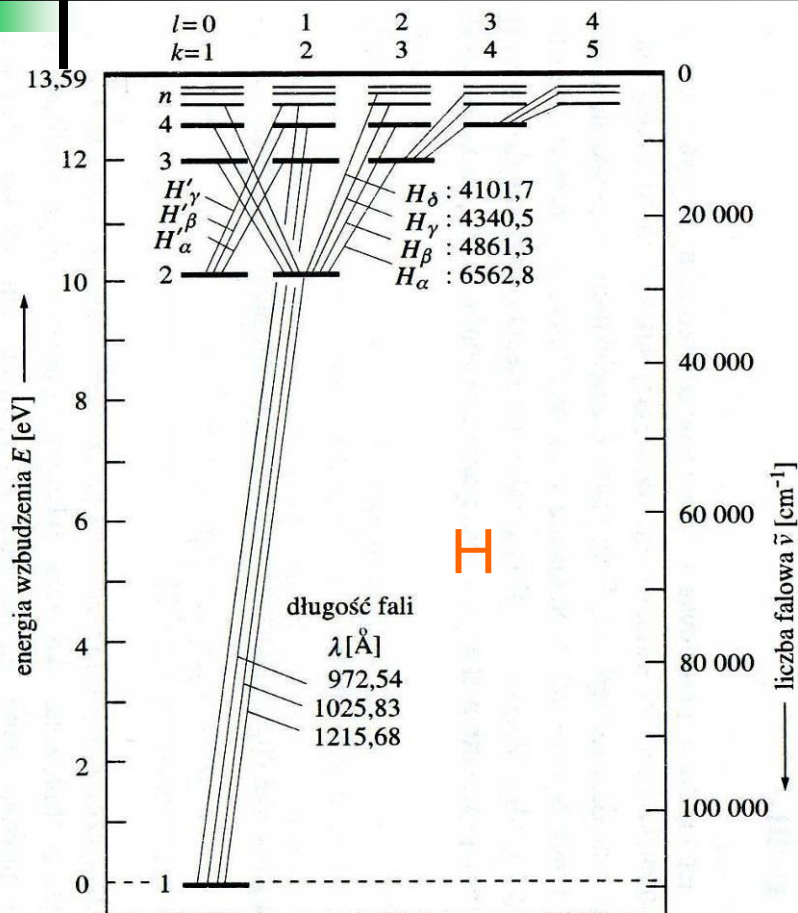
↓

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

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

energia atomu
nie zależy od l
- degeneracja

Diagramy Grotriana



konwencja

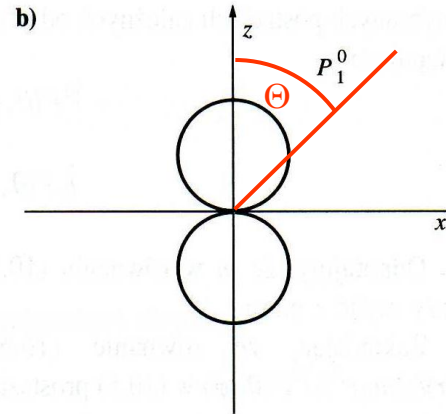
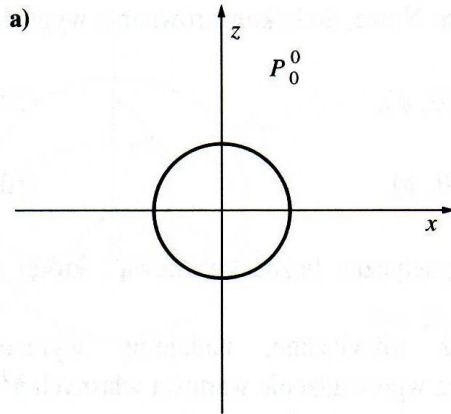
l	0	1	2	3
nazwa	S	P	D	F

orbitalny moment pędu

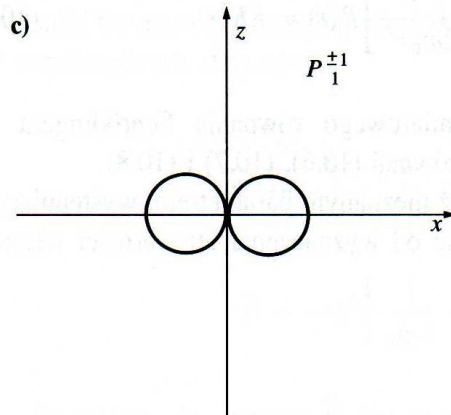
spin

harmoniki sferyczne, 1

część kątowna funkcji falowej zależy od 2 liczb kwantowych: l, m



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



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

$$l = 1 \quad Y_{00} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \Theta, Y_{1\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \Theta e^{\pm i\phi}$$

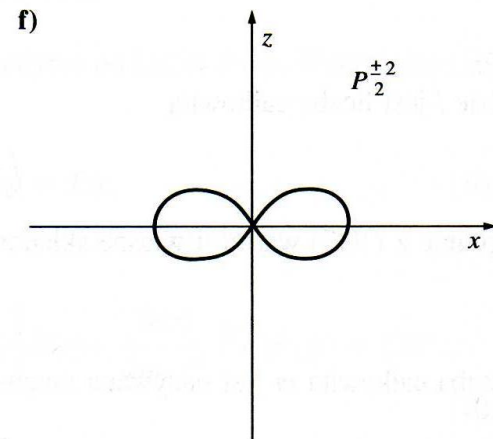
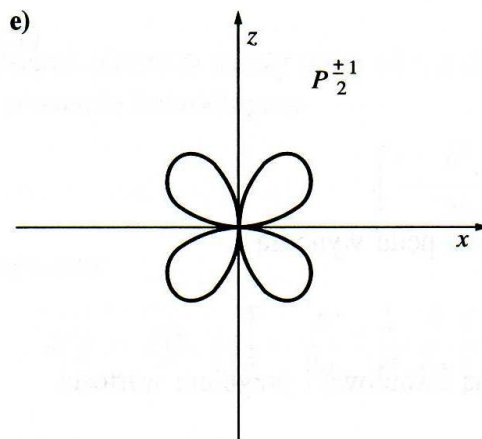
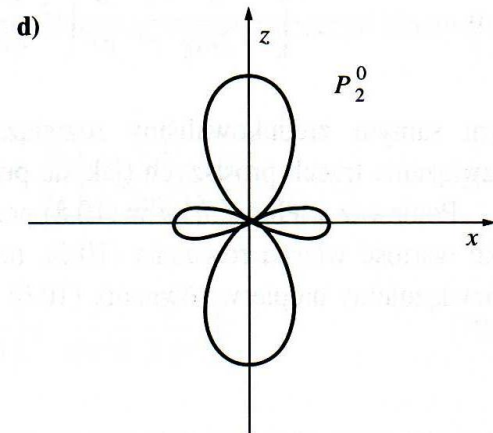
harmoniki sferyczne, 2

$$l = 2$$

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

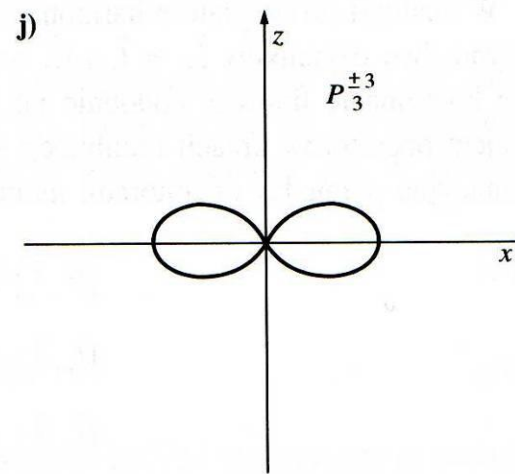
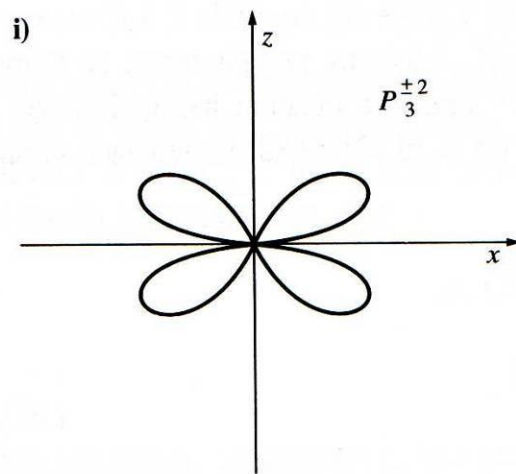
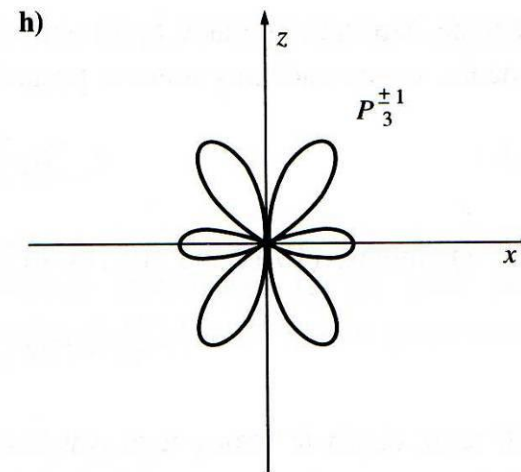
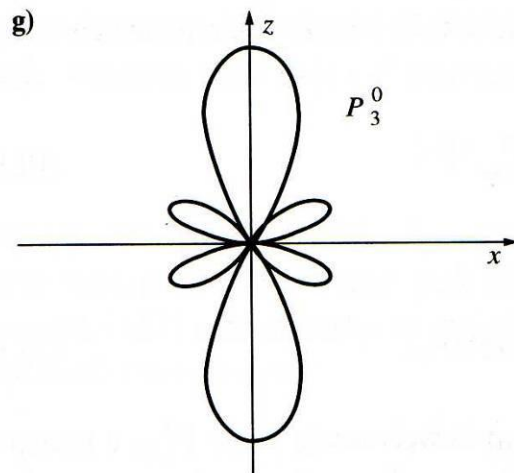
$$Y_{2\pm 1} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin\Theta \cos\Theta e^{\pm i\phi}$$

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

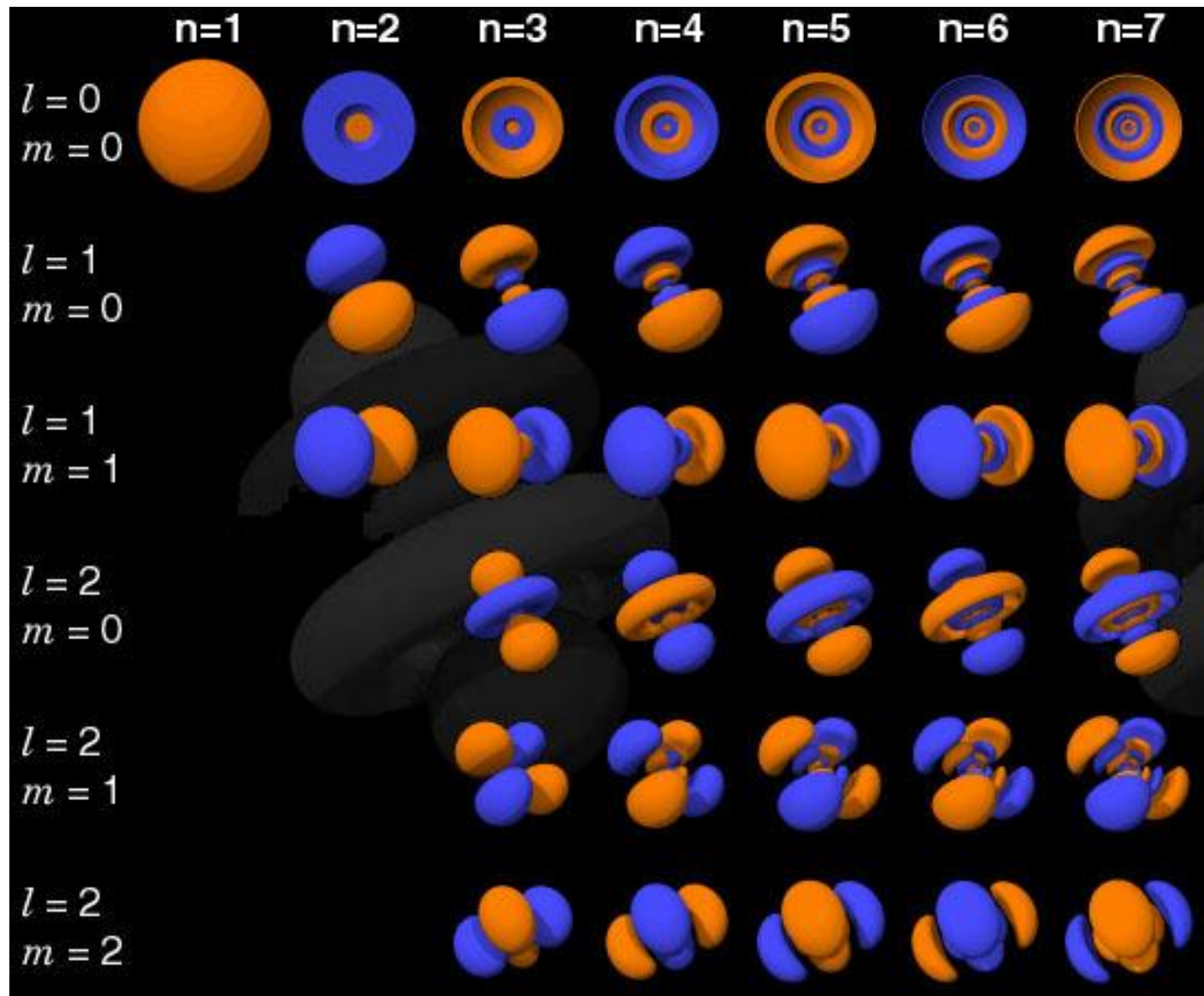


harmoniki sferyczne, 3

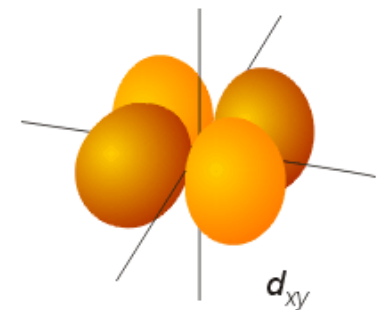
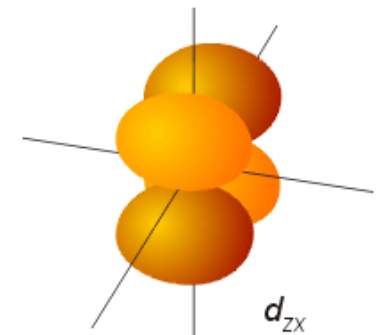
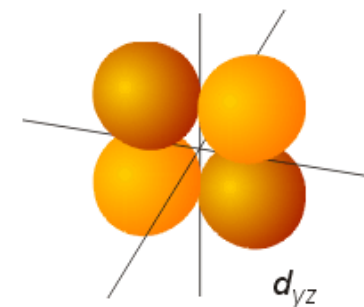
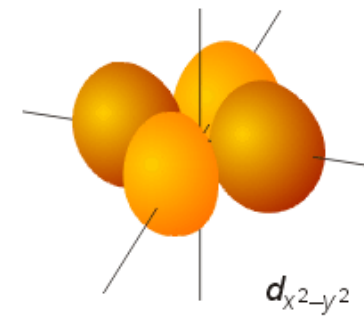
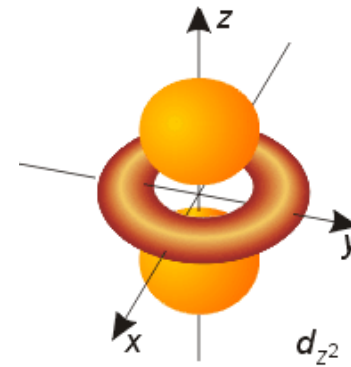
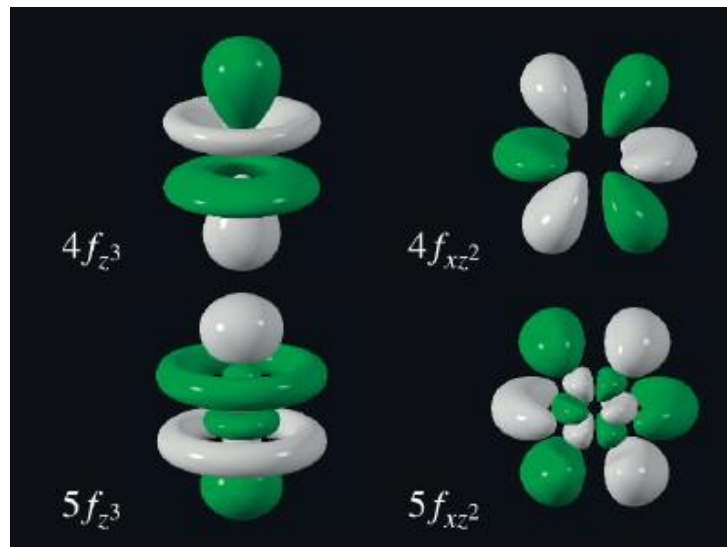
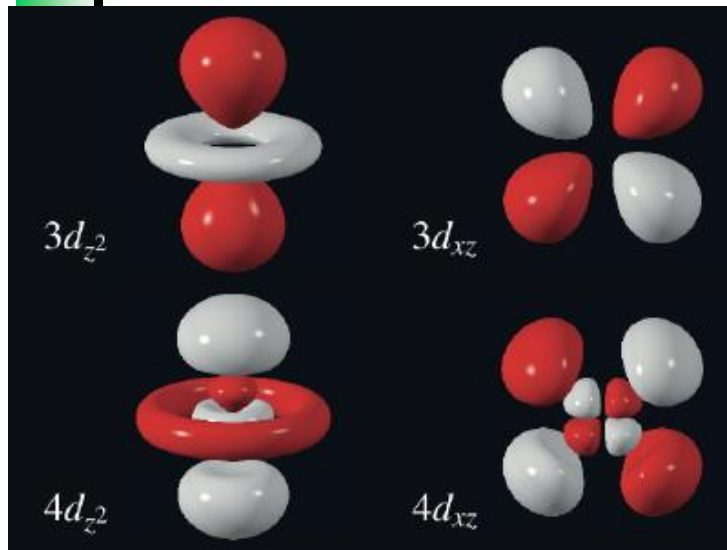
$$l = 3$$



harmoniki sferyczne, 4

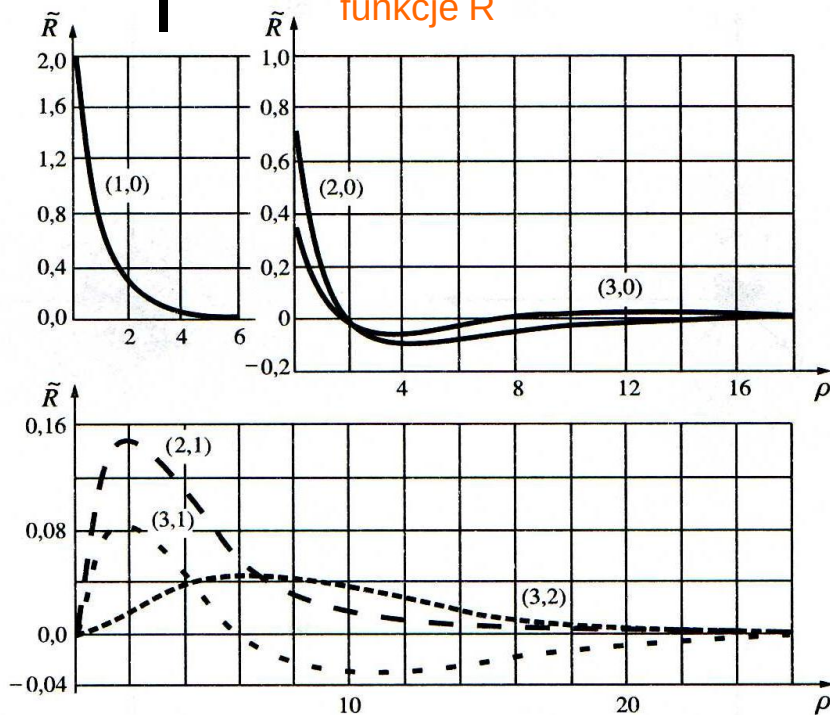


harmoniki sferyczne, 4



funkcja radialna

funkcje R



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

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

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

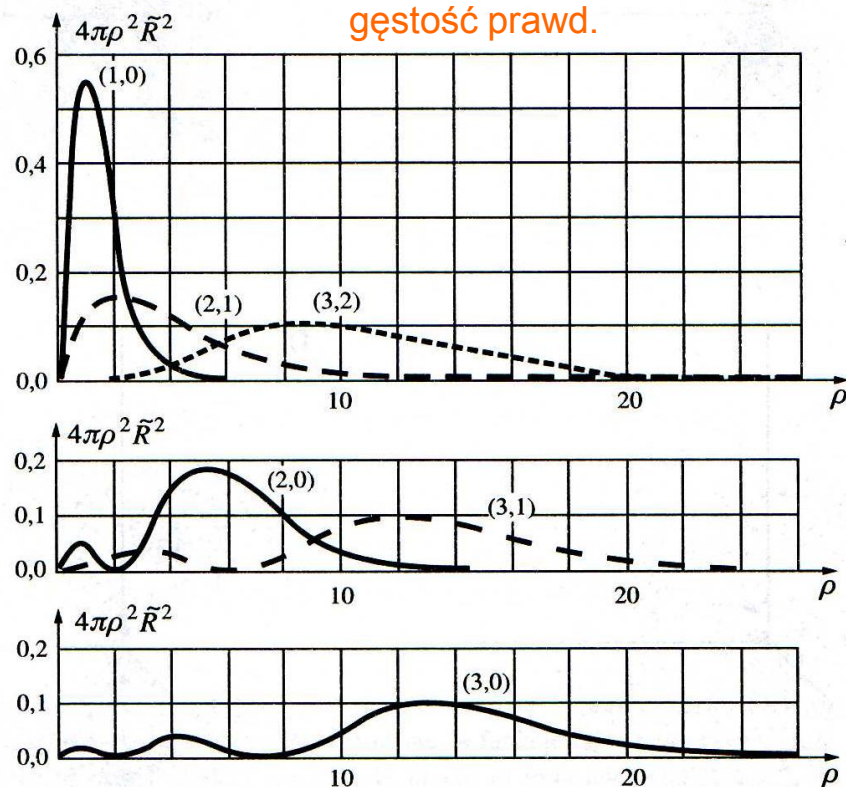
$$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-\varrho}$$

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

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

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

gęstość prawd.



gęstości chmury elektronowej

