

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

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

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:

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

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

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

Bohrov polomer

$$a = \frac{\pi h^2 \epsilon_0}{me^4}$$

5

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	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
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	



Mendelejev



John Newlands, 1865

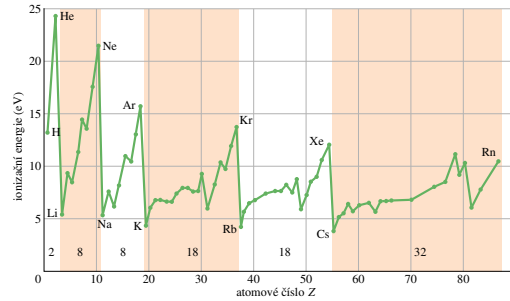


Lothar Meyer, 1864

6

Ionizačná energia

Energia, potrebná na vybratie najslabšie viazaného elektrónu z obalu atómu



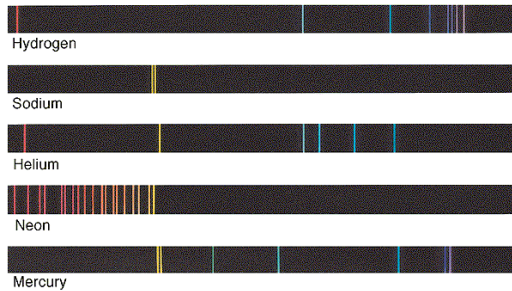
najvyššia pre vzácne plyny - najstabilnejšie atómy
najnižšia pre alkalické kovy - najslabšie viazané, navyiac reaktívne
vysvetlenie vyplýva z usporiadania kvantových stavov elektrónu (nasledujúca prednáška)

7

Absorpčné 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.



8

Moment hybnosti a magnetický moment

Klasický obraz (nie platný, ale poskytujúci ilustráciu)
moment hybnosti

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

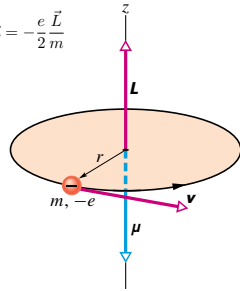
magnetický moment

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

gyromagnetický pomer

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

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

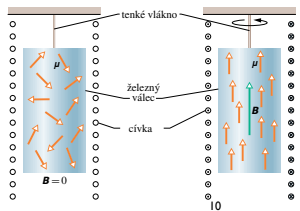


9

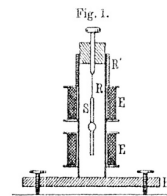
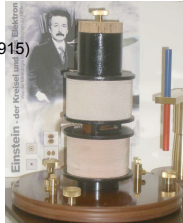
Einsteinov a de Haasov experiment

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.



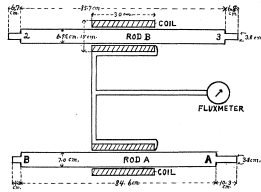
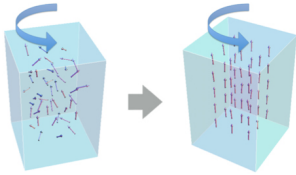
10



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
 ω uhlová rýchlosť
 χ magnetická susceptibilita
 γ gyromagnetický pomer

11

Kvantovanie momentu hybnosti

Moment hybnosti môže nadobúdať len niektoré diskkrétne hodnoty

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

Aj jeho priemet do hoci ktorej 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

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

12

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).

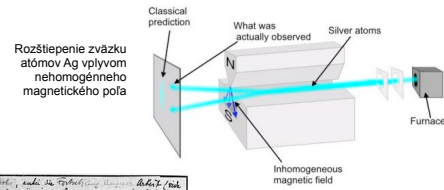
13

Sternov-Gerlachov experiment

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

Otto Stern, Walther Gerlach

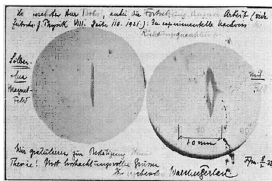
experiment 1922 vo Frankfurte, Nobelova cena Stern 1943



Stern



Gerlach



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

14

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 spojitú rozloženú hodnotu, 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

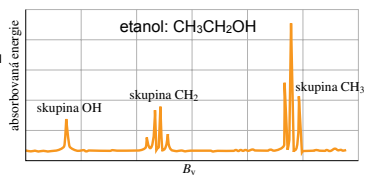
Jadrová magnetická rezonancia - využitie

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 ν 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

