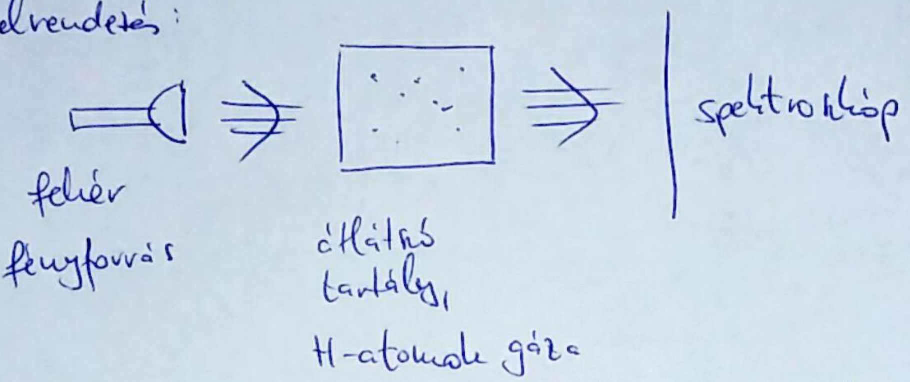
Fizika M1, 4. előadás, 2017/09/25

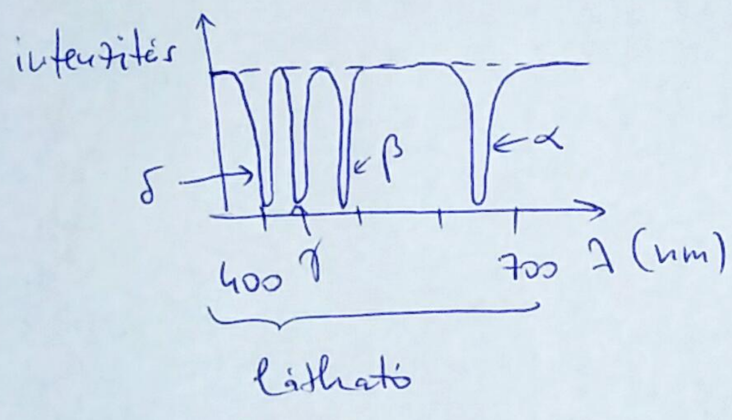
- eddig: proton (rögzített) mágneses momentuma

most: elektron, mozog (mágn. mom.-ot elhanyagoljuk)

$\boxed{\text{II.A}}$ Atomok abszorpciós színképe vonalas szerkezetet mutat

- elrendezés:



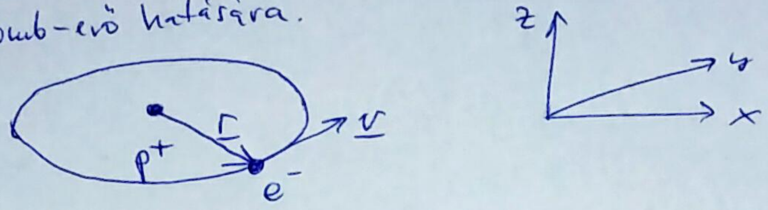


név	λ (nm)	ν (THz)	E = hν (eV)	n → n'
α	656	456	1,9	2→3
β	486	617	2,55	2→4
γ	434	691	2,85	2→5
δ	410	731	3,05	2→6

- 4 abszorpciós színképvonal
- "Balmer-sorozat"
- további vonalak láthatók más hullámhossz-tartományokban

II.B A klasszikus Rutherford-féle atommodell nem magyarázza a vonalas színképet

- R-modell: p^+ rögzített, e^- körpályán mozog egyenletesen, Coulomb-erő hatására.



- feladat: $r = 0{,}2\,\text{Å}$

a) $v = ?\ \frac{m}{s}$, $v = ?\cdot c$ — fénysebesség

b) $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} = ?$ — $m_e \underline{v}$

c) $E_{mozg} = ?$, $E_{helyzeti} = ?$ $E_{teljes} = E_{mozg} + E_{helyz} = ?$

d) $E_{teljes}(L_z) = ?$

megoldás: a) $v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{m_e r}} \approx 3{,}6 \times 10^6 \frac{m}{s} \approx 0{,}012\,c$

b) $\underline{L} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ L_z \end{pmatrix} = L_z \underline{e}_z = \underbrace{\sqrt{\frac{m_e r e^2}{4\pi\varepsilon_0}}}_{L_z \approx 6{,}5\times 10^{-35} kg\frac{m^2}{s} \approx 0{,}61\,\hbar} \underline{e}_z$

c) $E_{mozg} = \frac{1}{2} m_e v^2 \approx 36\,eV$ $E_{helyzeti} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \approx -72\,eV$

$E_{teljes} \approx -36\,eV$

d) $E(L_z) = -\frac{1}{2}\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 L_z^2}$

$e \cong 1{,}6 \times 10^{-19}\,As$ — e^- töltése

$m_e \cong 9{,}1 \times 10^{-31}\,kg$ — e^- tömege

$\varepsilon_0 \cong 8{,}9 \times 10^{-12}\,\frac{s^4 A^2}{kg\,m^3}$ — vákuum permittivitása

- hiba 1: r tetsz. → E tetsz. → Rutherford-atom abszorpciójának energiafüggése folytonos →
  → nincs vonalas színkép → ↯ kisérlettel
- hiba 2: töltés gyorsul de nem sugároz →
  → ↯ Maxwell-féle elektromágnességgel

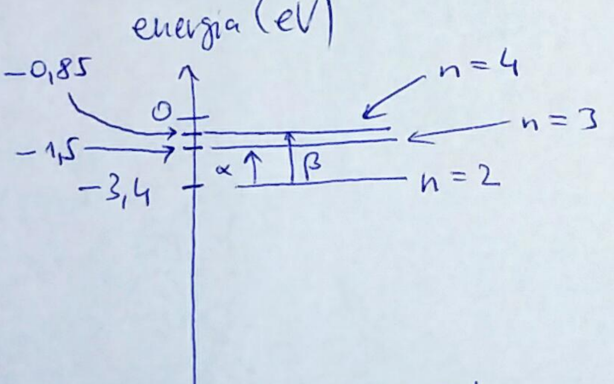
$\boxed{\text{II.C.}}$ A félklasszikus Bohr-modell megmagyarázza a vonalas színképet

- Bohr-modell: Rutherford-modell $+$ tfh L_z kvantált, $L_z = n \cdot \hbar$, $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$

- köv: L_z kvantált, energia $E = E(L_z)$ $\Big\} \rightarrow$ E kvantált, "diszkrét":

$$E_n = \underbrace{-\frac{1}{2}\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2}}_{13{,}6\ \text{eV} \;=\; 1\ \text{Ry (rydberg)}} \frac{1}{n^2}$$

lásd II.B.d)



elnevezések:
n-ik főkvantumszámú
"energiaszint"
"energianívó"
"elektronállapot"

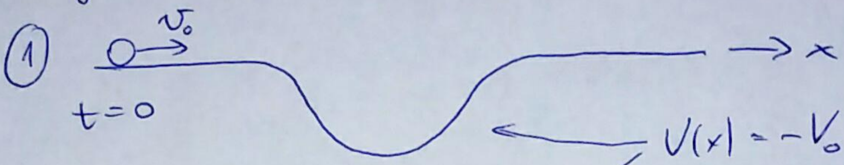
- $E_3 - E_2 = 1{,}9\ \text{eV} \leftarrow$ Balmer-α
  $E_4 - E_2 = 2{,}55\ \text{eV} \leftarrow$ Balmer-β
  $\vdots$
  $\Big\} \rightarrow$ Bohr-modell megmagyarázza a vonalas színképet.

II.D A kvantummechanikai modell: az e^- Schrödinger-egyenlete

- klasszikus mechanika: kötött állapotok, szórási állapotok

pl: guruló labda + gödör

(1)



$$V(x) = -V_0 e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$$

$$E = E_k + E_h = \frac{1}{2} m v^2 + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$p = mv$

$$E(t=0) = \frac{1}{2} m v_0^2 = \frac{p_0^2}{2m} > 0$$

"szórási állapot" kijut a gödörből

(2)

"kötött állapot" rezeg a gödörben

$t=0: v_0 = 0$

$$E(t=0) = -V_0 e^{-\frac{x_0^2}{2l^2}} \Leftarrow E(t=0) \in [-V_0, 0]$$

- kvantummechanika:

pl: guruló labda $\longmapsto e^-$

gödör $\longmapsto$ elektrosztatikus potenciálgödör

- állapotjelző: "hullámfv", "állapot": $\Psi(x,t)$ $\leftarrow \Psi: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$

(v.ö. I.G.(2))

- annak a valószínűsége, hogy az e^- az $[a,b)$ intervallumban van, $P_{[a,b)} = \int_a^b dx\, |\Psi(x)|^2$.

• valószínűség → hfv normált kell legyen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\Psi(x)|^2 = 1$$

• hfvek skalárszorzata: $\langle \Psi | \varphi \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(x)\, \varphi(x)$

• Ψ normált $\iff \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$

• fizikai mennyiségek (v.ö. I.G. 3)
hfv-hez hfv-t rendelő fvek

hely: $\hat{x}: \Psi(x) \longmapsto x \cdot \Psi(x)$

impulzus: $\hat{p}: \Psi(x) \longmapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$

• mozgásegyenlet: (v.ö. I.G. 4)
klasszikus energia $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$
→ Hamilton-operátor $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$
→ időfüggő SE: $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} + \hat{H}\Psi(x,t) = 0$

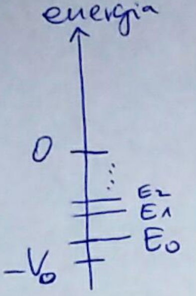
időfüggetlen SE: $\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\left(\frac{\hbar}{i}\partial_x\right)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 \Psi(x) - V_0\, e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \Psi(x) = E\Psi(x)$$

Kérdés: melyek azok az (E, Ψ) párok, melyek megoldják ezt az egyenletet és normáltak? (Azaz melyek a "stacionárius állapotok"?)

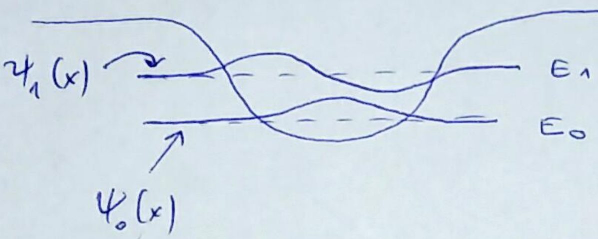
• áll: kötött állapotok energiaspektruma diszkrét.



$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

kötött állapotok energiatartománya $E \in [-V_0, 0)$

• energiasajátállapotok kb. alakja:



$$V(x) = -V_0 e^{-\frac{x^2}{2\ell^2}}$$

• fizikai mennyiségek várható értéke: (v.ö. I.G. 3)

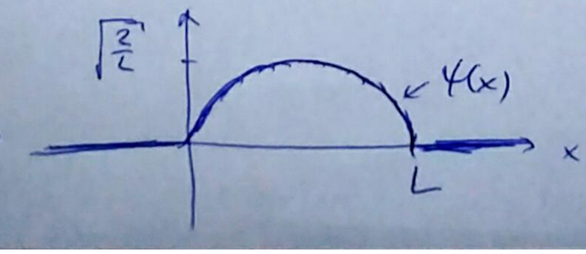
hely: $\langle \hat{x} \rangle_\psi = \cancel{\int dx} \; \langle \psi | \hat{x} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, x\, \psi(x)$

impulzus: $\langle \hat{p} \rangle_\psi = \langle \psi | \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x)$

egyszerű példa: $\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), & \text{ha } 0 < x < L \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases}$

$$\langle \hat{x} \rangle_\psi = \cancel{\int} \int_0^L dx\, \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cdot x = \frac{L}{2}$$

$$\langle \hat{p} \rangle_\psi = \int_0^L dx \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cdot \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) = 0$$



• H-atom elektronjának leírása:

1D $\longrightarrow$ 3D

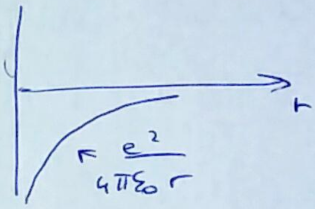
$$V(x) = -V_0 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \longrightarrow V(\underline{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$ Coulomb-potenciál

klasszikus energia: $$E = \frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



időfüggetlen SE: $$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\underbrace{\left(\partial_x^2+\partial_y^2+\partial_z^2\right)}_{\Delta \text{ (Laplace-operátor)}}\Psi(x,y,z) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi(x,y,z)$$

$$= E\Psi(x,y,z)$$

kötött állapotok: $E \in [-\infty, 0]$

kötött állapotok energiaspektruma diszkrét

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

ugyanaz mint a Bohr-modellben!