

# **Kvantová, atómová a subatómová fyzika**

**Rotátor a atóm vodíka**

# Kvantovanie momentu hybnosti

Vlastné hodnoty  $\hat{L}^2$

$$\hat{L}^2|\psi_{lm}\rangle = \hbar^2 l(l+1)|\psi_{lm}\rangle$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Vlastné hodnoty  $\hat{L}_z$

$$\hat{L}_z|\psi_{lm}\rangle = \hbar m|\psi_{lm}\rangle$$

$$m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l-1, l$$

**Len takéto hodnoty môžu byť výsledkom merania!**

# Rotátor

Energia otáčavého pohybu  $E = \frac{L^2}{2I}$

Môže nadobúdať len hodnoty:  $E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l + 1)$

Povolené sú len prechody  $\Delta l = \pm 1$   $\Delta E = \frac{\hbar^2}{I} (l + 1)$

Vyžarované sú frekvencie:  $\omega = \frac{\hbar}{I} (l + 1)$

Moment zotrvačnosti pre dvojatómovú molekulu  $I = \mu d^2$

Meraním spektier môžeme merať veľkosť molekúl

# Atóm vodíka

Potenciál

$$E_p(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Schrödingerova rovnica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(r, \vartheta, \varphi) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \psi(r, \vartheta, \varphi) = E\psi(r, \vartheta, \varphi)$$

Kvantovanie energie:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

# Vlnové funkcie atómu vodíka

Rozklad na radiálnu a uhlovú časť

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Niektoré najnižšie radiálne vlnové funkcie:

$$R_{10} = \left(\frac{1}{a}\right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-r/a}$$

$$R_{20} = \left(\frac{1}{2a}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) 2e^{-r/2a}$$

$$R_{21} = \left(\frac{1}{2a}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{\sqrt{3}a} 2e^{-r/2a}$$

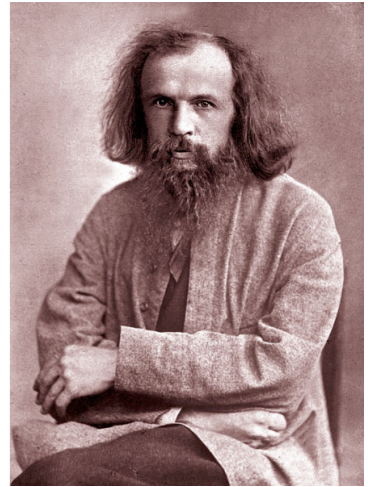
Bohrov polomer

$$a = \frac{\pi h^2 \varepsilon_0}{me^4}$$

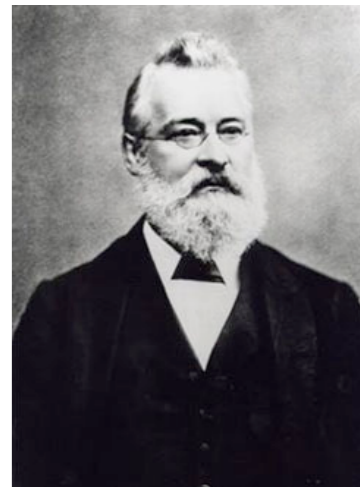
# Atómy sa dajú usporiadať podľa vlastností

Dmitrij Ivanovič Mendelejev, 1869 (skoro Nobelova cena 1905)

Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
Period ↓																			
1	1 H																		2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F		10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl		18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br		36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I		54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57 La *	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At		86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac *	104 Rf *	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts		118 Og
				* 58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
				* 90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		



Mendeleev



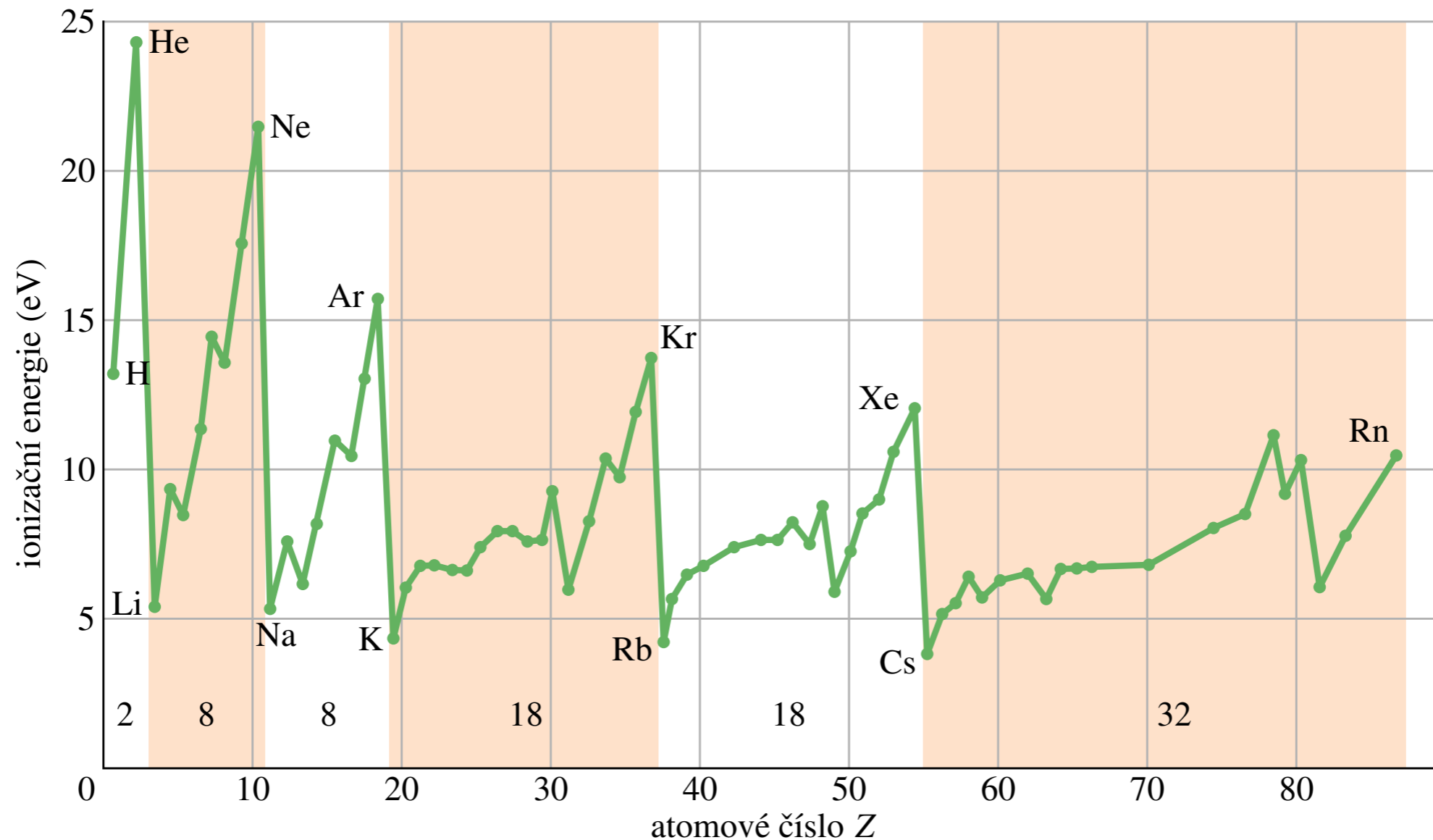
John Newlands, 1865



Lothar Meyer, 1864

# Ionizačná energia

Energia, potrebná na vybratie najslabšie viazaného elektrónu z obalu atómu



najvyššia pre vzácne plyny - najstabilnejšie atómy

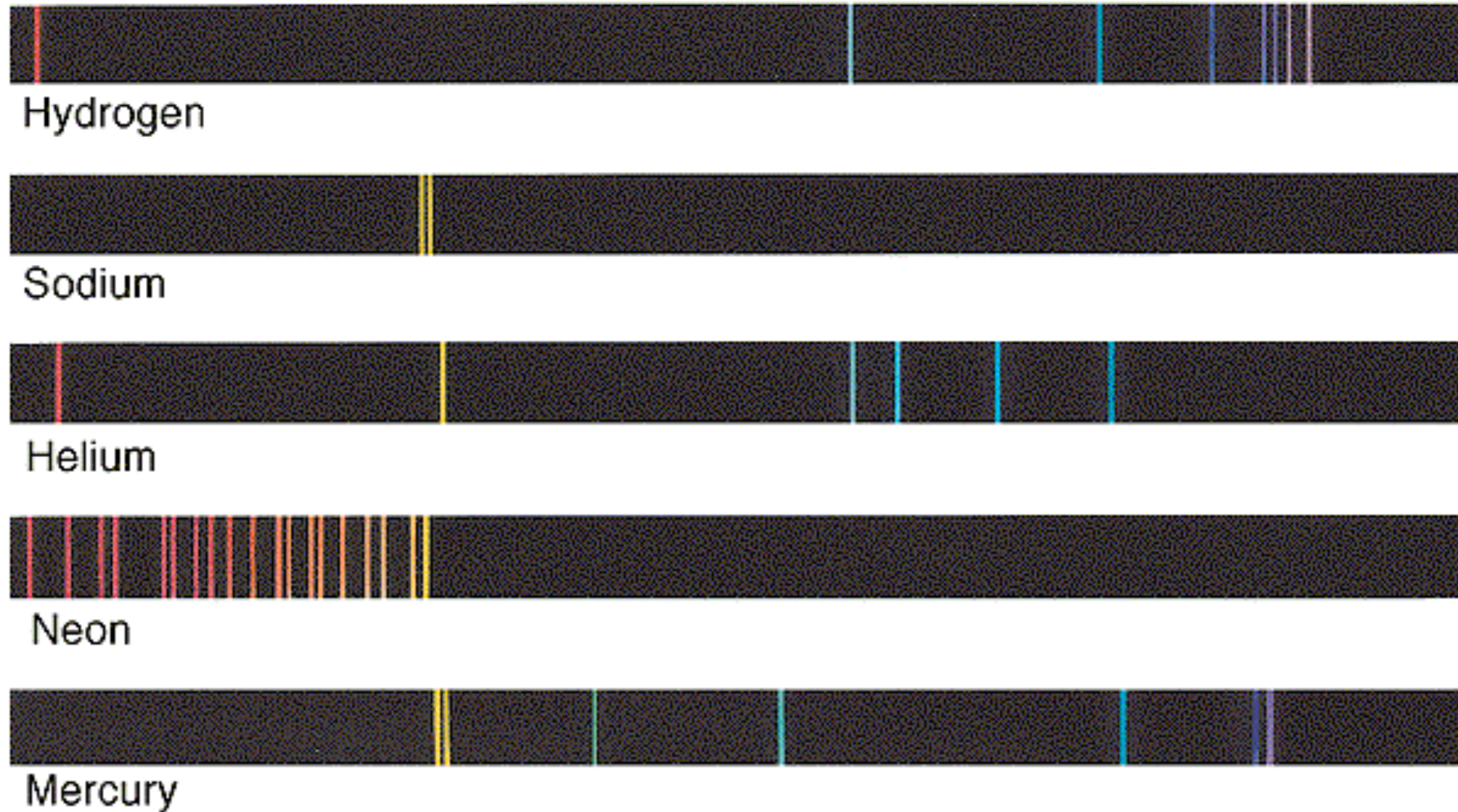
najnižšia pre alkalické kovy - najslabšie viazané, navyše reaktívne

vysvetlenie vyplýva z usporiadania kvantových stavov elektrónu (nasledujúca prednáška)

# Absorpční a emisné spektrá

V zásade musí platiť, že energia fotónu je daná  $h\nu = E_v - E_n$

Každý atóm má svoje charakteristické spektrum, závisiace od energetických hladín.





# Moment hybnosti a magnetický moment

Klasický obraz (nie platný, ale poskytujúci ilustráciu)

moment hybnosti

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

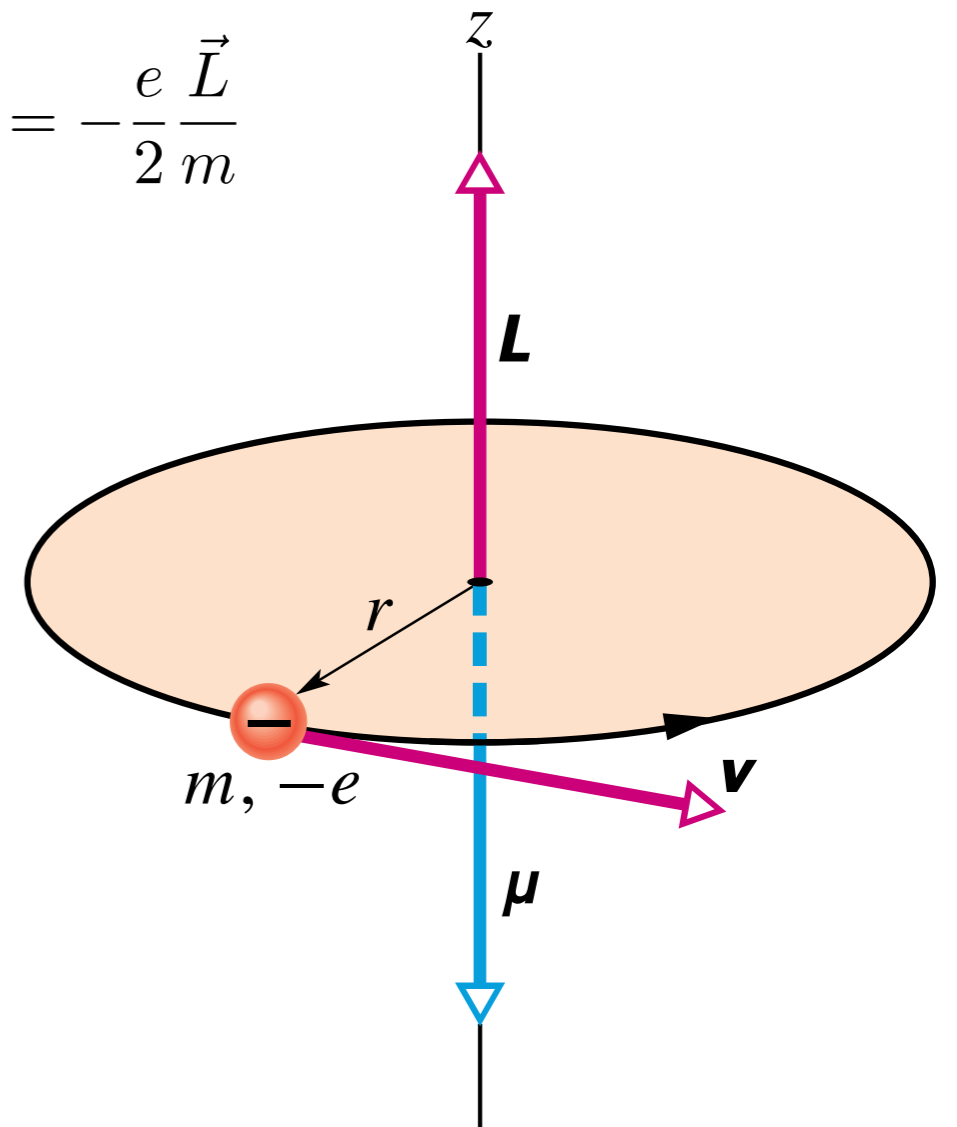
magnetický moment

$$\vec{\mu} = I\vec{S} = Qf\pi r^2\vec{n} = -e\frac{v}{2\pi r}\pi r^2\vec{n} = -\frac{e}{2}vr\vec{n} = -\frac{e}{2m}\vec{L}$$

gyromagnetický pomer

$$\gamma = -\frac{e}{2m}$$

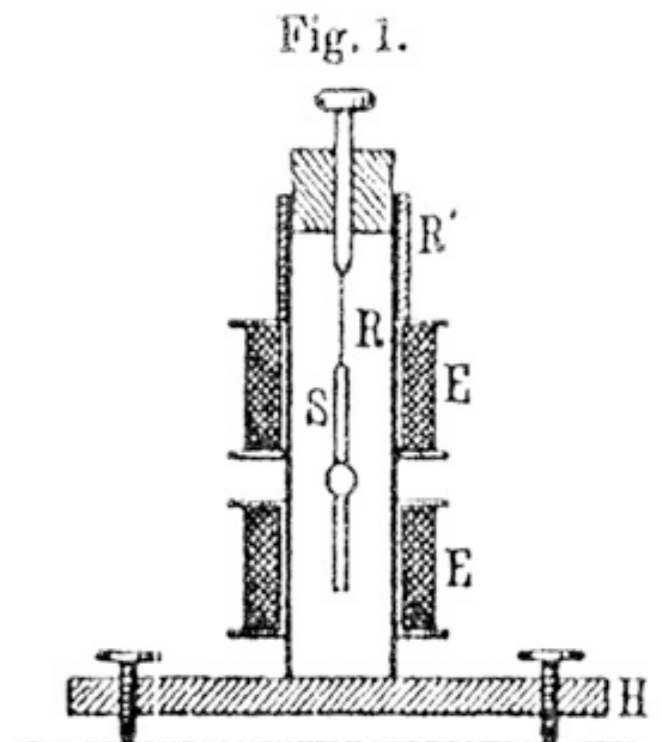
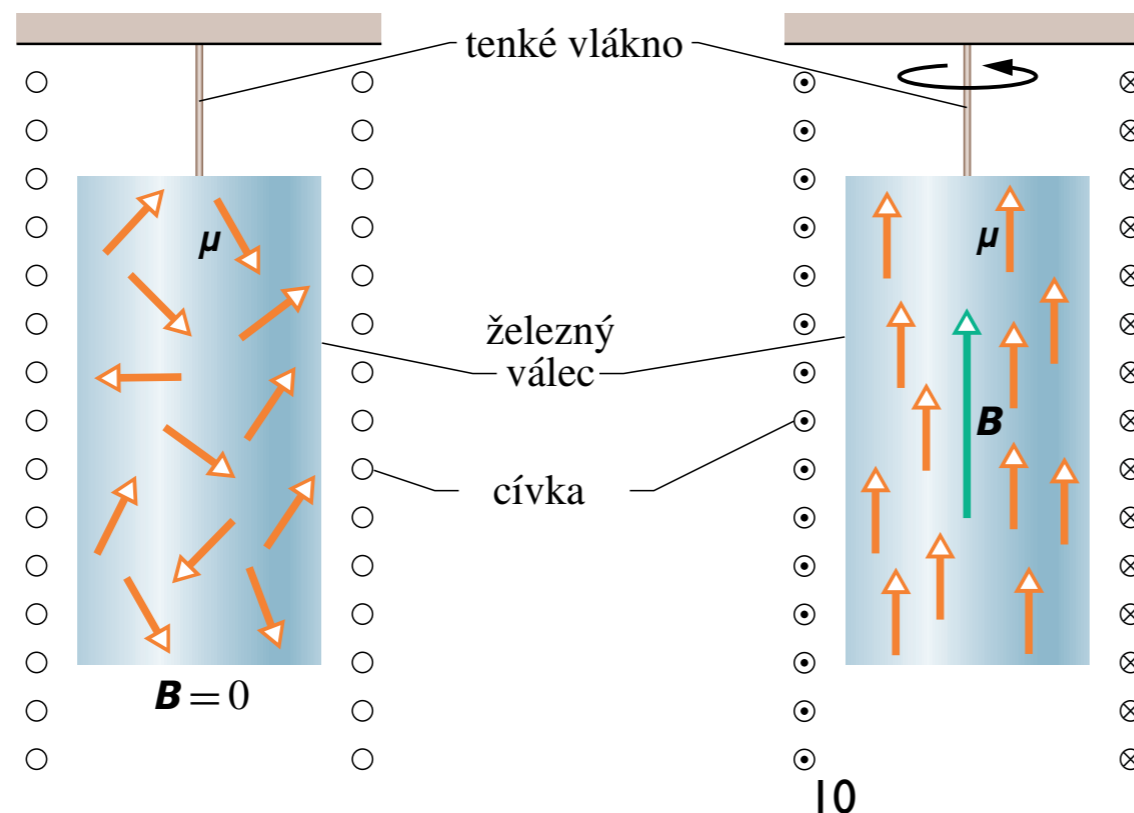
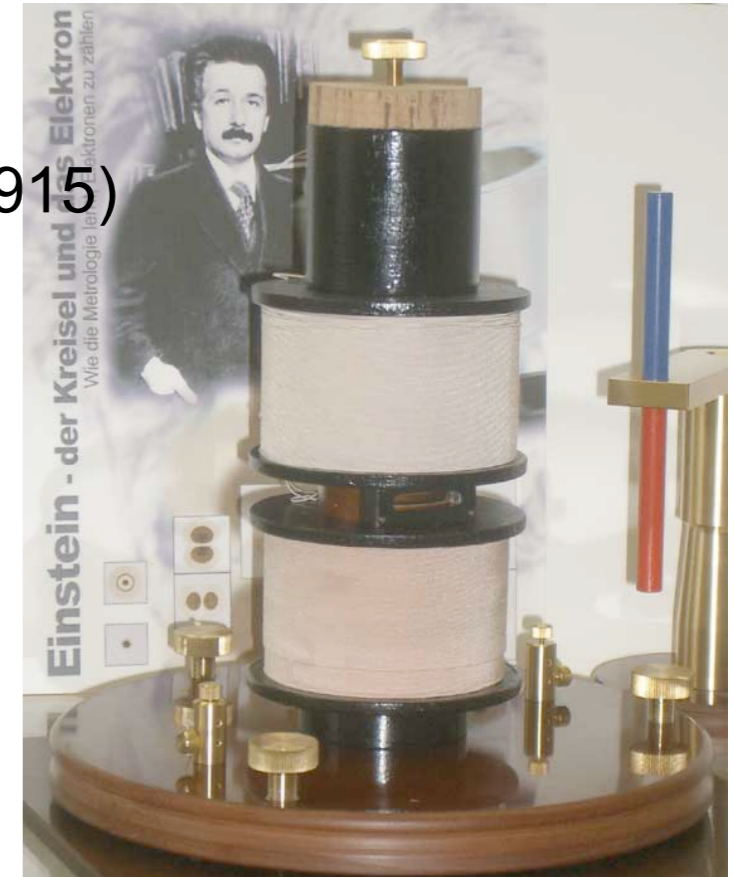
$$\vec{\mu} = \gamma\vec{L}$$



# Einsteinov a de Haasov experiment

Dôkaz previazanosti momentu hybnosti a magnetického momentu  
(predpovedal ho Owen Willans Richardson, 1908)  
(Einsteinov jediný experiment, AE & Wander Johannes de Haas 1915)

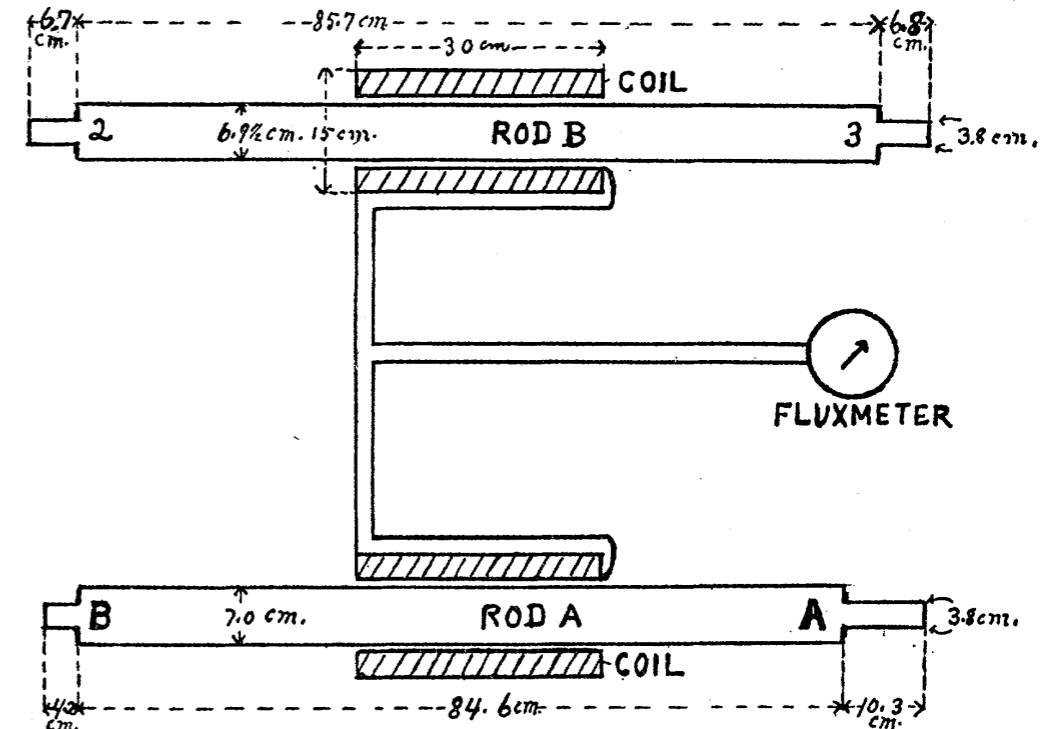
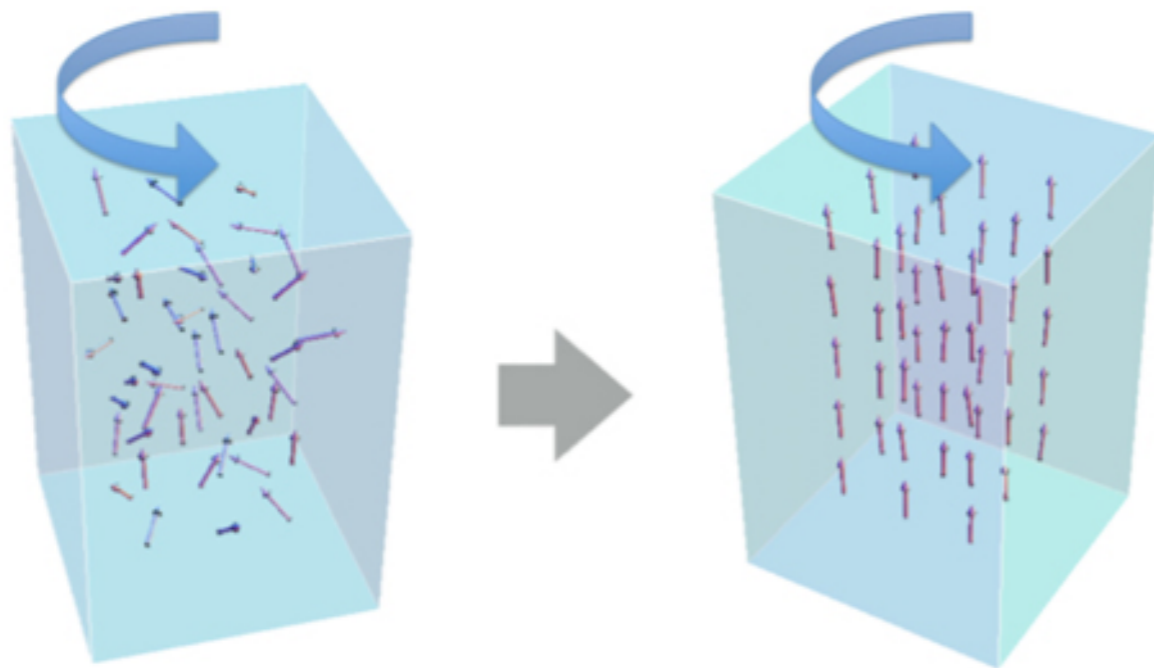
1. Valec je zmagnetizovaný krátkym impulzom magnetického poľa generovaného cievkami.
2. Magnetické momenty sa orientujú paralelne s  $\mathbf{B}$ .
3. To vedie aj k spoločnej orientácii mikroskopických momentov hybnosti  $\mathbf{L}$
4. Mikroskopické momenty hybnosti sa spočítajú a vedú k makroskopickému efektu: valec sa začne otáčať.
5. Otáčanie valca zabrzdí torzný záves, v ktorom sa vytvorí moment sily.



# Barnettov experiment

Samuel J. Barnett: magnetizácia nenabitého telesa spôsobná rotáciou (1908-1915)

1. železné tyče sa otáčajú v cievkach
2. Generovaná magnetizácia mení magnetický tok cievkami a na cievkach sa produkuje napätie
3. Napätie je merané



$$M = \chi \frac{\omega}{\gamma}$$

$M$  magnetizácia  
 $\omega$  uhlová rýchlosť  
 $\chi$  magnetická susceptibilita  
 $\gamma$  gyromagnetický pomer

# Kvantovanie momentu hybnosti

Moment hybnosti môže nadobúdať len niektoré diskkrétne hodnoty

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

Aj jeho priemet do hociktorej osi môže nadobúdať len niektoré hodnoty

$$L_z = \hbar m_l$$

Pre orbitálny moment hybnosti:  $l = 0, 1, 2, \dots$

$$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

Toto je orbitálne a magnetické kvantové číslo v atóme vodíka.

Pre interakciu s magnetickým poľom potrebujeme z-ovú komponentu magnetického momentu, pretože

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B$$

vyjadríme

$$\mu_z = \gamma L_z = -\frac{e}{2m} \hbar m_l = -m_l \mu_B$$

zaviedli sme Bohrov magnetón

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$$

# Spin

Elektrón (a aj iné častice, napríklad protóny a neutróny) má svoj vlastný **vnútorný** moment hybnosti. Volá sa **spin**.

Hodnota spinu (momentu hybnosti) zodpovedá kvantovaniu momentu hybnosti s kvantovým číslom  $1/2$ .

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right)}$$

Komponenta v smere osi z:

$$S_z = m_s \hbar, \quad m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

⇒ máme štvrté kvantové číslo pre charakterizovanie stavu elektrónu v atóme vodíka

Zložka magnetického momentu v smere osi z:

$$\mu_{s,z} = -2m_s \mu_B$$

Gyromagnetický pomer spinu elektrónu sa od *klasického* gyromagnetického pomeru líši faktorom 2 (presnejšie 2,002 319 304 76).

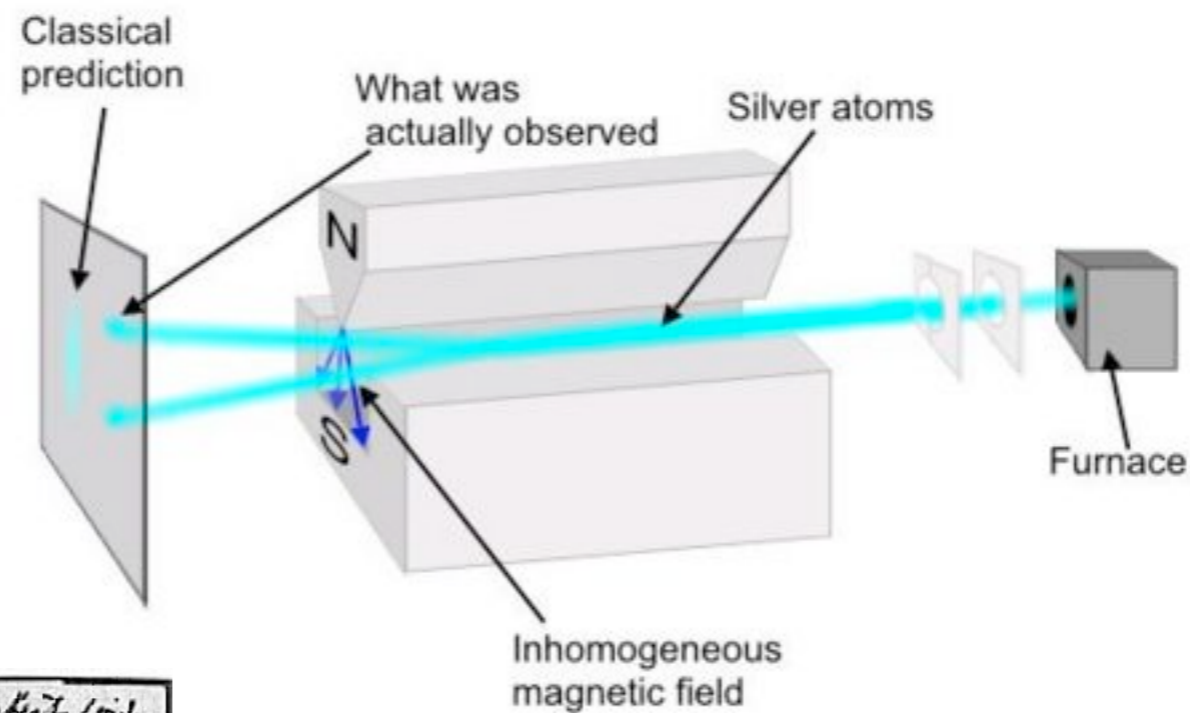
# Sternov-Gerlachov experiment

Dôkaz kvantovania momentu hybnosti a jeho z-ového komponentu - priestorové kvantovanie

Otto Stern, Walther Gerlach

experiment 1922 vo Frankfurte, Nobelova cena Stern 1943

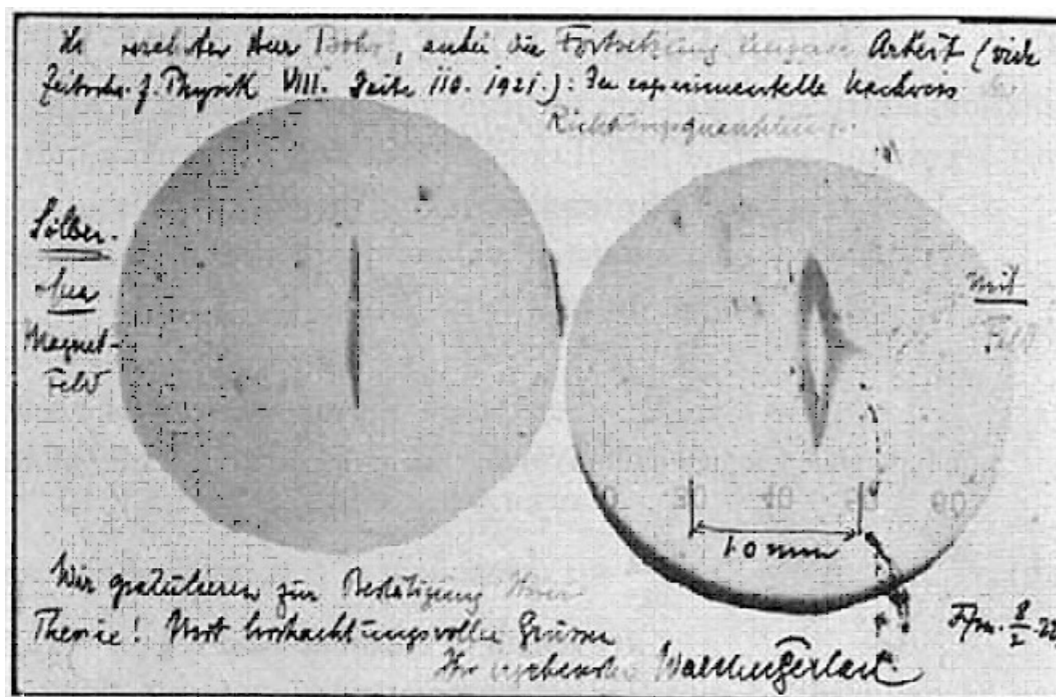
Rozštiepenie zväzku atómov Ag vplyvom nehomogénneho magnetického poľa



Stern



Gerlach



Gerlachova pohľadnica Bohrovi s výsledkom pokusu "Gratulujeme Vám k potvrdeniu Vašej teórie!"

# Magnetický moment v nehomogénnom magnetickom poli

Potenciálna energia  $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B$

Sila  $\vec{F} = -\nabla U$

Pre pole závisiace len od  $z$   $F = -\frac{d}{dz}U = \frac{d}{dz}\mu_z B = \mu_z \frac{dB}{dz}$

Atómy (alebo iné častice) sa vychýlia podľa toho, aká veľká sila na ne pôsobí.

Klasické očakávanie: priemet  $mg$  momentu do osi poľa môže mať ľubovoľnú veľkosť, sila môže mať spojite rozložené hodnoty, môžeme dostať ľubovoľnú výchylku.

Kvantovanie priestoru: priemet  $mg$  momentu má len diskkrétne hodnoty, môžeme dostať len diskkrétne výchylky.

# Jadrová magnetická rezonancia

Protón má spin 1/2 a vlastný magnetický moment

Dve energetické hladiny vo vonkajšom magnetickom poli **B**

$$E_{1,2} = \pm\mu_z B$$

$$\Delta E = 2\mu_z B$$

Preklopenie spinu (prechod medzi hladinami) pri rezonančnej frekvencii

$$\nu = \frac{2\mu_z B}{h}$$

## Jadrová magnetická rezonancia

Praktická situácia v látke:

- viac protónov je v stave s nižšou energiou
- pri ožiarení elektromagnetickým vlnením s rezonančnou frekvenciou máme silnejšiu absorpciu žiarenia



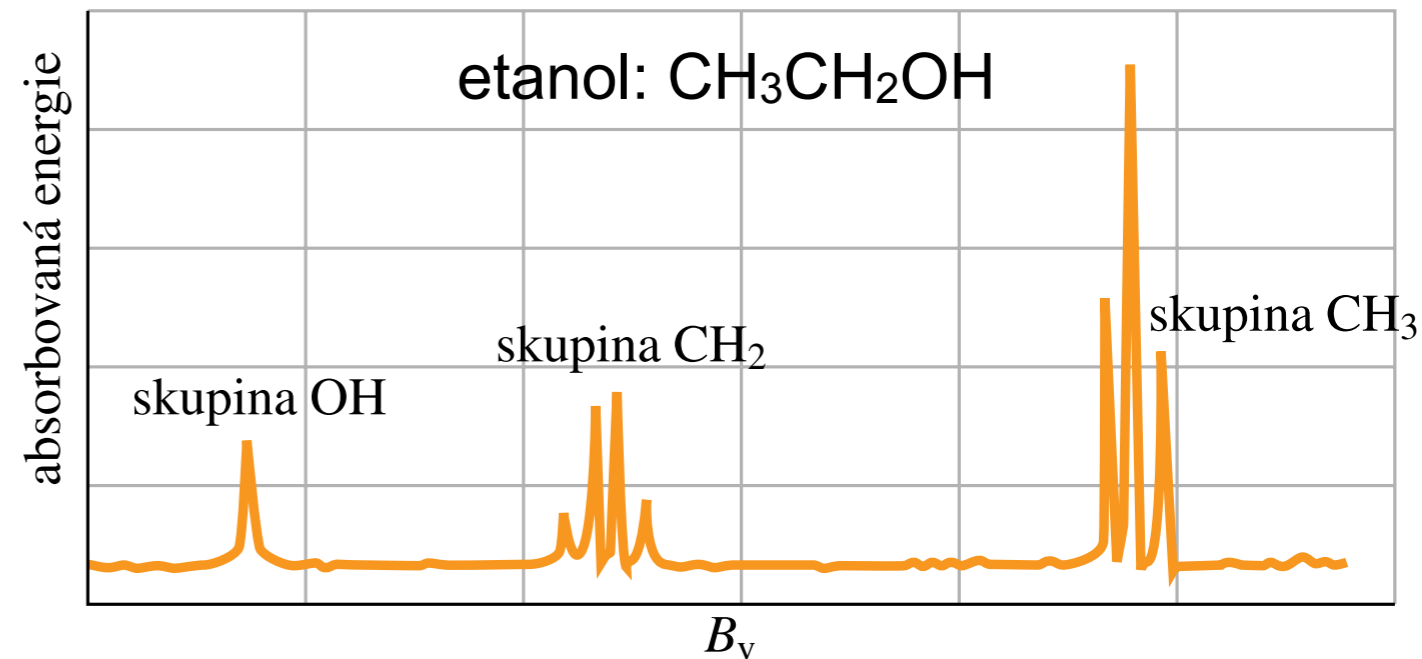
# Jadrová magnetická rezonancia - využitie

Vonkajšie magnetické pole pôsobiace na atóm má *lokálny* príspevok od okolitých jadier a elektrónov, takže požiadavka na rezonančnú frekvenciu je

$$\nu = \frac{2\mu_z(B_v + B_l)}{h}$$

$B_l$  je charakteristickou vlastnosťou materiálu

Pri fixovanom  $\nu$  hľadáme  $B_v$  tak, aby sme dostali rezonanciu - toto nám povie o  $B_l$



Zobrazovacia technika MRI (magnetic resonance imaging)

V rôznych priestorových oblastiach máme rôzne látky - absorpcia pri rôznych hodnotách  $B_v$  - meriame **kde** máme rezonanciu

