

Oscylator harmoniczny - klasycznie

Energia potencjalna „klasycznie”

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$\omega = (K/m)^{1/2} = 2\pi f$$

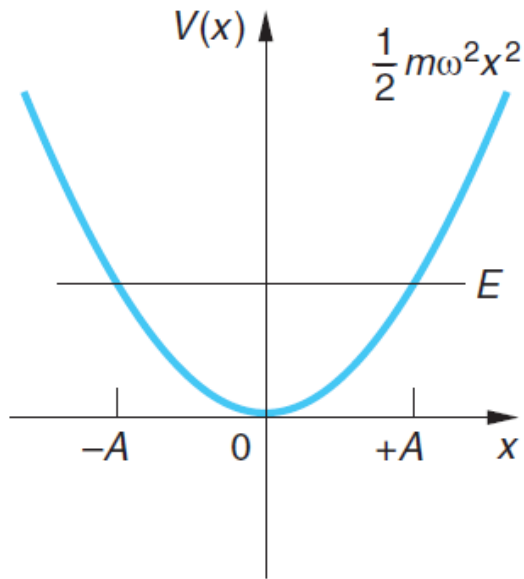
Energia całkowita wiąże się z amplitudą drgań

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = E$$

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2A^2$$

Klasycznie prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w dx jest proporcjonalne do czasu spędzonego w dx , czyli do wyrażenia dx/v

$$P_c(x) dx \propto \frac{dx}{v} = \frac{dx}{\sqrt{(2/m)\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}}$$



Energia potencjalna prostego oscylatora harmonicznego. W mechanice klasycznej cząstka uwięziona jest między punktami $-A$, $+A$

Oscylator harmoniczny - kwantowo

Równanie S. dla oscylatora harmonicznego ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

W rozwiązaniach wykorzystywane są wielomiany Hermite'a $H_n(x)$.

$$\psi_n(x) = C_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n(x) \quad \longrightarrow \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2},$$

Rozwiązując równanie S. znajdujemy dozwolone wartości energii:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$H_0(x) = 1,$$

$$H_1(x) = 2x,$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2,$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x,$$

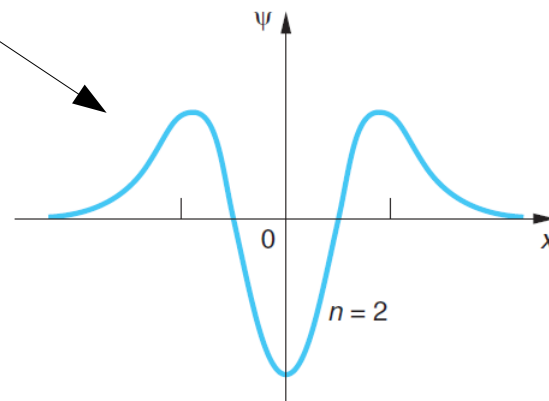
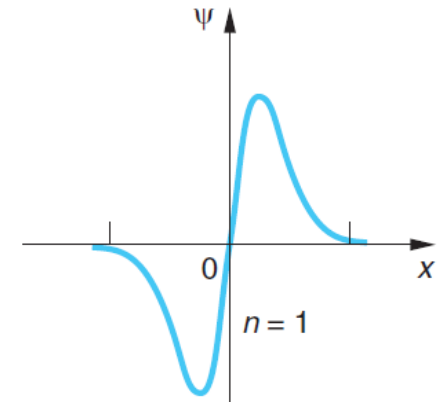
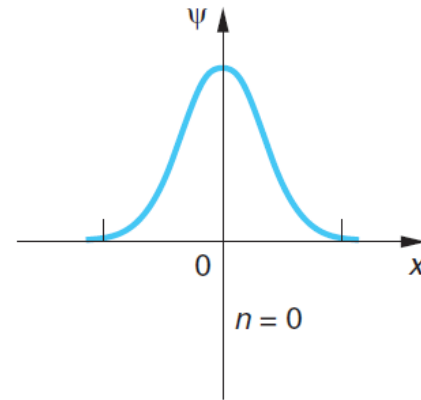
$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12.$$

Oscylator harmoniczny - kwantowo

$$\psi_0(x) = A_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

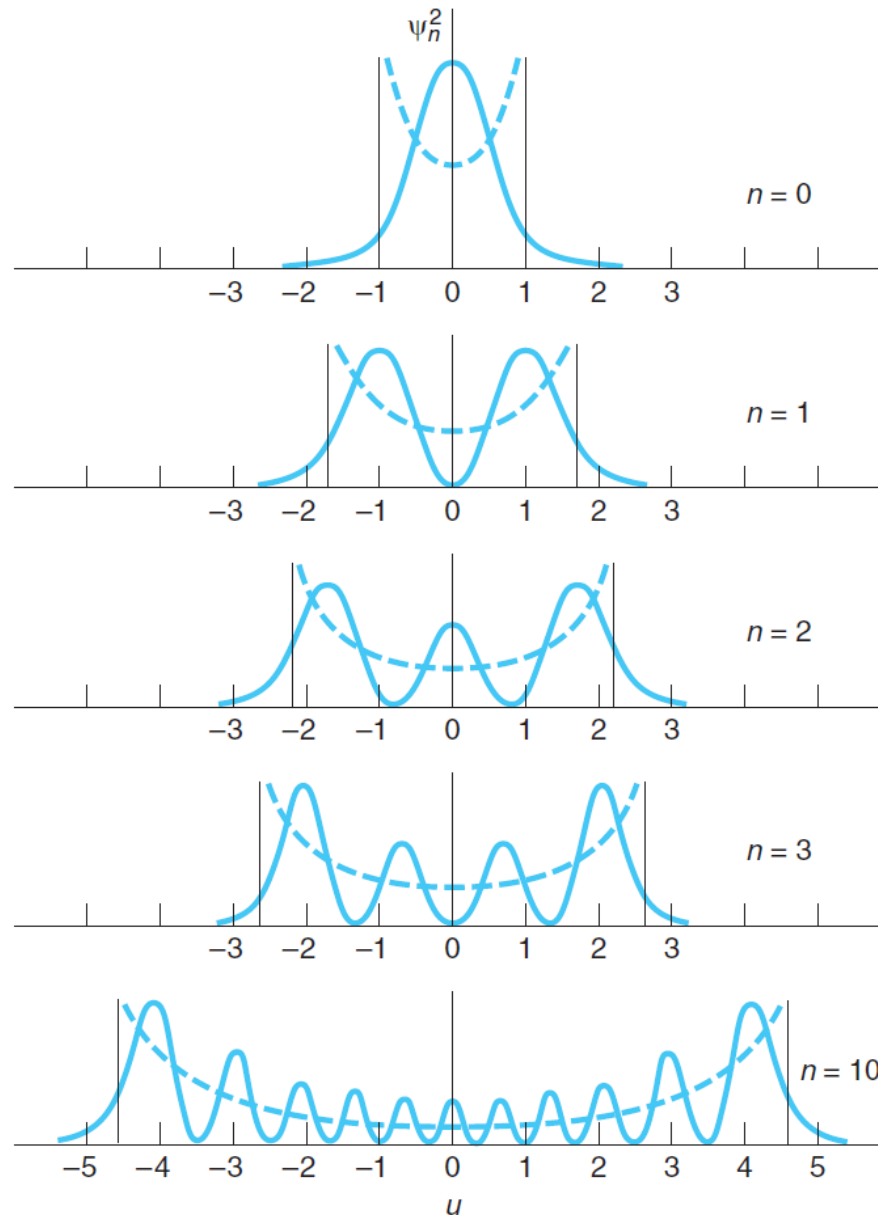
$$\psi_1(x) = A_1 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

$$\psi_2(x) = A_2 \left(1 - \frac{2m\omega x^2}{\hbar} \right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$



Oscylator harmoniczny - kwantowo

Figure 6-19 Probability density ψ_n^2 for the simple harmonic oscillator plotted against the dimensionless variable $u = (m\omega/\hbar)^{1/2}x$, for $n = 0, 1, 2, 3$, and 10. The dashed curves are the classical probability densities for the same energy, and the vertical lines indicate the classical turning points $x = \pm A$.



Oscylator harmoniczny - kwantowo

W mechanice kwantowej określa się warunki w jakich cząstka może zmienić swój stan kwantowy:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* x \psi_m dx = 0 \quad \text{unless} \quad n = m \pm 1$$

Czyli możliwe są tylko takie przejścia gdy:

$$\Delta n = \pm 1$$

Są to tzw. **reguły wyboru** przejść między stanami

Zatem różnica energii podczas takich przejść musi być równa : $\hbar\omega$
Gdyż energia jest związana ze stanem n zależnością:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

Jest zatem dokładnie tak jak zapostulował M. Planck kiedy wyjaśniał mechanizm powstawania promieniowania ciepłego !!!!

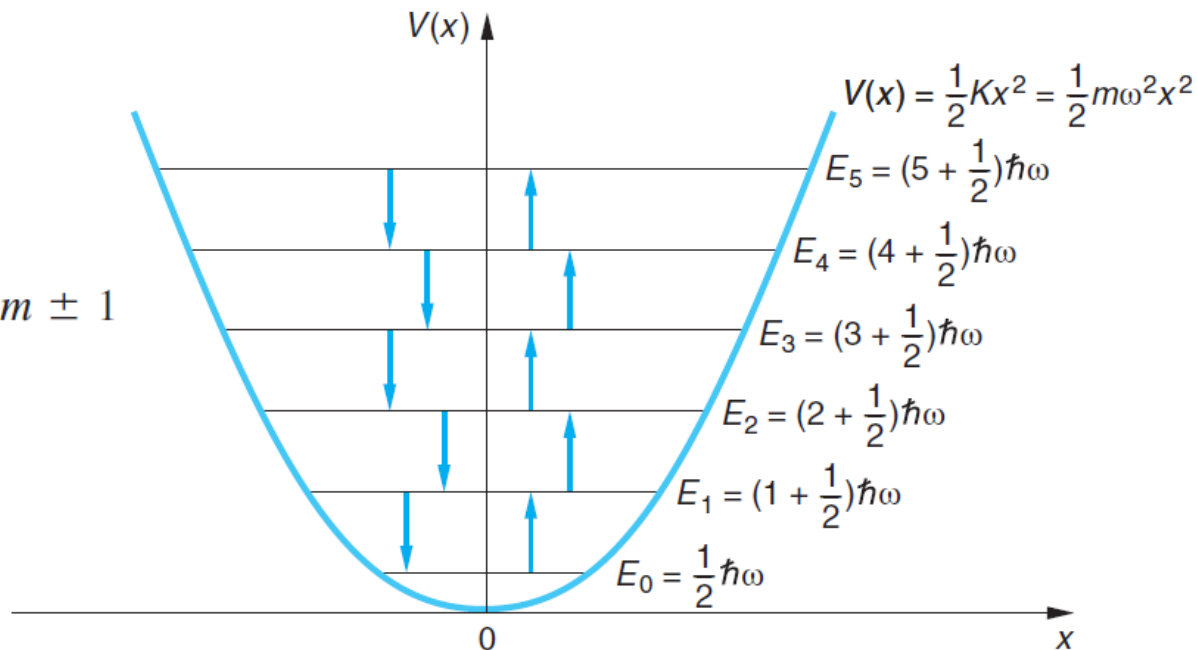


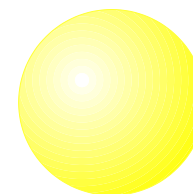
Figure 6-20 Energy levels in the simple harmonic oscillator potential. Transitions obeying the selection rule $\Delta n = \pm 1$ are indicated by the arrows (those pointing up indicate absorption). Since the levels have equal spacing, the same energy $\hbar\omega$ is emitted or absorbed in all allowed transitions. For this special potential, the frequency of the emitted or absorbed photon equals the frequency of oscillation, as predicted by classical theory.

Co to jest atom? – trochę historii

Demokryt: V w. p.n.e

najmniejszy, niepodzielny metodami chemicznymi składnik materii.

atomos - niepodzielny



XVII i XVIII i XIX w. n.e.

- osiągnięcia w nowoczesnej chemii (Proust, Gay-Lussac, Lavoisier, Dalton etc.)

hipoteza Avagadro

($N_A = 6.022 \times 10^{23}$ atomów/mol)

masa atomowa

$u \approx 1.66 \times 10^{-27}$ kg

rozmiar $\approx 1 \text{ \AA}$ (1×10^{-10} m)

jeden typ atomu dla każdego pierwiastka

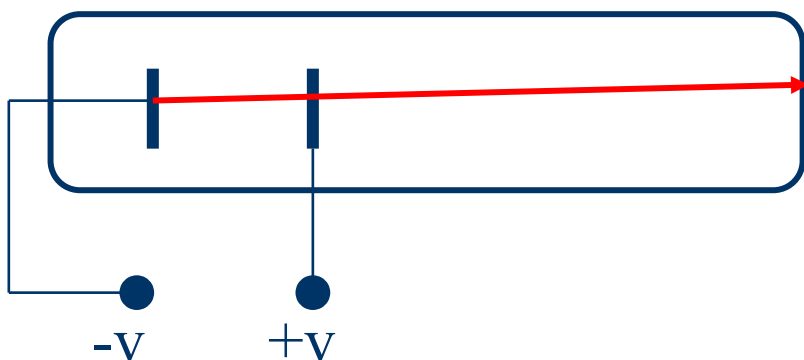
Dalton – powrót atomistycznej koncepcji budowy materii

robiąc pomiary mas atomowych spostrzegł, że masy atomowe są wielokrotnościami masy atomu wodoru

Co to jest atom? – trochę historii

Odkrycie elektronu

badanie elektrycznych wyładowań w gazach w XIX w. – „promienie katodowe”



Thomson badał promieniowanie ultrafioletowe powstające w lampie katodowej. Zainspirowany pracami Maxwella stwierdził, że promienie katodowe są strumieniem ujemnie naładowanych cząstek, które nazwał korpuskułami, a które dziś znamy jako **elektrony**.

1897 J.J. Thompson

„promienie katodowe” mają masę
masa ta jest proporcjonalna do ładunku

wyznaczył doświadczalnie q/m w „promieniach katodowych” i udowodnił że są to cząstki - elektrony

Później Miliken wyznaczył ładunek elektronu $= 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
więc można było wyliczyć jaka jest jego masa $= 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$



Co wiedzano o atomach w XIX w.?

Atomy są stabilne:

Wszystkie atomy które tworzą
świat wokół nas są tymi
samymi atomami
uformowanymi biliony lat temu

Atomy zawierają elektrony

które mają masę (0.05% atomu) i
posiadają ładunek ujemny

Atomy posiadają też ładunek dodatni

aby atom był elektrycznie obojętny

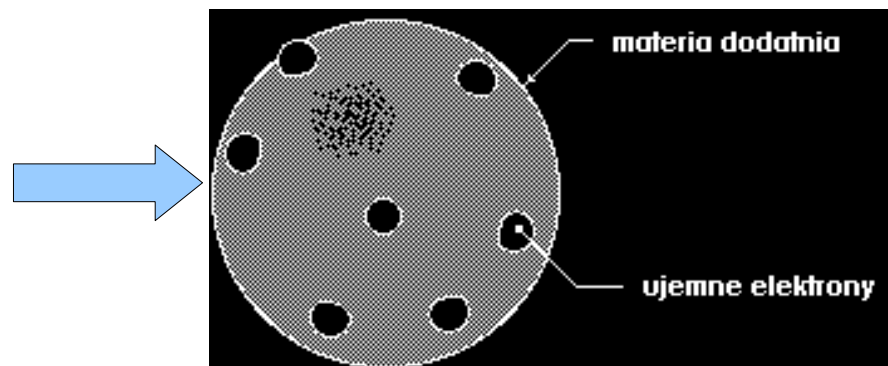
Atomy emitują i absorbują światło

np. gazowy wodór (albo sód)
pochłania tylko wybrane długości fal
padającego promieniowania e-m, ale
także odpowiednio „pobudzony”
potrafi emitować promieniowanie e-m
o tych samych długościach fal.

Pierwsze modele atomu

Model atomu – Thomson

model „ciasteczka z rodzynkami”
dodatnio naładowany kulisty atom z
elektronami o ujemnych ładunkach
rozmieszczonych w środku

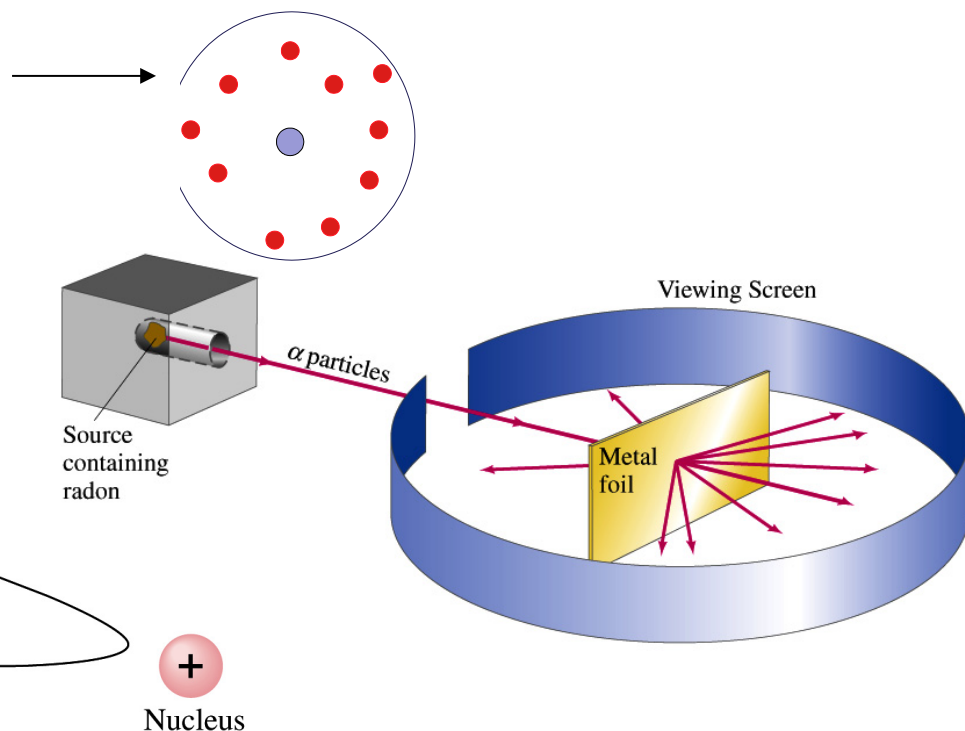


Model atomu – Rutherford

odkrył, że dodatnio naładowane **jądro**
atomu skupia w sobie większość masy
i jednocześnie jest bardzo małe
($\sim 10^{-15}\text{m}$) w porównaniu z rozmiarami
całego atomu ($\sim 10^{-10}\text{m}$)

Atom jest w 99.9999999999 % pusty

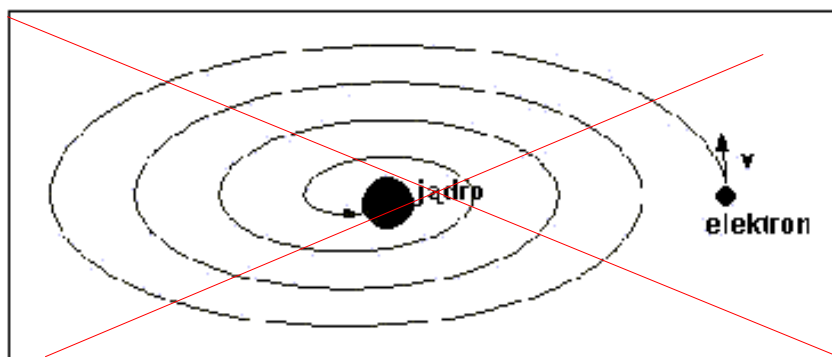
Elektrony poruszają się wokół jądra (ale
jak???)



Pierwsze modele atomu

Dlaczego, gdy atom jest w spoczynku, elektrony poruszając się ruchem przyspieszonym wokół jądra nie emitują fali elektromagnetycznej?

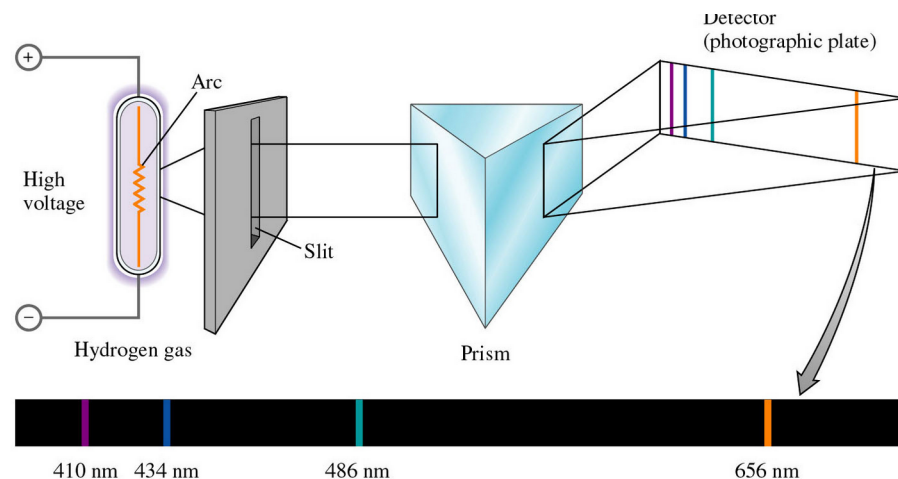
dlaczego elektrony nie spadają na jądro?



W planetarnym modelu atomu, elektron powinien wypromieniowywać energię i po spirali spaść na jądro.

Atomy emitują i absorbują światło, ale dlaczego atomy emitują (absorbują) tylko wybrane dł. fali światła? - problem z widmami atomowymi.

Przykład: dł.fali emitowane przez wodór



(b)

Promieniowanie wodoru jest „dyskretne” -
widmo liniowe

Długości fal „prążków” spełniają pewną zależność:

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

$$R \approx 1.1 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

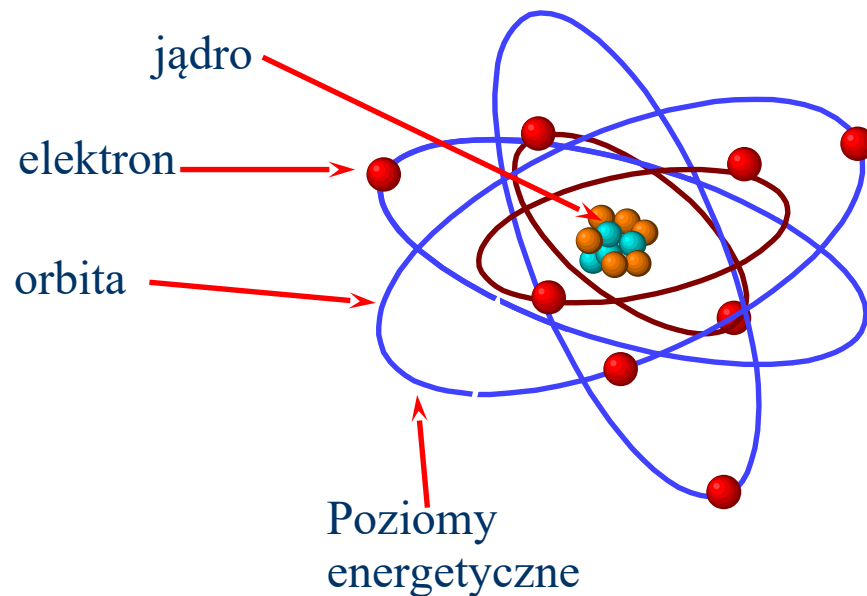
Model atomu Bohra

Założenia:

Elektrony są przyciągane przez jądro siłą elektrostatyczną Coulomba

Elektrony poruszają się tylko po kołowych orbitach i tylko niektóre z tych orbit są stabilne!

Tym orbitom odpowiadają określone energie elektronu
- zatem elektron może mieć tylko określone energie!!!
(znowu kwantyzacja energii!!! podobnie jak u Planck'a)



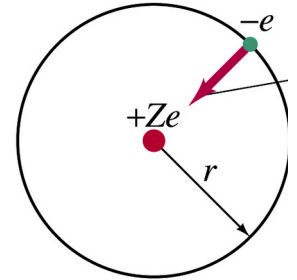
Model Bohra atomu wodoru

Postulat 1: Elektrony są przyciągane przez jądro siłą elektrostatyczną Coulomba, zatem

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r^2}$$

siła dośrodkowa

siła Coulomb'a



Postulat 2: Dozwolone są tylko te orbity które zapewniają, że moment pędu elektronu jest wielokrotnością stałej Planck'a !!!

Orbity elektronów są skwantowane !!!

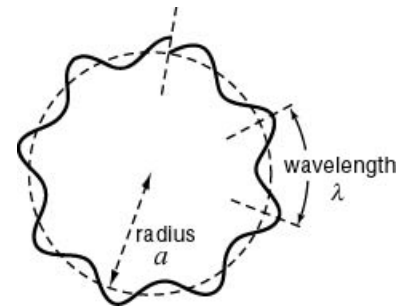
$$mvr = n\hbar$$

wartość momentu pędu

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

Na obwodzie orbity dozwolonej w modelu Bohra mieści się całkowita liczba długości fal de Broglie'a.

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



Model Bohra atomu wodoru

Z tych postulatów można wyznaczyć promień orbity:

$$v = \frac{n\hbar}{mr}$$

$$rmv^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q^2$$

$$rm \frac{n^2 \hbar^2}{m^2 r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q^2$$

$$\frac{n^2 \hbar^2}{mr} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q^2$$

Widać, że promień orbity zależy tylko od **n** - pewnej liczby całkowitej – orbity elektronu możemy zatem numerować

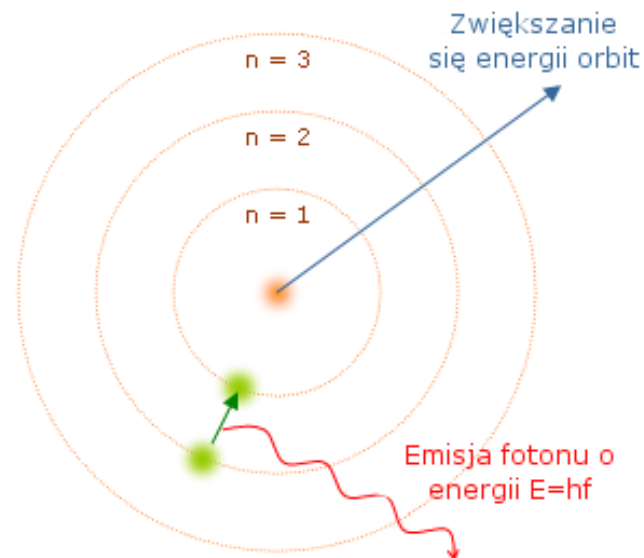
$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{mq^2} = n^2 a_0$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{mq^2} = 0.0529nm = 0.529\text{\AA}$$

Model atomu Bohra

Atom promieniuje jeśli elektron przeskakuje z orbity dalszej od jądra na orbitę bliżej jądra

Atom absorbuje promieniowanie jeśli elektron przeskakuje z orbity bliżej jądra na orbitę dalszą od jądra

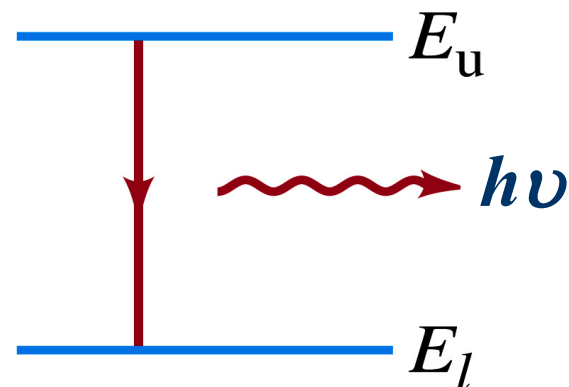


$$E_1 = -13.6 \text{ [eV]}$$

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

$$E_u - E_l = -|E_1| \left[\frac{1}{n_u^2} - \frac{1}{n_l^2} \right] = h\nu$$

wyższa orbita – wyższy poziom energetyczny



niższa orbita – niższy poziom energetyczny

Model Bohra atomu wodoru

Schemat poziomów energetycznych w atomie wodoru.

Liczba kwantowa n oznacza numer poziomu.

Możliwe są różne sposoby „spadania” elektronu na niższe poziomy – odpowiadają temu tzw. Serie Lymana, Balmera, Paschena... od nazwisk ich odkrywców.

