

F4110
Kvantová fyzika atomárních soustav
letní semestr 2012 - 2013

I.
Měřítko kvantového světa
Cvičení

KOTLÁŘSKÁ 27. ÚNORA 2013

Řešace neurčitosti

Odhad bez počítání
pro ionizační potenciály atomů

Harmonický oscilátor

Odhad z Heisenbergových relací:
energie nulových kmitů

3. Planckova konstanta jako hraniční hodnota

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad \text{relace neurčitosti}$$

Toto je generická forma Heisenbergových relací. Vlastně je to \gtrsim , ne \geq
Pořádně odvozeno

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad \text{relace neurčitosti}$$

$$(\Delta x)^2 = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle, \quad (\Delta p)^2 = \dots$$

To se nám teď hodí na oscilátor, kde pracujeme vlastně přesně, i když tak dalece bez počítání. Musí se ale připomenout

$$\langle O_{\text{op}} \rangle = \langle \psi | O_{\text{op}} | \psi \rangle = \int dx \psi^*(x) O_{\text{op}} \psi(x)$$

Odhad z relace neurčitosti

To je standard, takže jen schematicky

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle$$

$$= \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 \quad \text{protože} \quad \langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$$

$$= \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar^2}{4} (\Delta p)^{-2} \quad \text{z relace neurč. pro rovnost}$$

$$\equiv \frac{1}{2m} \left(q + \frac{1}{4} m^2 \omega^2 \hbar^2 / q \right)$$

Z podmínky

$$\frac{\partial E}{\partial q} = 0$$

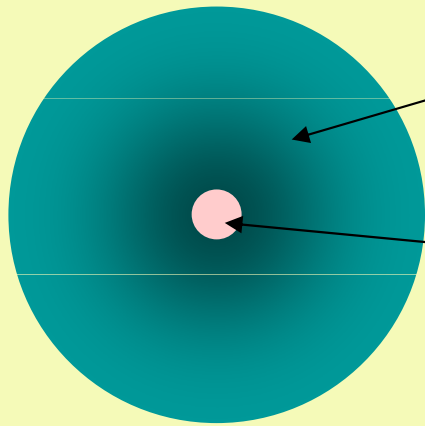
$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad \text{Energie nulových kmitů podle očekávání}$$

Velikost atomů

Jaké jsou empirické údaje o velikosti atomů

Jaké jsou teoretické důvody pro tyto údaje

Opakování o atomech



OBAL
Z elektronů

JÁDRO
Z protonů
N=A-Z neutronů

atom $\frac{A}{Z}X$

<http://www.ptable.com>

náboj jádra

$$Q = Z |e|$$

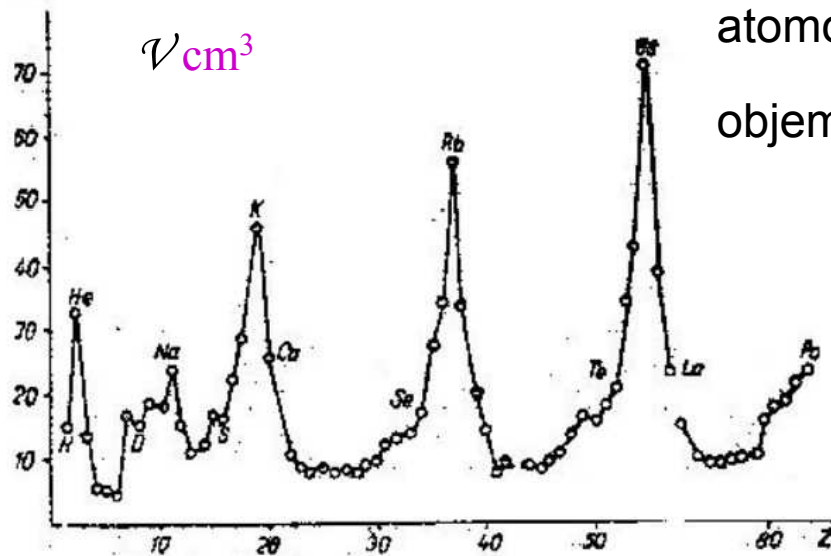
hmotnost atomu

$$M \sim A u$$

poloměr jádra

$$R = r_0 A^{1/3}$$

$$r_0 = 1,2 \times 10^{-15} \text{ m}$$



atomový objem = rel. at. hmotnost $g / 10^3 \times$ hustota

objem na atom = atomový objem / Avogadr. číslo

$$V = 10^{-3} M / \rho$$

$$r = \left(\frac{3}{4\pi} \times V / N_A \right)^{1/3}$$

... odhad z empirických dat

Obr. 4. Závislost atomového objemu na atomovém čísle

Výpočet empirických poloměrů

$$r = \left(\frac{3}{4\pi} \times \mathcal{V} / N_A \right)^{\frac{1}{3}} \text{ chceme molární (atomový) objem v nm}$$

$$1 \text{ cm} = 10^{-2} \text{ m} = 10^7 \text{ nm}$$

$$r = 10^7 \left(\frac{3}{4\pi} N_A^{-1} \right)^{\frac{1}{3}} \mathcal{V}^{\frac{1}{3}}$$

$$r = 0.0734 \times \mathcal{V}^{\frac{1}{3}}$$

Relace neurčitosti -- aplikace

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad \text{relace neurčitosti}$$

Propojíme prostorovou rozlehlost L a energii E vázaného stavu částice o hmotnosti m ... *kriterium ultrakvantového režimu*

1. krok kinetická energie částice ve vázaném stavu (v potenciál. jámě)

$$mE_{\text{kin}} \approx (\Delta p)^2$$

energie kvant. fluktuací

2. krok odhad z relace neurčitosti

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{\hbar}{L}$$

~ příznak ultrakvantového stavu

3. krok kinetická a celková energie stejného řádu

$$m \cdot E \cdot L^2 \approx \hbar^2$$

Platí pro coulombickou interakci:
⇒ Stabilita atomů a hmoty vůbec

Odhad ionizační energie atomu z relace neurčitosti

$$m \cdot E \cdot L^2 \approx \hbar^2 \quad \text{obecný vztah}$$

$$m_e \cdot I \cdot r^2 \approx \hbar^2 \quad \text{odhad ionizačního potenciálu}$$

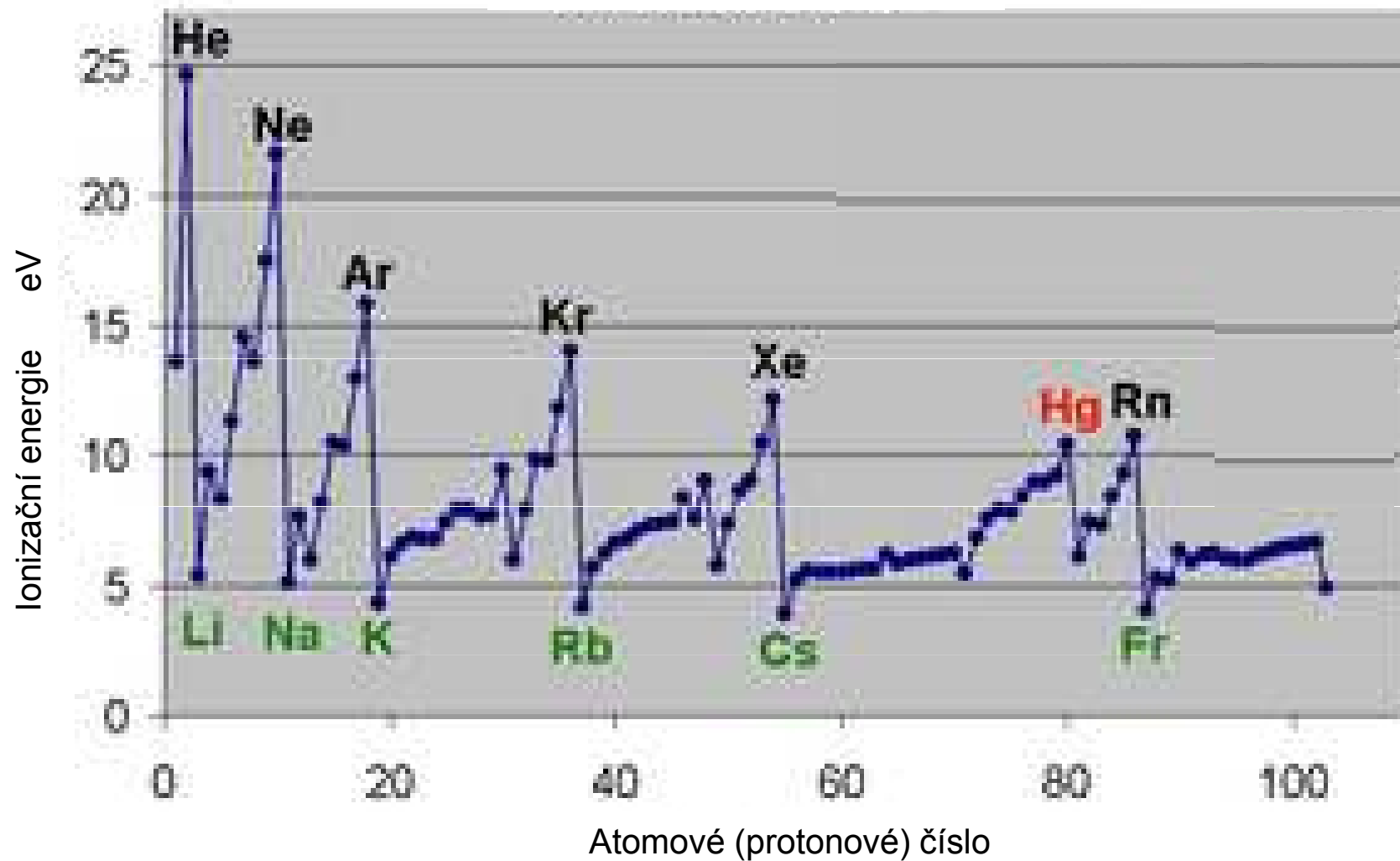
použijeme našich jednotek nm, eV, fs

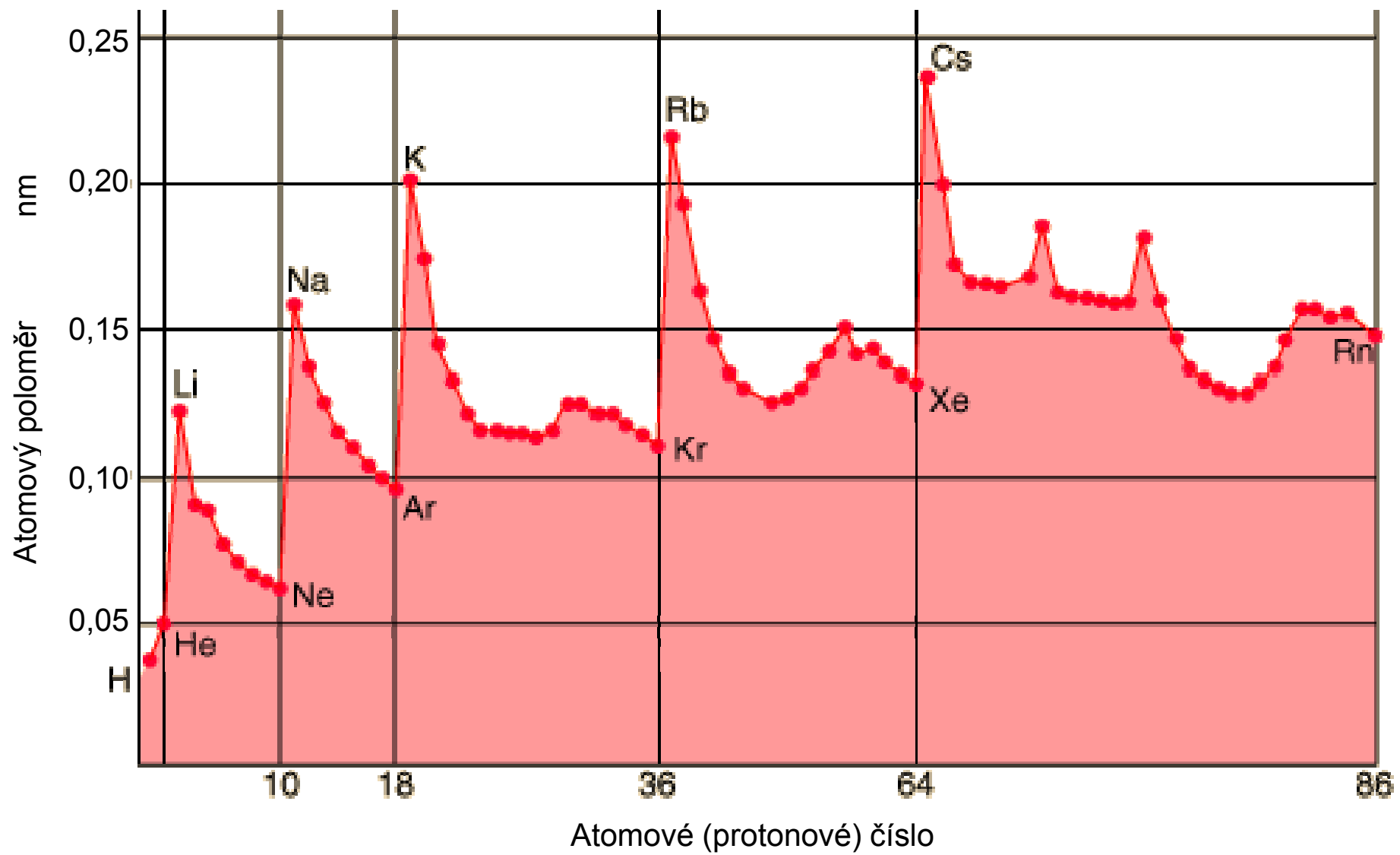
$$\frac{\hbar^2}{m_e} = \frac{0,66^2}{5,7} \approx 0.076$$

Empirické poloměry atomů mají hodnoty v řádu 0,1 nm (1Å)

Energie valenčních elektronů v atomech pak vycházejí v řádu eV

Ionizační energie atomů





Šikovní jednotky

Pro odhady veličin v atomárním světě je vhodná volba jednotek velmi důležitá

Šikovné jednotky -- k zapamatování

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \quad N_A = 6.02 \times 10^{23}$$

$$e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C} \quad eN_A = F$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$c = 3.00 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1} \quad k_B N_A = R$$

$$u = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg} \quad uN_A = 0.001 \text{ kg}$$

Jednotky atomistice přiměřené v rámci soustavy SI

nm, eV, fs, V, K (místo m, kg, s, A, K)

1 eV je energie, kterou elementární náboj získá při průchodu potenciálním rozdílem 1 V,

$$1 \text{ eV} = 1.60 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Pak

$$\hbar = 0.66 \text{ eVfs} \quad m_e = 5.7 \text{ eVfs}^2 \text{ nm}^{-2}$$

$$e = 1.00 \text{ eVV}^{-1} \quad k_B = 1/11604 \text{ eVK}^{-1}$$

$$c = 3.00 \times 10^2 \text{ nmfs}^{-1}$$

Kde najdeme hodnoty fyzikálních konstant

- Český metrologický institut

<http://www.cmi.cz/index.php?lang=1&wdc=313>

- NIST National Institute of Standards and Technology

<http://www.nist.gov/pml/data/index.cfm>

- CODATA 2010 adjustment

[P. J. Mohr, B. N. Taylor, and D. B. Newell, Rev. Mod. Phys. **84**\(4\), 1527-1605 \(2012\)](#)

Atomové jednotky

Rozměrové úvahy

Atomové přirozené jednotky

Přirozené soustavy jednotek závisejí na výběru fundamentálních konstant

jednotky	G	c	\hbar	e'^2	m_e	m_p	hodí se v
Planckovy	•	•	•				kvantové gravitaci
relativistické		•	•		(•)	(•)	kvantové elektrodynamice
atomové			•	•	•		atomové fyzice

Atomové jednotky

- Inspirace od *Bohra*(1913) **Rozměrová úvaha → relevantní veličiny**
- Dvě podmínky pro Bohrov poloměr a Hartreeho energii
(rozměrové kombinace ... kinetická energie a Coulomb. potenciál. energie)

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}, \quad E_0 = \frac{e'^2}{a_0}$$

Atomové přirozené jednotky

Přirozené soustavy jednotek závisejí na výběru fundamentálních konstant

jednotky	G	c	\hbar	e'^2	m_e	m_p	hodí se v
Planckovy	•	•	•				kvantové gravitaci
relativistické		•	•		(•)	(•)	kvantové elektrodynamice
atomové			•	•	•		atomové fyzice

Atomové jednotky

- Inspirace od *Bohra*(1913) **Rozměrová úvaha** → **relevantní veličiny**
- Dvě podmínky pro Bohrovův poloměr a Hartreeho energii
(rozměrové kombinace ... kinetická energie a Coulomb. potenciál. energie)

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}, \quad E_0 = \frac{e'^2}{a_0}$$

- Výsledek

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e'^2}, \quad E_0 = \frac{m_e e'^4}{\hbar^2}$$

v plné shodě s
Bohrovou teorií

Atomové přirozené jednotky -- měřítko světa atomů

zákl. konstanty	\hbar	e^2	m_e	e
-----------------	---------	-------	-------	-----

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

a_0

E_0

ℓ_0

p_0

v_0

t_0

Atomové přirozené jednotky -- měřítko světa atomů

zákl. konstanty	\hbar	e'^2	m_e	e
-----------------	---------	--------	-------	-----

$$\alpha = \frac{e'^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e'^2} = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$E_0 = \frac{m_e e'^4}{\hbar^2} = 4.36 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$\ell_0 = \hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$p_0 = \frac{\hbar}{a_0} = \frac{m_e e'^2}{\hbar} = 1.98 \times 10^{-24} \text{ m}$$

$$v_0 = \frac{p_0}{m_e} = \frac{e'^2}{\hbar} = 2.19 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$t_0 = \frac{\hbar}{E_0} = \frac{\hbar^3}{m_e e'^4} = 2.42 \times 10^{-17} \text{ s}$$

Appendix: Atomic units

Introducing atomic units, $e = m_0 = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1$, considerably simplifies all formulae of quantum mechanics. In Tab. 0.1 we present SI values of atomic units.

Tab. 0.1. The conversion factors of atomic units to SI and other units based on the 2006 CODATA adjustment of the value of constants [45].

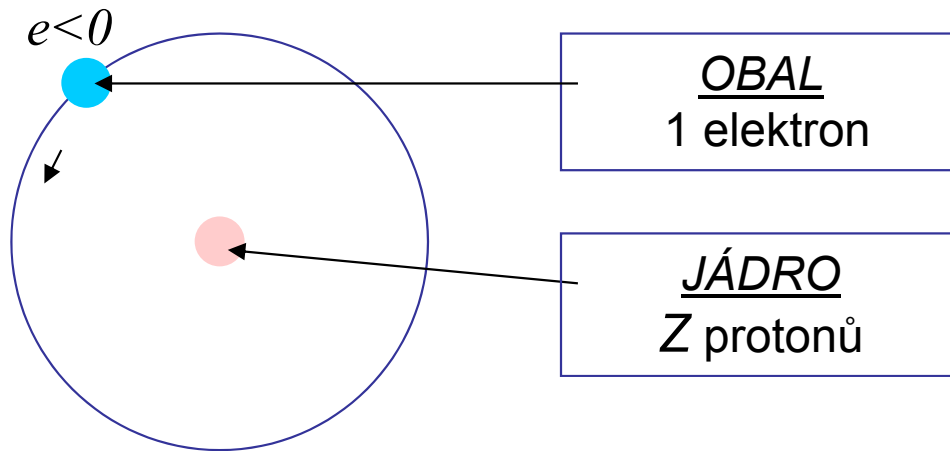
a.u. of	Symbol	Numerical value	Unit
charge: elementary charge	e	$1.602\,176\,487(40) \times 10^{-19}$	C
mass: electron mass	m_e	$9.109\,382\,15(45) \times 10^{-31}$	kg
action: reduced Planck constant	\hbar	$1.054\,571\,628(53) \times 10^{-34}$	J s
length: Bohr radius (bohr)	a_0	$0.529\,177\,208\,59(36) \times 10^{-10}$	m
		$0.529\,177\,208\,59(36) \times 10^{-10}$	Å
energy: Hartree energy (hartree)	E_h	$4.359\,743\,94(22) \times 10^{-18}$	J
		27.211 383 86(68)	eV
		$2.194\,746\,313\,705(15) \times 10^5$	cm ⁻¹
		$2.625\,499\,617 \times 10^3$	kJ mol ⁻¹
time	\hbar/E_h	$2.418\,884\,326\,505(16) \times 10^{-17}$	s
force	E_h/a_0	$8.238\,722\,06(41) \times 10^{-8}$	N
velocity	$a_0 E_h/\hbar$	$2.187\,691\,2541(15) \times 10^6$	m s ⁻¹
momentum	\hbar/a_0	$1.992\,851\,565(99) \times 10^{-24}$	kg m s ⁻¹
current	$e E_h/\hbar$	$6.623\,617\,63(17) \times 10^{-3}$	A
charge density	e/a_0^3	$1.081\,202\,300(27) \times 10^{12}$	C m ⁻³
electric potential	E_h/e	27.211 383 86(68)	V
electric field	E_h/ea_0	$5.142\,206\,32(13) \times 10^{11}$	V m ⁻¹
electric field gradient	E_h/ea_0^2	$9.717\,361\,66(24) \times 10^{21}$	V m ⁻²
electric dipole moment	ea_0	$8.478\,352\,81(21) \times 10^{-30}$	C m
		2.541 746 23	Debye
electric quadrupole moment	ea_0^2	$4.486\,551\,07(11) \times 10^{-40}$	C m ²
electric polarizability	$e^2 a_0^2/E_h$	$1.648\,777\,2536(34) \times 10^{-41}$	C ² m ² J ⁻¹
1st hyperpolarizability	$e^3 a_0^3/E_h^2$	$3.206\,361\,533(81) \times 10^{-53}$	C ³ m ³ J ⁻²
2nd hyperpolarizability	$e^4 a_0^4/E_h^3$	$6.235\,380\,95(31) \times 10^{-65}$	C ⁴ m ⁴ J ⁻³
magnetic flux density	\hbar/ea_0^2	$2.350\,517\,382(59) \times 10^5$	T
magnetic dipole moment	$\hbar e/m_e$	$1.854\,801\,830(46) \times 10^{-23}$	J T ⁻¹
magnetizability	$e^2 a_0^2/m_e$	$7.891\,036\,433(27) \times 10^{-29}$	J T ⁻²
permittivity	$e^2/a_0 E_h$	$1.112\,650\,056... \times 10^{-10}$	F m ⁻¹

Zobecnění Bohrovy teorie

Iont s jediným elektronem

Meze nerelativistické teorie
O konstantě jemné struktury

Semiklasický popis vodíkupodobného iontu podle Bohra



iont ${}^Z_A\text{A}^{(Z-1)+}$

náboj jádra $Q = Z |e|$
 hmotnost atomu $M \sim A u \gg 2Z u \gg m_e$
 poloměr jádra $R = r_0 A^{1/3} \ll r$
 $r_0 = 1,2 \times 10^{-15} \text{ m}$

- Elektron obíhá rychlostí v kolem nehybného jádra. Má hybnost $p = m_e v$, moment hybnosti $m_e v r$, odstředivá síla je $m_e v^2 / r$... všechno klasické
- Přitahován je coulombickou silou

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2} \equiv \frac{Ze^2}{r^2}$$

- Připojeno je kvantování, prostřednictvím *kvanta akce*, Planckovy konstanty \hbar .
- Veličina ke kvantování vhodná má rozměr akce. To je právě moment hybnosti.

Bohrova teorie vodíkopodobného iontu

- Dvě podmínky pro Bohrov poloměr a Hartreeho energii

odstř. síla = dostř. síla

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{Z e'^2}{r^2}$$

Klasická podmínka

kvantování momentu hybnosti

$$m_e r v = k \cdot \hbar, \quad k = 1, 2, \dots$$

Kvantová podmínka

- Výsledek

$$r_k = a_Z \cdot k^2, \quad E_k = -\frac{1}{2} E_Z \cdot k^{-2}$$

$$a_Z = \frac{\hbar^2}{Z m_e e'^2} = \frac{1}{Z} a_0, \quad E_Z = \frac{Z^2 m_e e'^4}{\hbar^2} = Z^2 E_0$$

Vztah k relativitě

$$a_Z = \frac{\hbar^2}{Z m_e e'^2} = \frac{1}{Z} a_0, \quad E_Z = \frac{Z^2 m_e e'^4}{\hbar^2} = Z^2 E_0$$

$$\alpha = \frac{e'^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad \text{konstanta jemné struktury, bezrozměrná vazbová konstanta}$$

$$v_Z = p_Z / m_e = \hbar / m_e a_Z = Z e'^2 / \hbar = Z v_0 = Z \alpha \cdot c$$

$$E_Z = Z^2 E_0 = (Z \alpha)^2 \cdot m_e c^2$$

$$a_Z = (Z \alpha)^{-1} \cdot \hbar / m_e c = (Z \alpha)^{-1} \cdot \lambda_{\text{Compton}}$$

$$Z \alpha = \frac{Z}{137} \approx 1 \quad \text{nerelativistická podmínka}$$

Bohrova teorie spekter vodíku

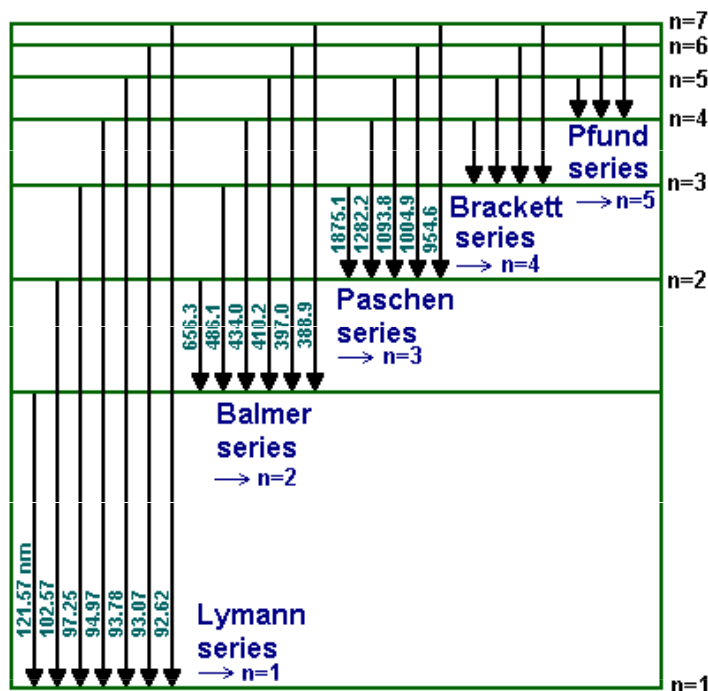
BALMEROVA FORMULE

empirická

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

$$R \approx 109700 \text{ cm}^{-1}$$

Rydbergova konstanta



BOHROVA FORMULE

teoretická

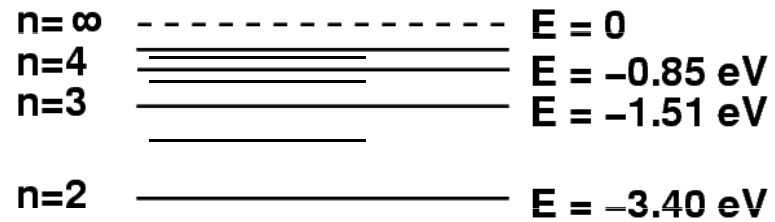
$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

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

$$\approx 109700 \text{ cm}^{-1}$$

Rydbergova konstanta

Identifikace Pickeringovy serie



PICKERINGŮV PROTOVODÍK

Identifikace Pickeringovy serie

n = ∞	-----	E = 0
n = 4	=====	E = -0.85 eV
n = 3	=====	E = -1.51 eV
n = 2	=====	E = -3.40 eV

PICKERINGŮV PROTOVODÍK

BOHROVA IDENTIFIKACE

Pro iont $Z\text{X}^{(Z-1)+}$

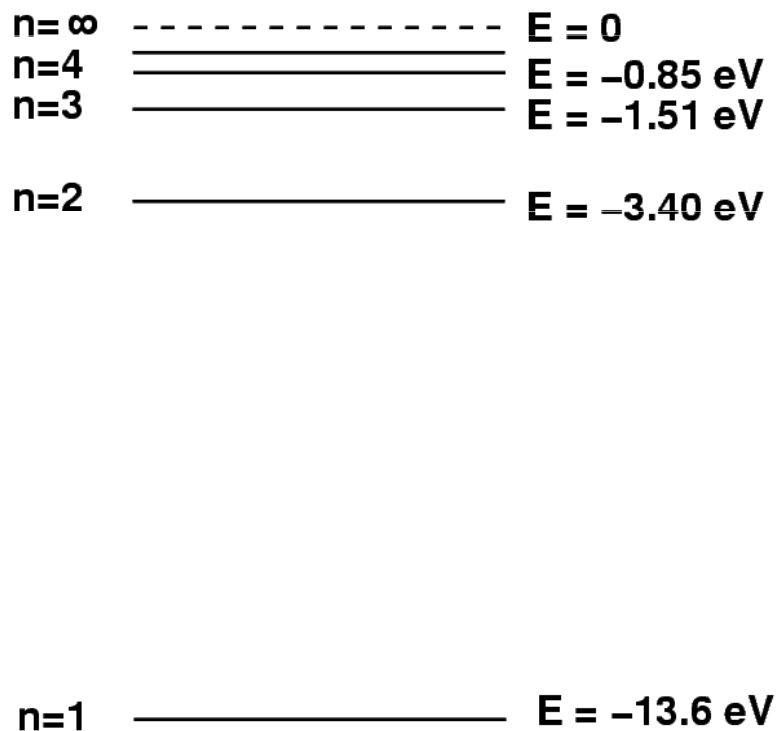
$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 R \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Pro iont He^+ (He(II)) $Z = 2$,

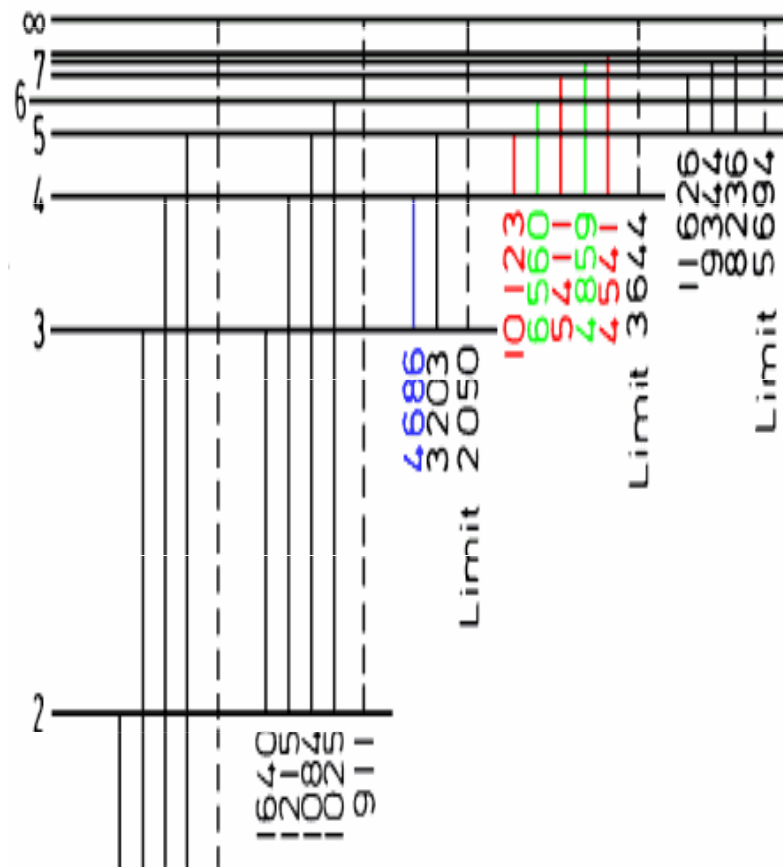
$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{(n/2)^2} - \frac{1}{(m/2)^2} \right)$$

n=1	=====	E = -13.6 eV
-----	-------	--------------

Identifikace Pickeringovy serie



VODÍK



HELIUM

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

Identifikace Pickeringovy serie: malý triumf

FWLEROVA NÁMITKA

$$R_{\text{He}} : R_{\text{H}} = 1.00161$$

BOHR ZAPOČETL POHYB VŮČI TĚŽIŠTI

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 R_X \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$$R_X = \frac{m}{1 + m/M_X} \frac{e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$$

The end