Bevezetés a modern fizika fejezeteibe

4. (a)

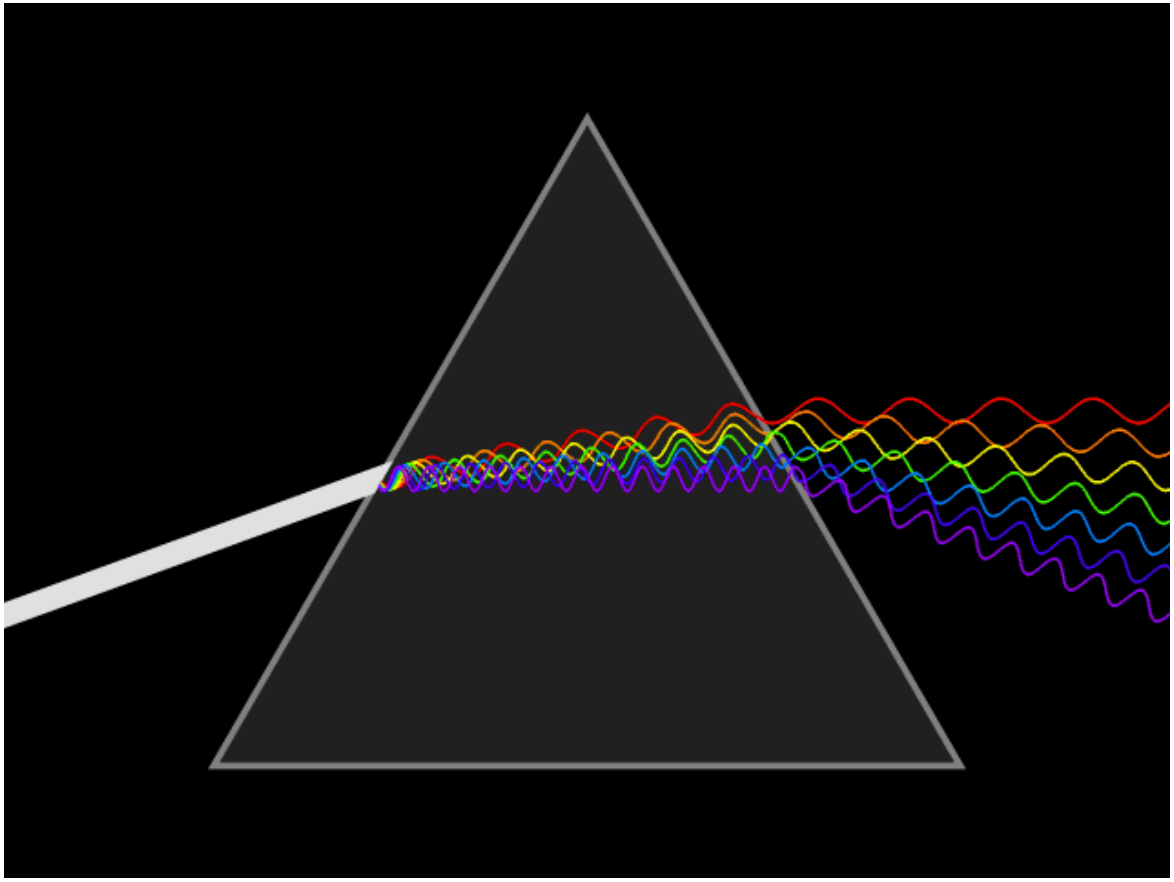
Kvantummechanika

Utolsó módosítás: 2012. november 13.

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

Előzmények – Az atomok színképe (1)

A „fehér” fény komponensekre bontható:



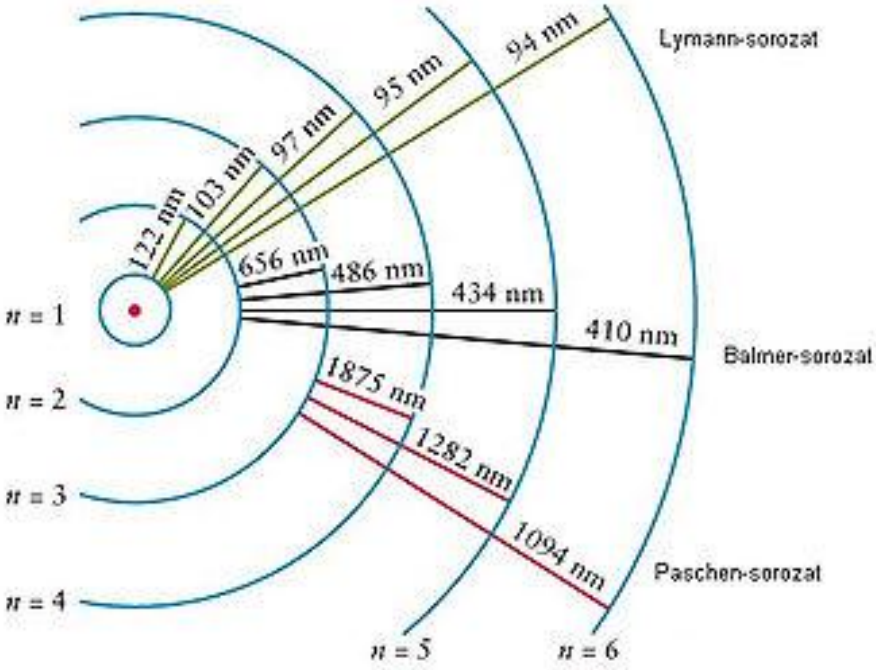
http://en.wikipedia.org/wiki/Prism_(optics)

http://en.wikipedia.org/wiki/Spectrum

Előzmények – Az atomok színképe (2)

Az atomok színképe nem folytonos. A hidrogén látható tartománybeli emissziós spektruma (Balmer-sorozat)

A látható sorozat mellett több nem-látható (ultraibolya és infravörös) sorozat is van. Mi lehet a rendszer a sorozatokban?



Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

Előzmények – Az atomok színképe (3)

Lyman-sorozat: n=2,3,4,… $$E = chR_H\left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$$

Balmer-sorozat: n=3,4,5,… $$E = chR_H\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right)$$

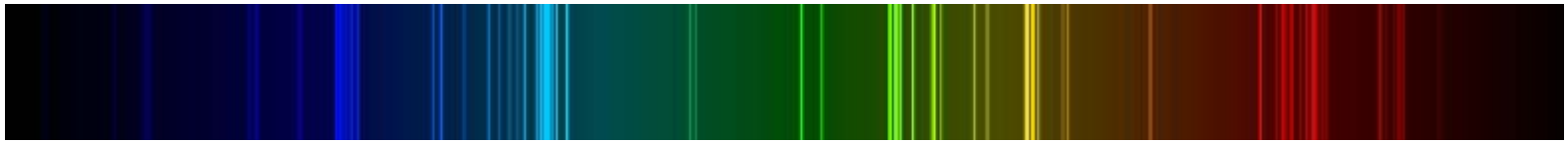
Paschen-sorozat: n=4,5,6,… $$E = chR_H\left(\frac{1}{9} - \frac{1}{n^2}\right)$$

Brackett-sorozat: n=5,6,7,… $$E = chR_H\left(\frac{1}{16} - \frac{1}{n^2}\right)$$

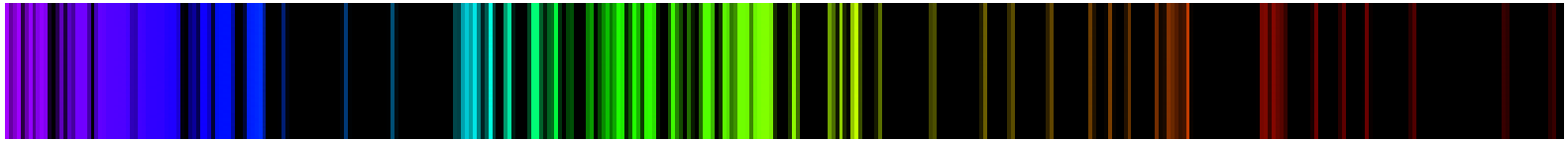
Pfund-sorozat: n=6,7,8,… $$E = chR_H\left(\frac{1}{25} - \frac{1}{n^2}\right)$$

Előzmények – Az atomok színképe (4)

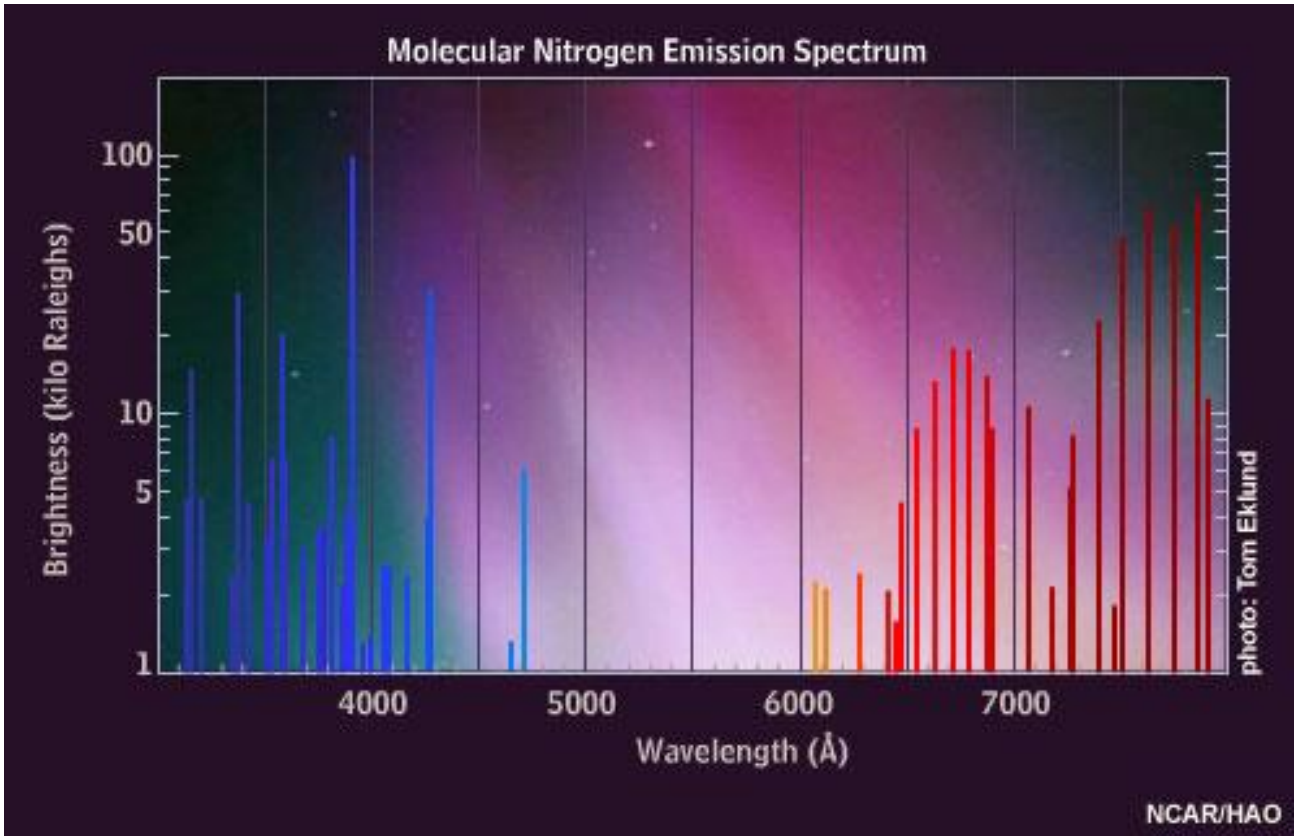
A nitrogén emissziós színképe:



A vas emissziós színképe:

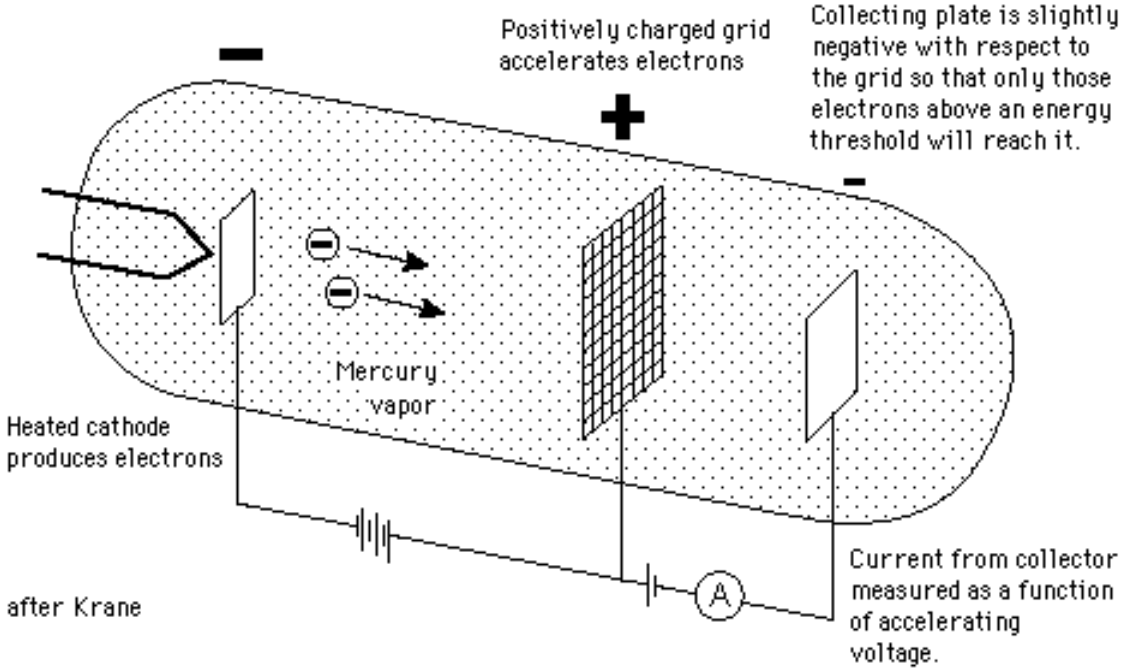


Előzmények – Az atomok színképe (5)



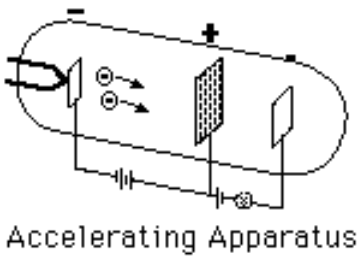
Előzmények – Franck-Hertz-kísérlet (1)

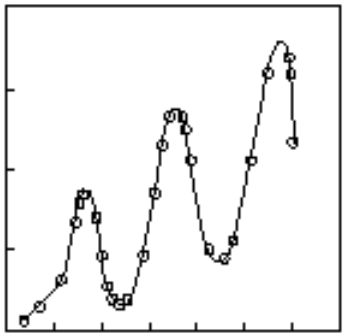
A Franck-Hertz-kísérlet vázlatos elrendezése:



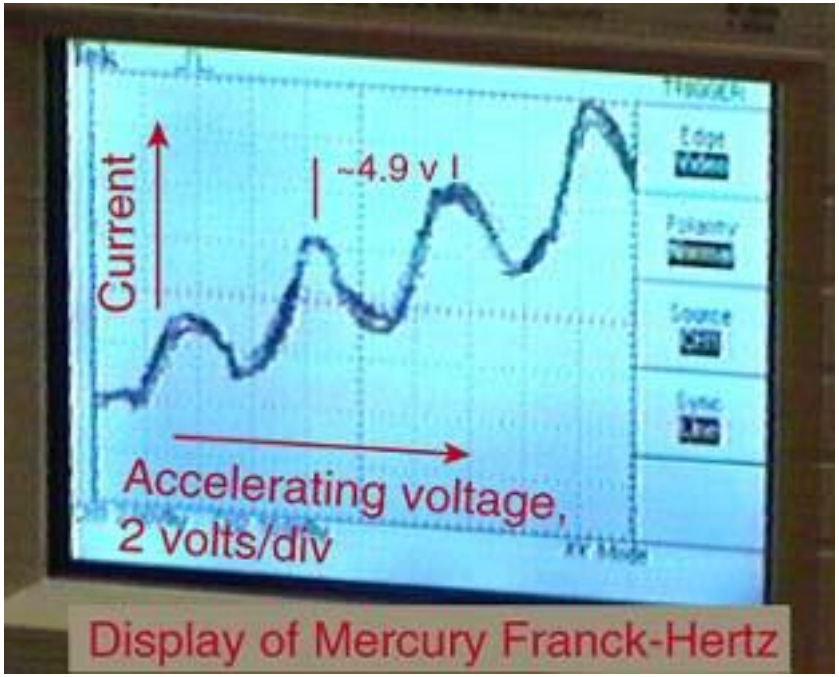
http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/frhz.html

Előzmények – Franck-Hertz-kísérlet (2)



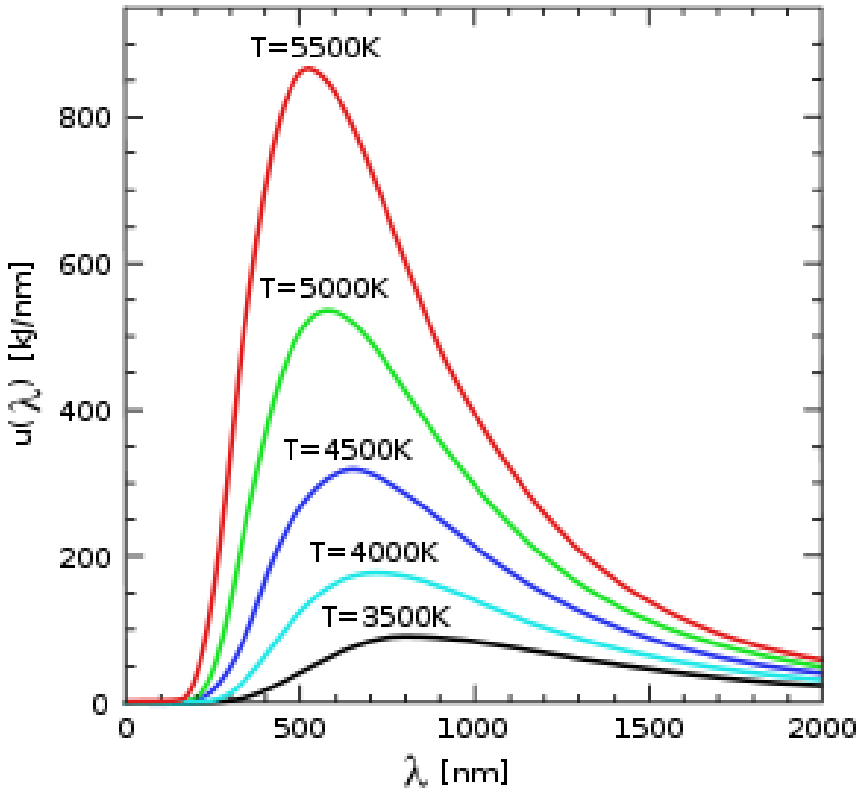


*Nobel prize in physics, 1925



Előzmények – Hőmérsékleti sugárzás (1)

A testek a hőmérsékletüktől függő spektrummal elektromágneses hullámokat emittálnak:



Előzmények – Hőmérsékleti sugárzás (2)

A modell: egy kocka alakú abszolút fekete test falú üregben elektromágneses tér alakul ki, amely a fallal termikus egyensúlyban van. Az üregbe zárt elektromágneses tér esetén már láttuk, hogy nem alakulhat ki tetszőleges frekvenciájú állóhullám, hanem

$$\nu = \frac{c}{2l}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

Az összefüggést kielégítő számhármasok – mint koordináták – egy nyolcad-gömb által magában foglalt térrész csúcsaiban elhelyezkedő pontok. E pontok száma közelítően:

$$\frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2l\nu}{c}\right)^3 = \frac{4\pi}{3}l^3\frac{\nu^3}{c^3}$$

Előzmények – Hőmérsékleti sugárzás (3)

A két független polarizációjú hullám miatt:

$$n(\nu) = \frac{8\pi}{3} V \frac{\nu^3}{c^3} \qquad (V = l^3)$$

A $(\nu, \nu + d\nu)$ frekvenciák közé eső hullámok száma:

$$dn(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} V \nu^2 d\nu$$

Figyelembe véve, hogy az egy oszcillátorra jutó átlagos energia kT, (ekvipartíció-tétele) így a ν frekvenciához tartozó energiasűrűség (Rayleigh-Jeans):

$$u(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 kT$$

A frekvenciára történő integrálás végtelen energiát eredményez!

Előzmények – Hőmérsékleti sugárzás (4)

Planck: az ekvipartíció-tétele levezetésénél az oszcillátorok energiája nem folytonos, hanem egy bizonyos energiakvantum egészszámú többszöröse:

$$\varepsilon_n(\nu) = n\varepsilon_0(\nu)$$

E feltevés mellett az oszcillátor átlagos energiája a Maxwell-Boltzmann-statisztika értelmében:

$$\overline{\varepsilon(\nu)} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon_0 e^{-\frac{n\varepsilon_0}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon_0}{kT}}} = \frac{\varepsilon_0}{e^{\frac{\varepsilon_0}{kT}} - 1}$$

Előzmények – Hőmérsékleti sugárzás (5)

Így a frekvencia szerinti eloszlásra az energiasűrűség:

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{\varepsilon_0}{e^{\frac{\varepsilon_0}{kT}} - 1}$$

Feltételezve, hogy

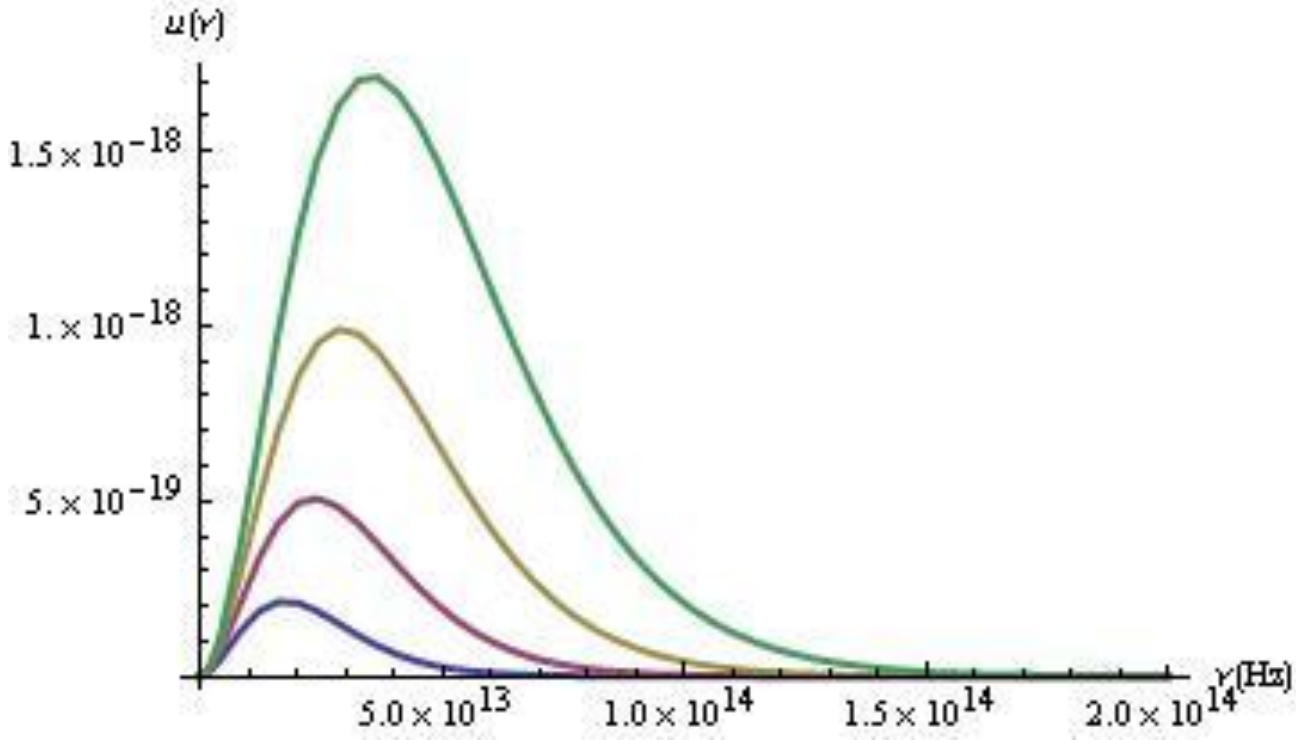
$$\varepsilon_0 = h\nu$$

Az energiasűrűség:

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

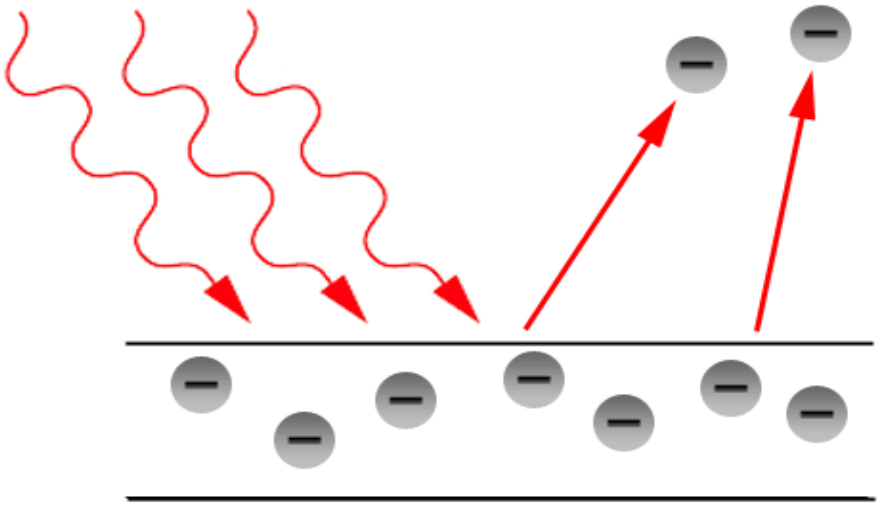
Előzmények – Hőmérsékleti sugárzás (6)

A hőmérsékleti sugárzás (kék vonal: T=300K, lilavonal: T= 400K, szürke vonal: T=500K, zöld vonal: 600K)



Előzmények – Fényelektromos hatás (fotoeffektus) (1)

A fény hatásra a fém felültéből elektronok lépnek ki.



Kérdés: Ha a fény hullám, akkor hogy tud egy elektronra koncentrálódni? → A fény kvantumokból, fotonokból áll. Akkor most a fény hullám vagy részecske tulajdonságú, vagy ez is, az is?

Előzmények – Fényelektromos hatás (fotoeffektus) (2)

A foton energiája, a kilépő elektron kinetikus energiája és az ún. kilépési munka közötti kapcsolat:

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W_{ki}$$

azaz foton energiája meg kell haladja a kilépési munkát.

Következtetés: A frekvencia növelésével a kilépő elektronok mozgási energiája nő, míg a kilépő elektronok száma a fotonok számával, azaz a fény intenzitásával arányos.

Előzmények – Fényelektromos hatás (fotoeffektus) (3)

Így a fenti állítás értelmében egy magányos atom esetén, ha nem elengendő a foton energiája az ionizációhoz, akkor egyáltalán nincs kilépés. Ugyanakkor Maria Göppert-Mayer (1929) elméleti jóslata szerint egy atom két vagy akár több foton egyidejű elnyelésére is képes, így a szükséges ionizációs energia elérhető! Ennek vizsgálatára csak a lézerek megjelenése után (1960) nyílt lehetőség.

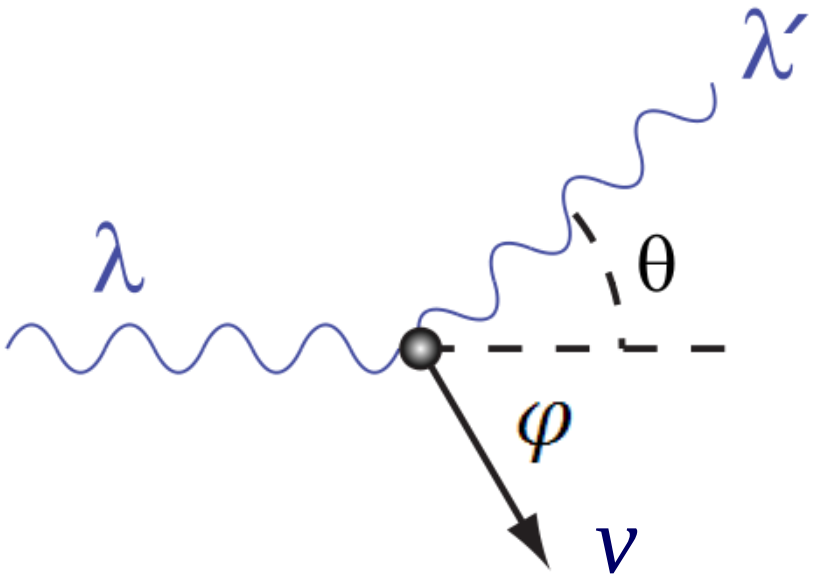
A sok-fotonos folyamatok esetén a kilépő elektronok mozgási energiája:

$$\frac{1}{2}mv^2 = nh\nu - W_{ki}$$

Megjegyzés: az elektromágneses hullám – anyag kölcsönhatásában a fotoeffektus a kisenergiás folyamatok közé tartozik. A fény részecske (foton) voltát erősíti.

Előzmények – Compton-szórás (1)

Nagyfrekvenciájú elektromágneses sugárzás (pl. röntgen-sugárzás) – anyag kölcsönhatása, amely a foton részecske jellegét erősíti. Mivel az elektronok atombeli kötési energiája a beérkező sugárzásáéhoz képest elhanyagolható, így a foton szabad elektronon történő szórásaként írjuk le a folyamatot.



Előzmények – Compton-szórás (2)

A szórási folyamatot leíró energia és impulzus (nem-relativisztikus és relativisztikus) egyenletek. Energia megmaradás:

$$h\nu = h\nu' + \frac{1}{2}mv^2$$

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$$

Impulzus megmaradás:

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c}\cos\Theta + mv\cos\varphi$$

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c}\cos\Theta + p\cos\varphi$$

$$0 = \frac{h\nu'}{c}\sin\Theta - mv\sin\varphi$$

$$0 = \frac{h\nu'}{c}\sin\Theta - p\sin\varphi$$

Itt *m* az elektron nyugalmi tömege, *p* az impulzusa.

Előzmények – Compton-szórás (3)

A szóródás során létrejövő hullámhosszváltozás (mindkét közelítés ugyanazt a végeredményt adja!):

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\frac{h}{mc}sin^2\frac{\Theta}{2}$$

Innen a Compton-hullámhossz:

$$\lambda_C = \frac{h}{mc}$$

Ez éppen annak a fotonnak a hullámhossza, amely energiája megegyezik az elektron nyugalmi energiájával.

Előzmények – Bohr-modell (1)

1. Az atombeli elektronok csak meghatározott sugarú körpályákon tartózkodhatnak, amelyekre érvényes:

$$\oint p_r \, dr = nh$$

azaz az elektron impulzusának zárt görbe menti integrálja a Planck-állandó egész számú többszöröse. Ez az általános definíció éppen a körpálya miatt leegyszerűsödik az

$$mvr = n\frac{h}{2\pi}$$

alakra.

Ez az impulzusmomentum kvantálásának felel meg.

Előzmények – Bohr-modell (2)

2. Az előző feltételekkel kiválasztott pályán az elektron nem sugároz. Sugárzás akkor jön létre, ha az elektron az egyik ilyen pályáról egy másik pályára ugrik át.

3. A kibocsátott sugárzás energiáját e két pálya energiája közötti különbség adja:

$$E_{kezdeti} - E_{végső} = h\nu$$

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

Előzmények – Bohr-modell (3)

A hidrogén-atom lehetséges energiaszintjei:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad (n = 1,2,3,\dots)$$

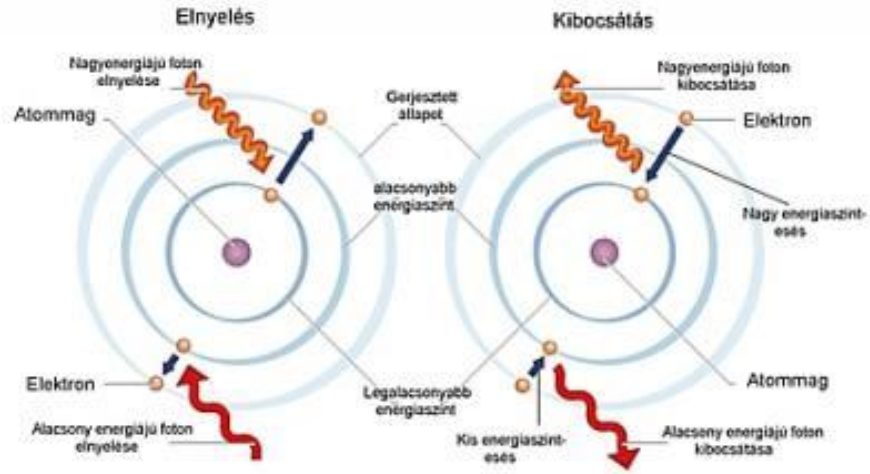
Az *n* (kezdeti) és *l* (végső) szintek közötti átmenet (legerjesztődés, *l* < *n*) során kisugárzott fény frekvenciája:

$$\nu_{n\to l} = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

Előzmények – Bohr-modell (4)

A spektroszkópiában szokásosabb hullámszámra áttérve:

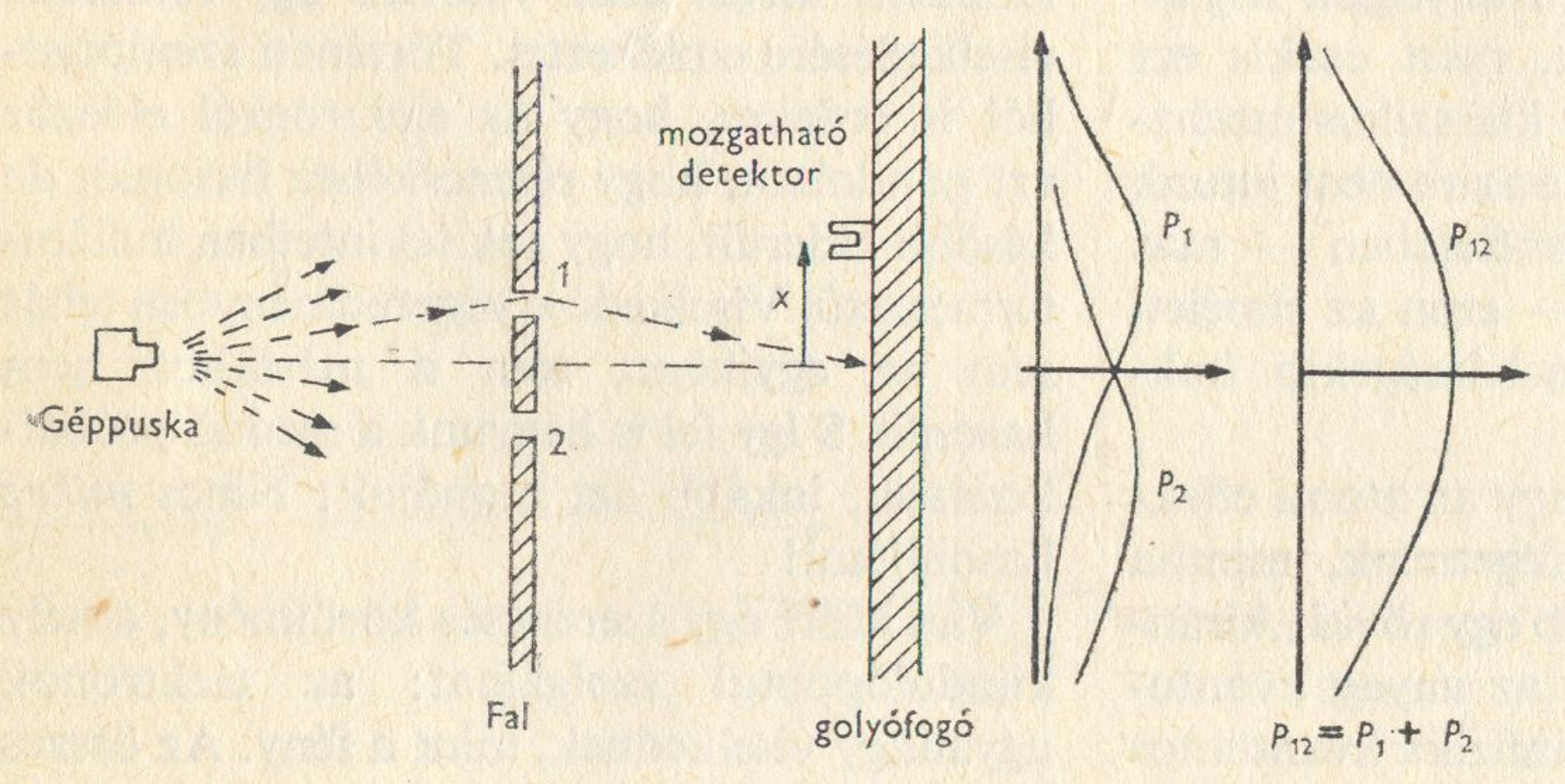
$$k_{n\to l} = \frac{me^4}{4\pi c\hbar^3}\left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$



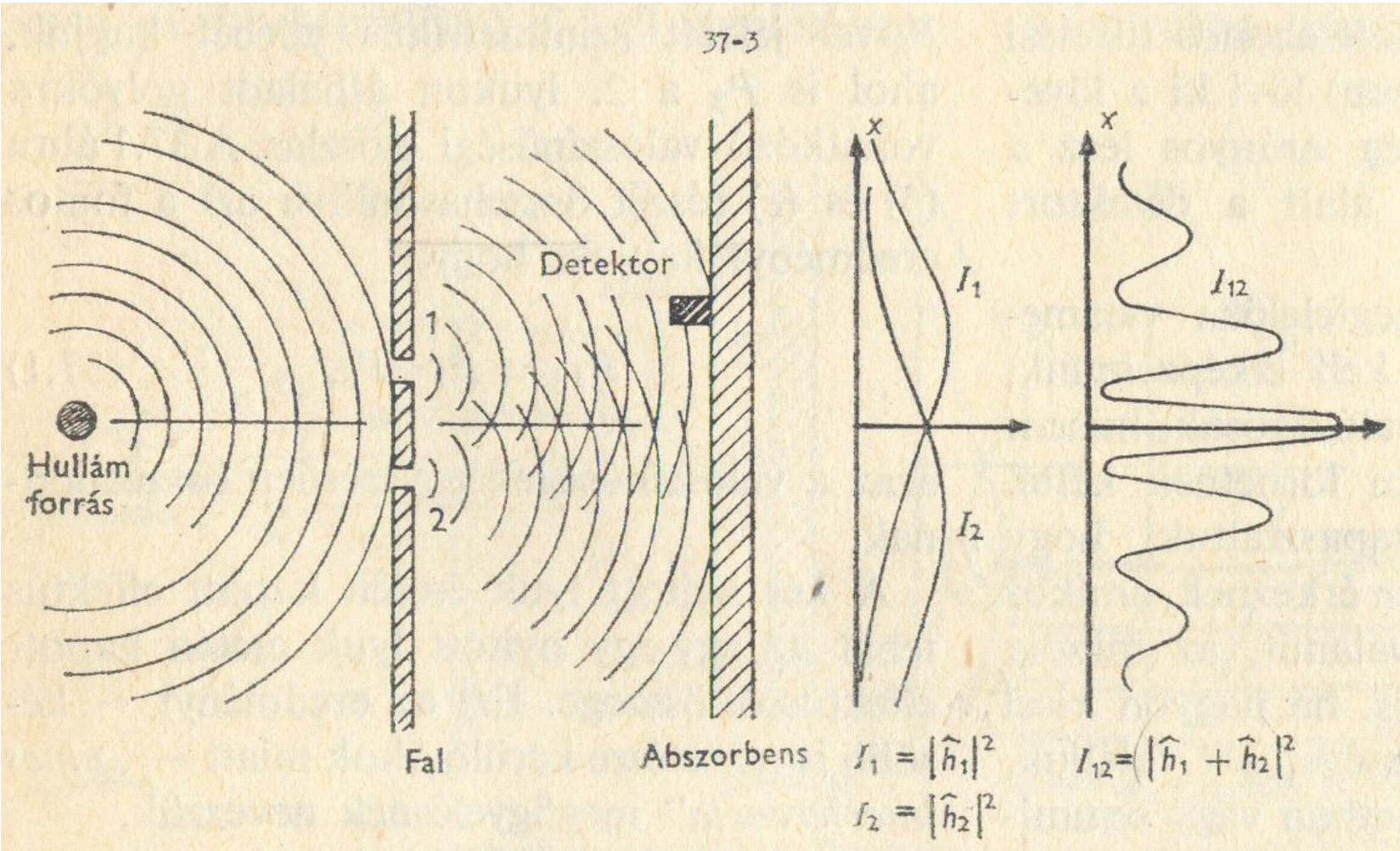
Az együttható egy paraméterben összefoglalva (Rydberg-állandó):

$$R = \frac{me^4}{4\pi c\hbar^3}$$

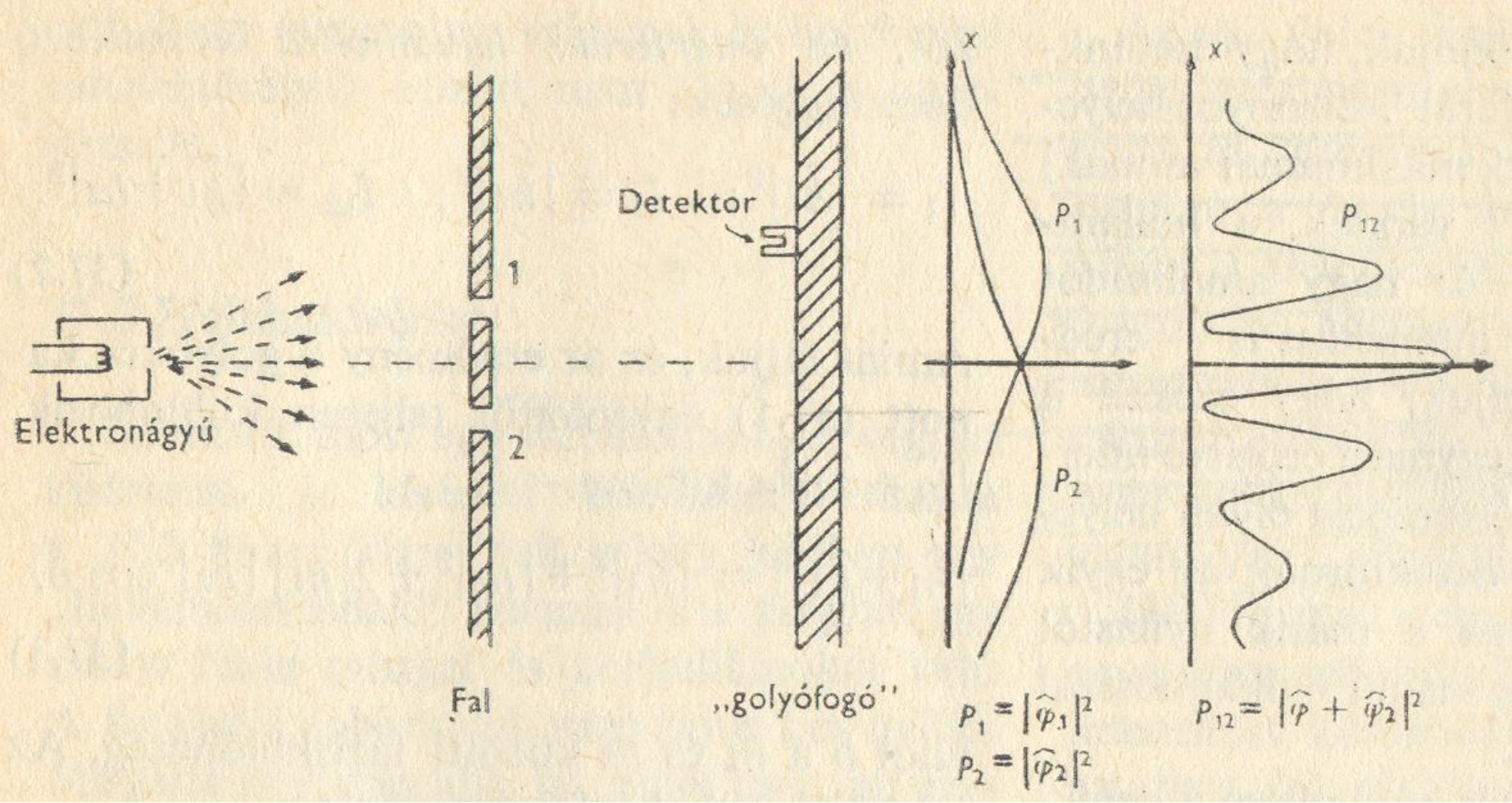
Részecske – hullám kettősség (1)



Részecske – hullám kettősség (2)

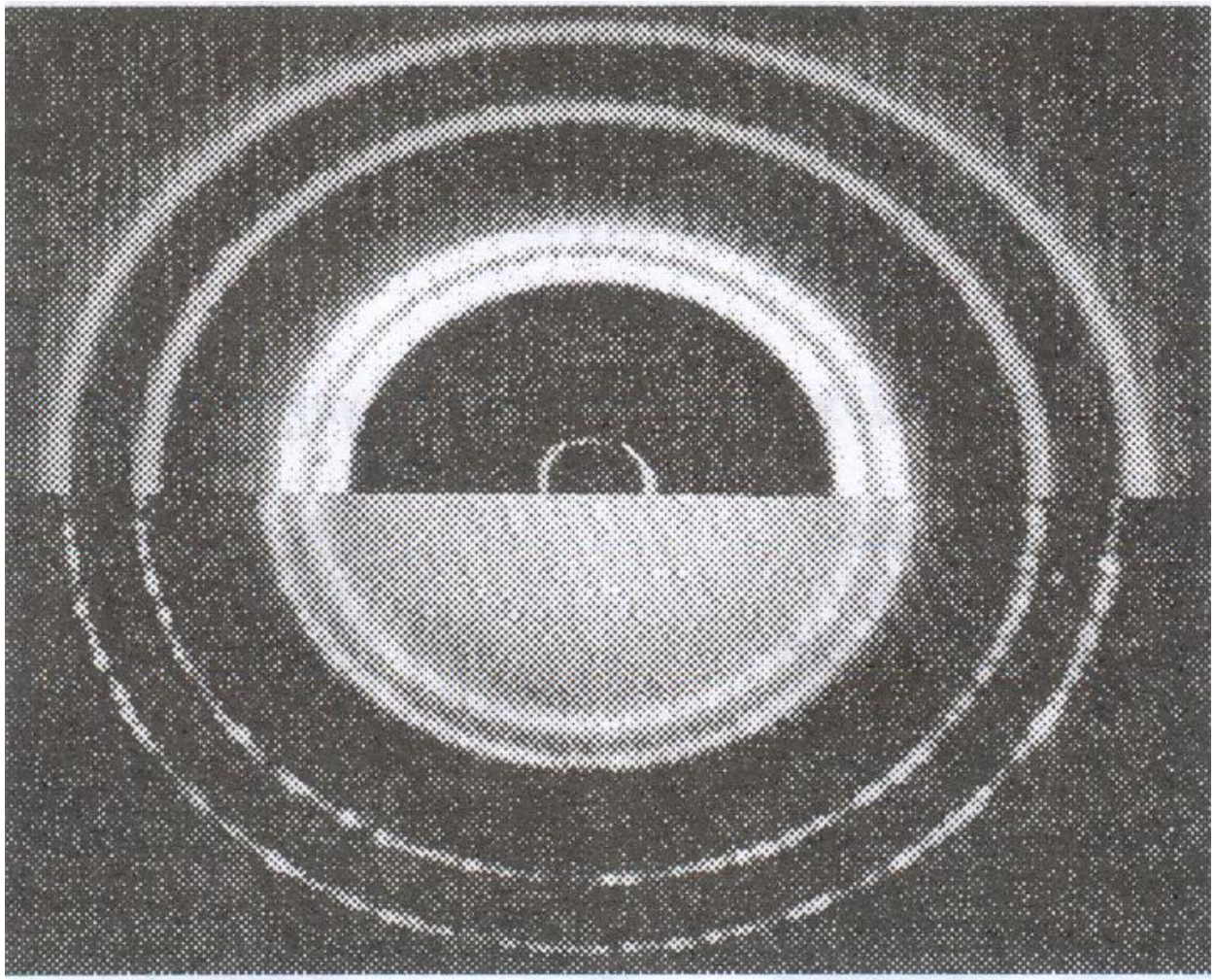


Részecske – hullám kettősség (3)



Részecske – hullám kettősség (4)

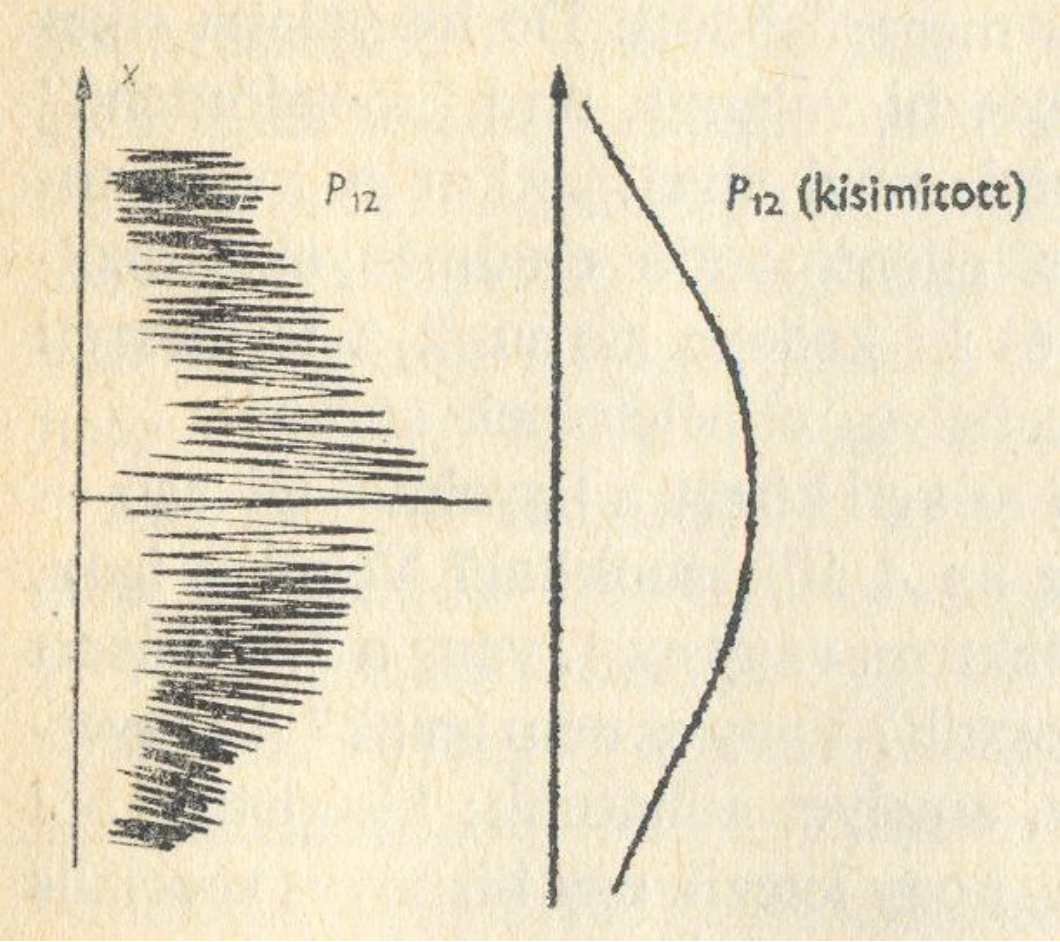
Polikristályos alumíniumfóliával készített röntgen- és elektron elhajlási kép



röntgen

elektron

Részecske – hullám kettősség (5)



Részecskék de Broglie hullámhossza (1)

A fotonra energiájára érvényes:

$$E = mc^2 = h\nu$$

A fotonra impulzusa:

$$p = mc$$

Innen:

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

vagyis

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

De Broglie: a p=mv impulzusú részecskére ez ugyanúgy alkalmazható → „anyaghullám”!

Részecskék de Broglie hullámhossza (2)

Másrészt a hidrogénbeli önmagában záródó stacionárius hullámra:

$$2r\pi = n\lambda = n\frac{h}{p} = n\frac{h}{mv}$$

Átrendezve éppen a Bohr-féle kvantumfeltételt kapjuk!

$$mvr = n\frac{h}{2\pi}$$

„Állóhullámok” – húr (1)

Az *a* hosszúságú húron a fél-hullámhosszak *n* egész számú több-szöröse lehet, k a csomópontok száma:

$$a = n\frac{\lambda}{2} = (k+1)\frac{\lambda}{2}$$

A hullámhossz:

$$\lambda = \frac{2a}{k+1}$$

Az energia:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2}{2m} = \frac{h^2}{8ma^2}(k+1)^2$$

„Állóhullámok” – húr (2)

A legkisebb energiájú állapot a csomópont-mentes *k*=0 állapot. Csak meghatározott energiaadagokat képes felvenni és leadni, eközben megváltozik a csomópontok száma. Pl. a *k*=1-ről a *k*=2-re történő átmenethez szükséges energia:

$$\Delta E = \frac{h^2}{8ma^2}\left[(2+1)^2 - (1+1)^2\right]$$
$$= \frac{5h^2}{8ma^2}$$

„Állóhullámok” – sík (3)

Az a és b oldalú téglalapon kialakuló anyaghullámokra:

$$a = (k_a + 1)\frac{\lambda_a}{2} \qquad b = (k_b + 1)\frac{\lambda_b}{2}$$

Az energia:

$$E = \frac{p_a^2}{2m} + \frac{p_b^2}{2m} = \frac{h^2}{8m}\left[\frac{(k_a+1)^2}{a^2} + \frac{(k_b+1)^2}{b^2}\right]$$

Az alapállapot:

$$E = \frac{h^2}{8m}\left[\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}\right]$$

„Állóhullámok” – sík (4)

Két egycsomós (első gerjesztett) állapot létezik:

$$k_a = 1;\ k_b = 0 \qquad\qquad k_a = 0;\ k_b = 1$$

$$E_{10} = \frac{h^2}{8m}\left[\frac{4}{a^2} + \frac{1}{b^2}\right] \qquad\qquad E_{01} = \frac{h^2}{8m}\left[\frac{1}{a^2} + \frac{4}{b^2}\right]$$

Szimmetrikus esetben: $E_{10} = E_{01}$

Ha azonban *a* és *b* egymástól kissé különböznek (szimmetria-sérülés), akkor e két gerjesztett állapot közötti átmenetet a delokalizált elektronok 0,28aJ energia (klorofill, vörös foton) elnyelésével meg tudják tenni. (→ színek, szerves molekulák)

Kérdések

Hogyan készülnek a színképek? Mit olvashatunk ki a színképekből?
Mire világít rá a Franck-Hertz kísérlet?
Mi a hőmérsékleti sugárzás? Mi az ekvipartíció tétele? Milyen lehet az oszcillátorok energiája? Miként módosul az egy oszcillátorra jutó átlagos energia? Milyen spektrumot eredményez a Rayleigh-Jeans törvény?
Milyen spektrumot eredményez a Planck-féle sugárzási törvény?
Mi a fényelektromos hatás? Mit mutat meg?
Mi Compton-szórás?
Mi a Bohr-modell? Mit magyaráz meg?
Mi a részecske-hullám kettősség?
Mi a de Broglie-féle hullám?
Mekkora az egy húron, téglalap alakú síkon kialakuló „állóhullámok” felvehető energiaértékei?
(folyt. köv.) (A ilyen színnel írt kérdések a mélyebben érdeklődők részére vannak.)