

Wykład III

1. Dyfrakcja na pojedynczej szczelinie i na siatce dyfrakcyjnej
2. Fale Materii
3. Relacja nieoznaczoności Heisenberga
4. Funkcja falowa
5. Równanie Schrödingera
6. Cząstka w studni potencjału

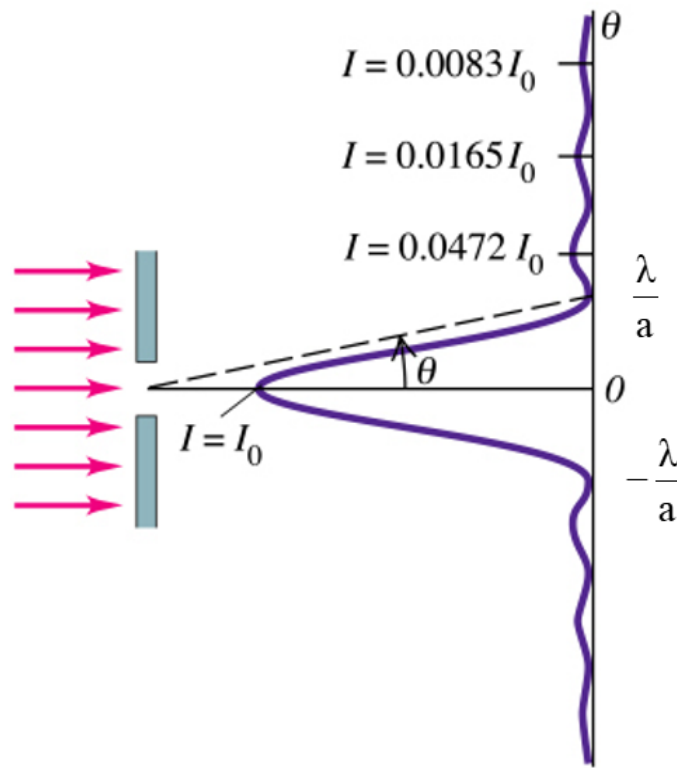
Dyfrakcja na pojedynczej szczelinie

$$I = I_{\max} \cdot \left(\frac{\sin((\pi a \sin \theta)/\lambda)}{(\pi a \sin \theta)/\lambda} \right)^2$$

Warunek na minima:

$$\frac{\pi a \sin \theta}{\lambda} = n\pi$$

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{a}$$



(a)

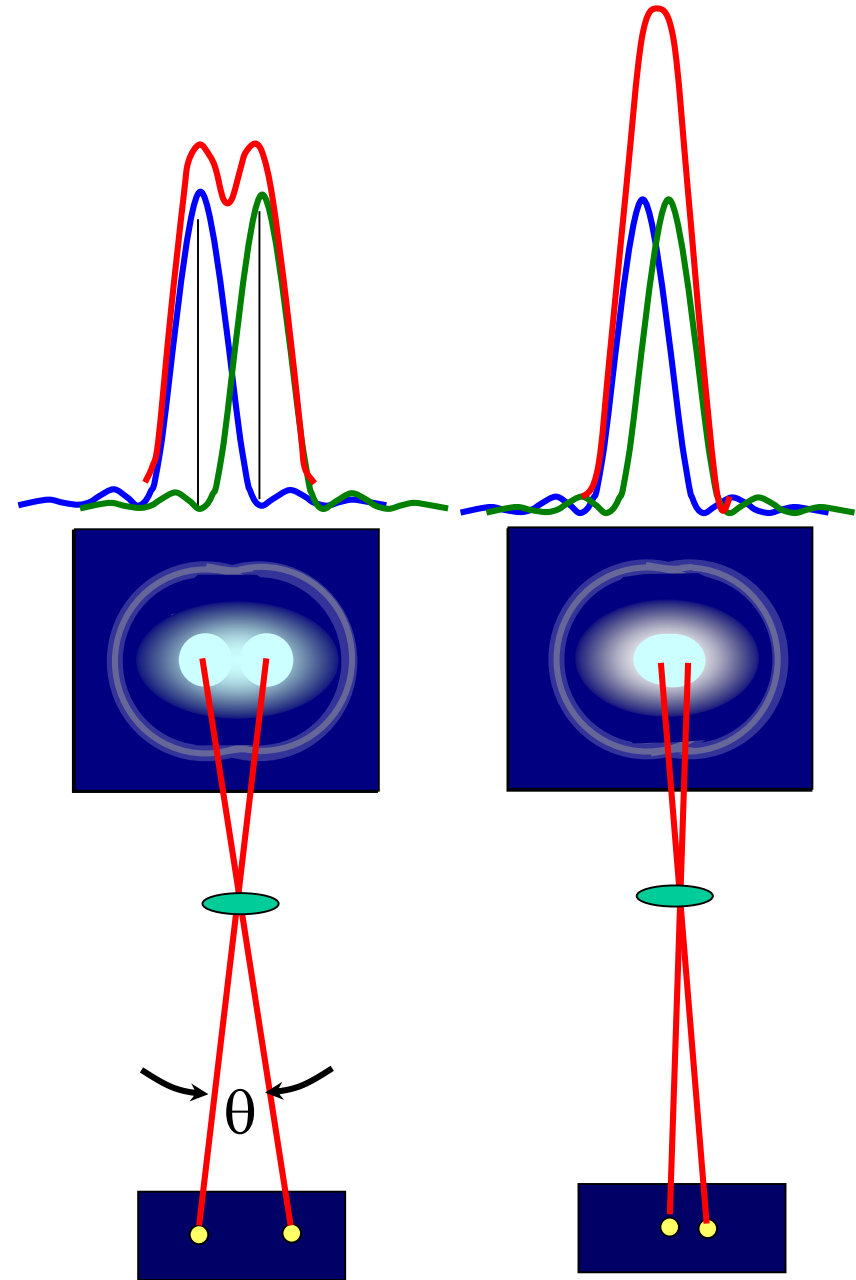
Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Dla długiej wąskiej szczeliny pierwsze minimum wypada pod kątem $\theta = \lambda/a$
Można pokazać, że dla otworu kołowego pierwsze minimum wypada pod kątem $\theta = 1,22\lambda/a$, stąd dwa obiekty punktowe będą rozróżnialne, jeśli są rozdzielone kątem $\theta = 1,22\lambda/a$.

Kryterium Rayleigh'a

Jeśli położenie centralnego maksimum jednego obrazu dyfrakcyjnego przypada na położenie pierwszego minimum drugiego obrazu, to obrazy te są rozróżnialne.

Można pokazać, że dla otworu kołowego pierwsze minimum wypada pod kątem $\theta = 1,22\lambda/a$, stąd dwa obiekty punktowe będą rozróżnialne, jeśli są rozdzielone kątem $\theta = 1,22\lambda/a$.



Fale materii

■ Dualizm falowo-cząstkowy fali elektromagnetycznej.

- W zjawiskach takich jak dyfrakcja czy interferencja fala elektromagnetyczna wykazuje typowe własności falowe.
- W zjawiskach takich jak efekt Comptona czy efekt fotoelektryczny fala elektromagnetyczna wykazuje naturę korpuskularną, tzn. jest strumieniem cząstek zwanych **fotonami**.

■ Hipoteza de Broglie'a .

- W 1924 roku L. de Broglie założył, że dualizm cząstkowo - falowy jest własnością charakterystyczną nie tylko dla fali elektromagnetycznej, ale również dla cząstek o masie spoczynkowej różnej od zera .Oznacza to, że cząstki takie jak np. elektrony powinny również wykazywać własności falowe. Fale te nazwał on **falami materii**. Założył, że długość fal materii określona jest tym samym związkiem, który stosuje się do fotonów.

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Fale materii

Elektron

- Masa = 9.11×10^{-31} kg prędkość = 10^6 m / s

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(10^6 \text{ m/s})} = 7.28 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Piłka

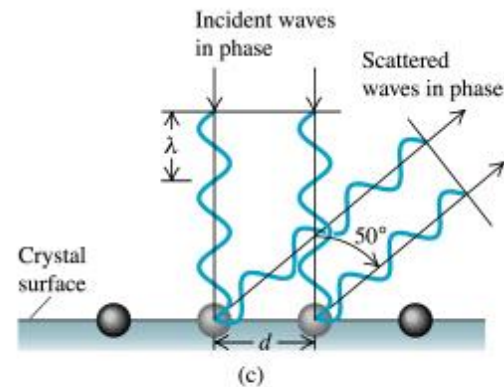
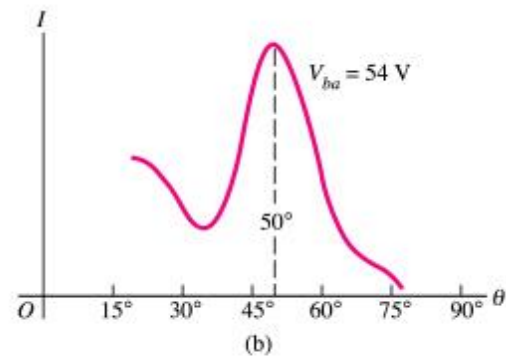
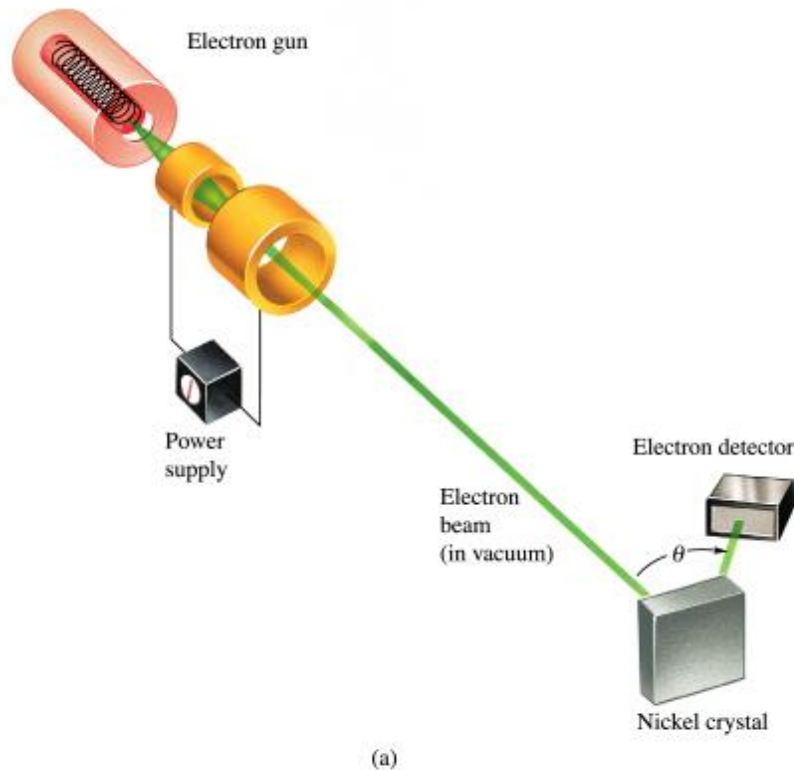
- Masa = 1 kg prędkość = 1 m / s

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{(1 \text{ kg})(1 \text{ m/s})} = 6.63 \times 10^{-34} \text{ m}$$

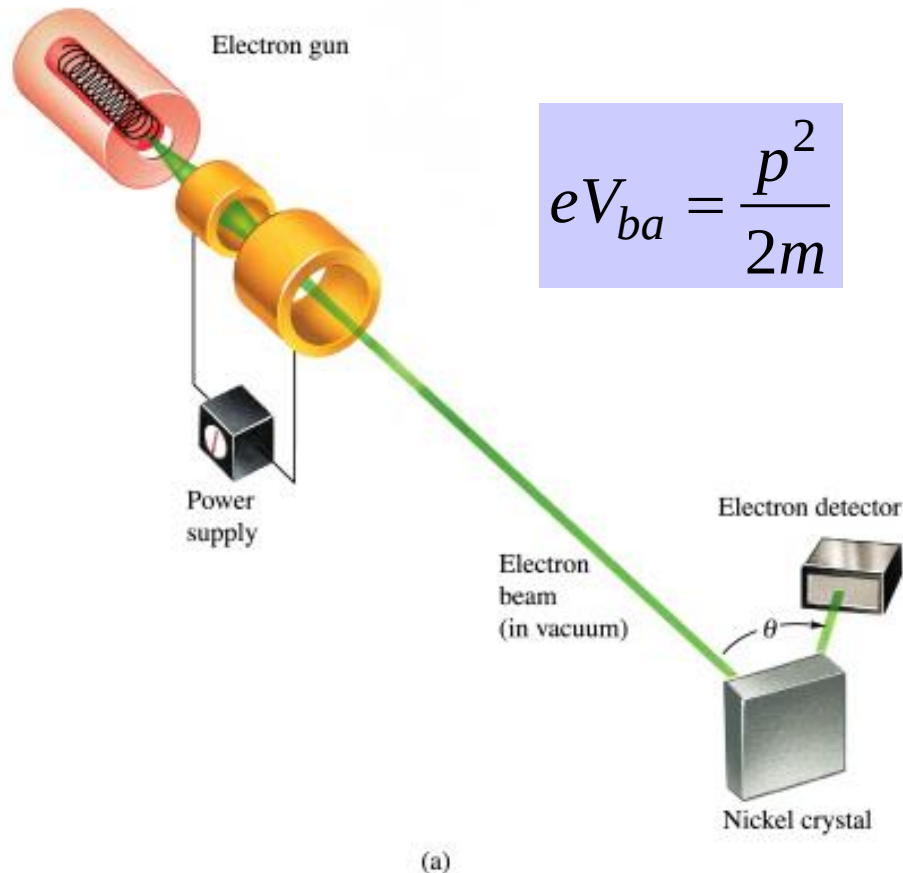
Doświadczenie C.J.Davissona i L.G.Germara (1927)

Eksperymentalne potwierdzenie istnienia fal materii

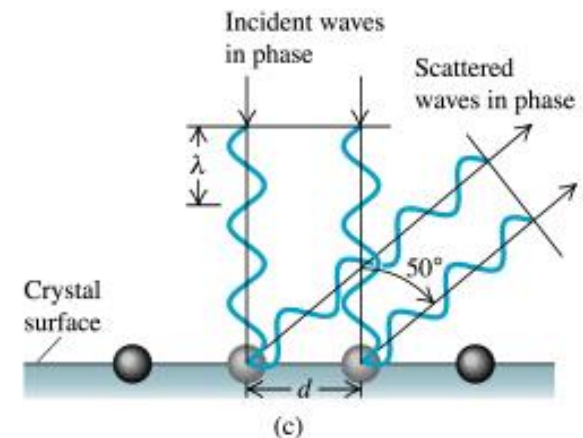
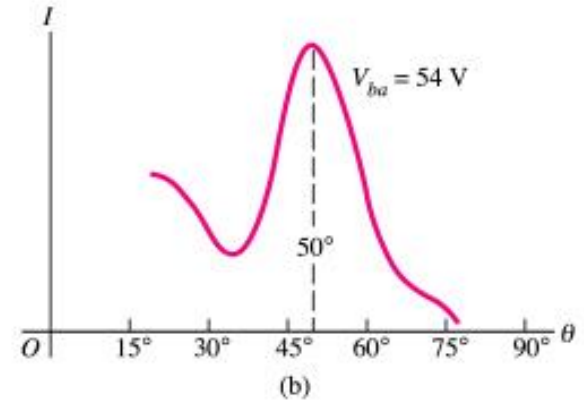
$$eV_{ba} = \frac{p^2}{2m}$$



Doświadczenie C.J.Davissona i L.G.Germara



$$eV_{ba} = \frac{p^2}{2m}$$



Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Wzór de Broglie'a

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV_{ba}}} = 0.167 \text{ nm}$$

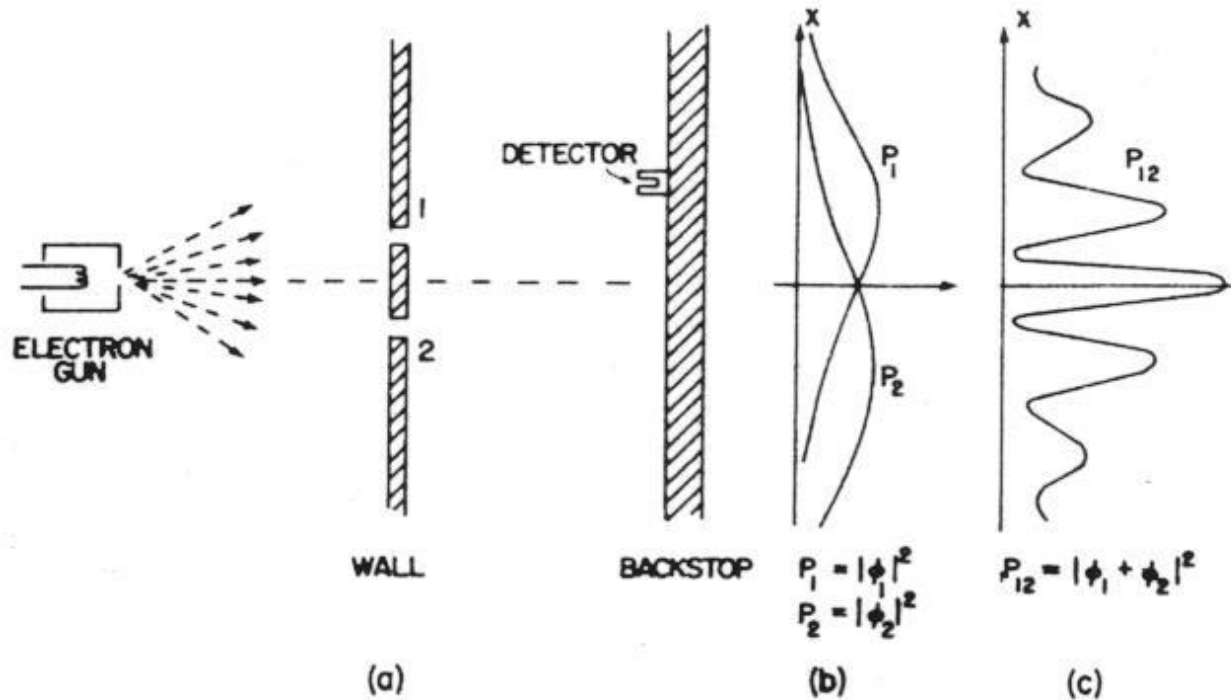
Z dyfrakcji

$$d_{\text{Ni}} = 0.215 \text{ nm}$$

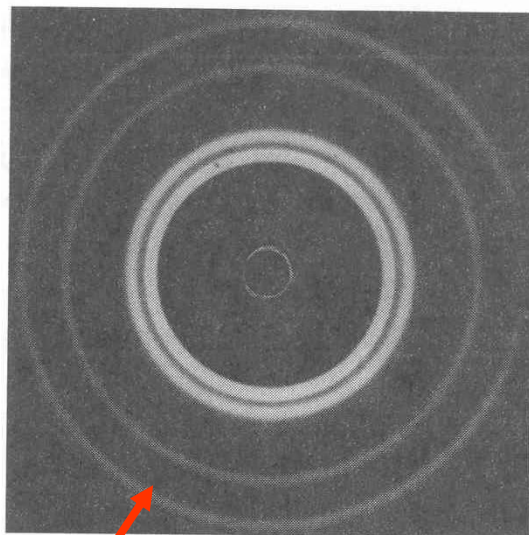
$$\lambda = d \sin \theta = 0.165 \text{ nm}$$

Dyfrakcja elektronów

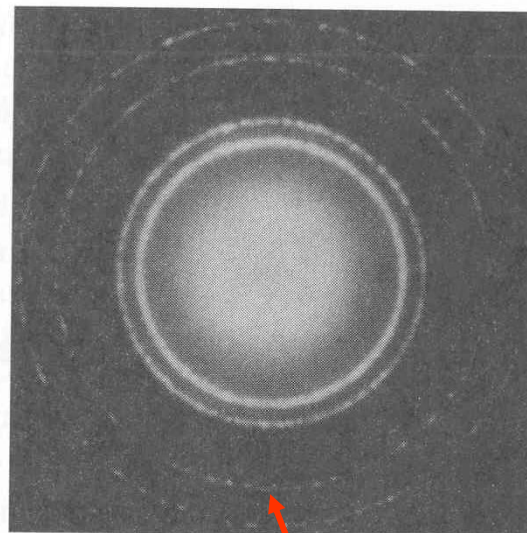
Czy elektron przechodzi równocześnie przez dwie szczeliny ?



Dyfrakcja na polikrystalicznej folii aluminiowej

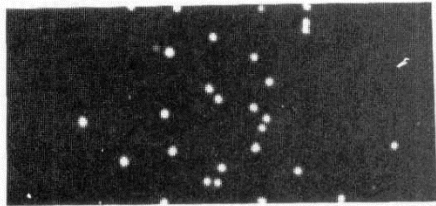


Dyfrakcja
promieniowania X

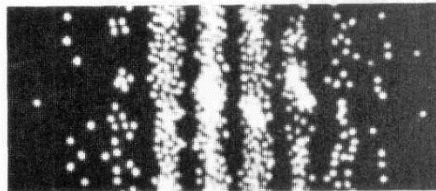


Dyfrakcja elektronów

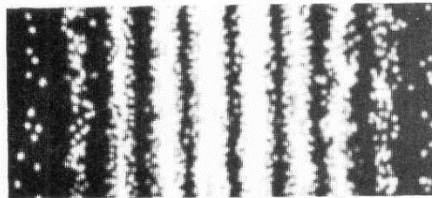
Dyfrakcja elektronów



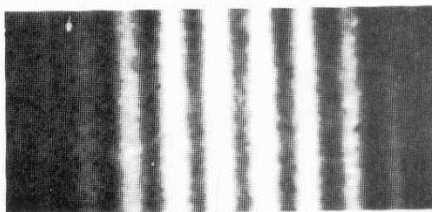
(a) After 28 electrons



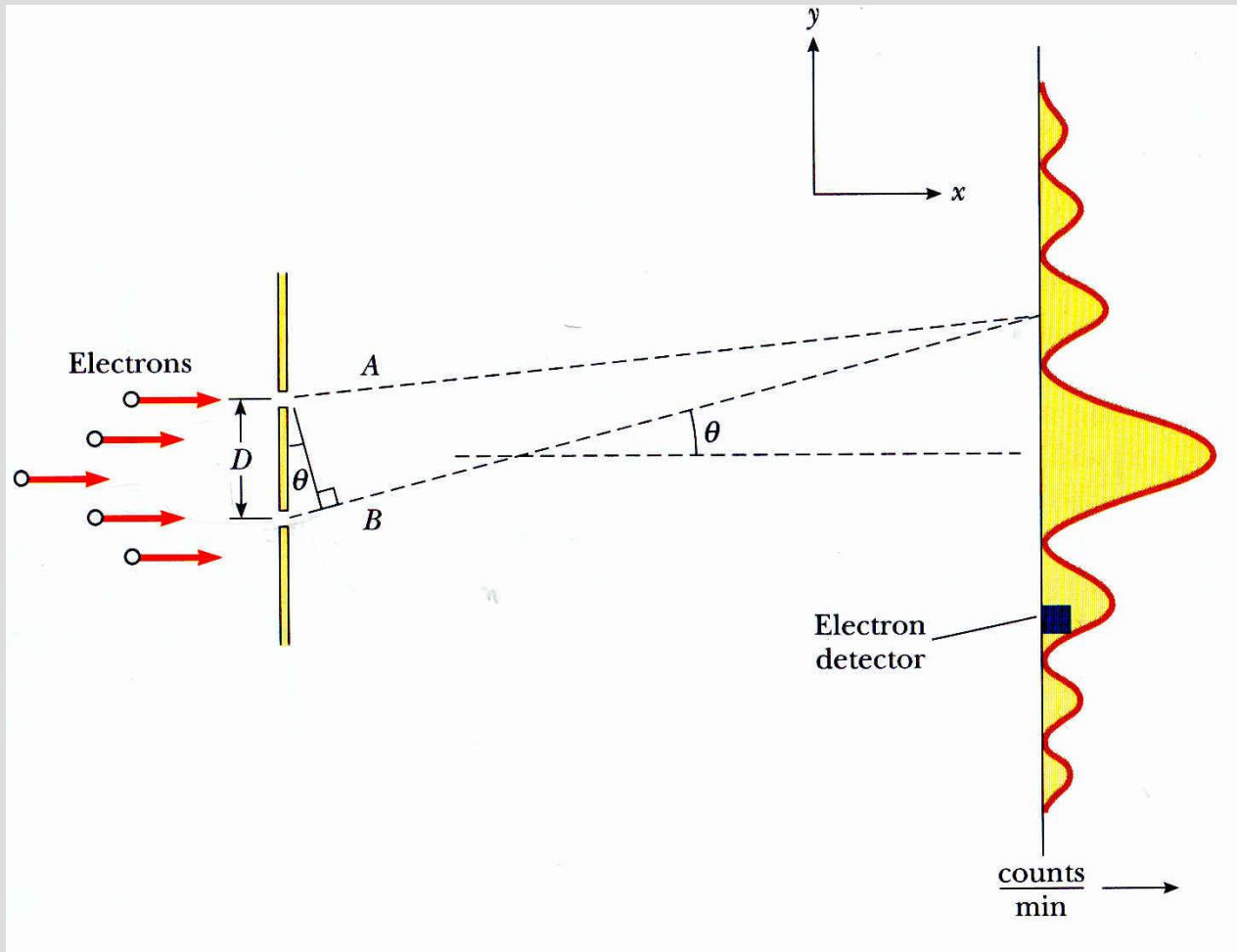
(b) After 1000 electrons



(c) After 10,000 electrons



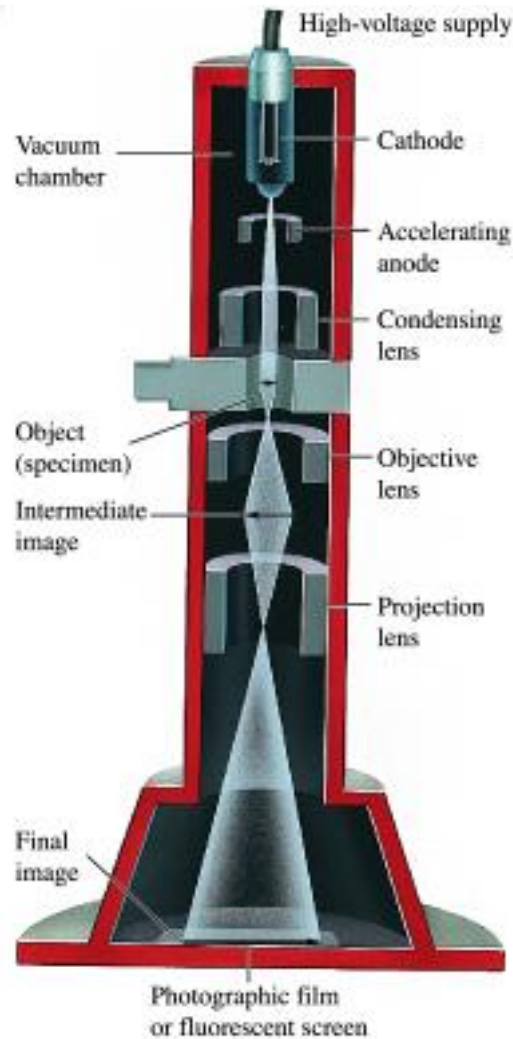
(d) Two-slit electron pattern



a, b, c - symulacje komputerowe

d - eksperymentalny obraz dyfrakcyjny

Mikroskop elektronowy transmisyjny (TEM)



(a)

Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Mikroskop optyczny

Zdolność rozdzielcza rzędu 1000nm

Powiększenie do 2000.

TEM

Zdolność rozdzielcza rzędu 0.05nm

Powiększenie $50 \cdot 10^6$

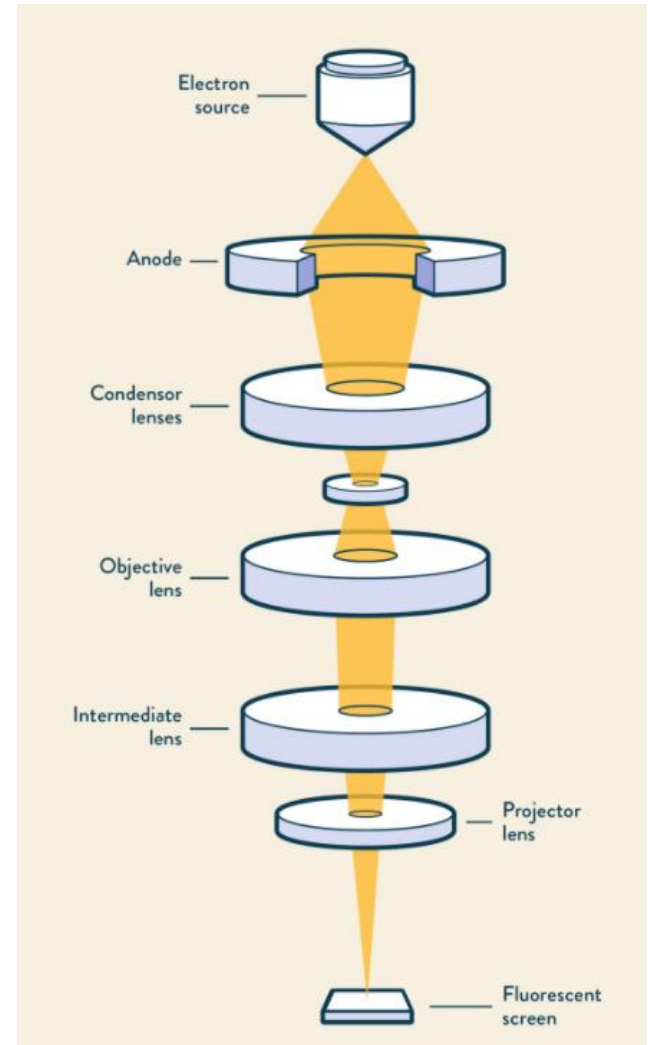
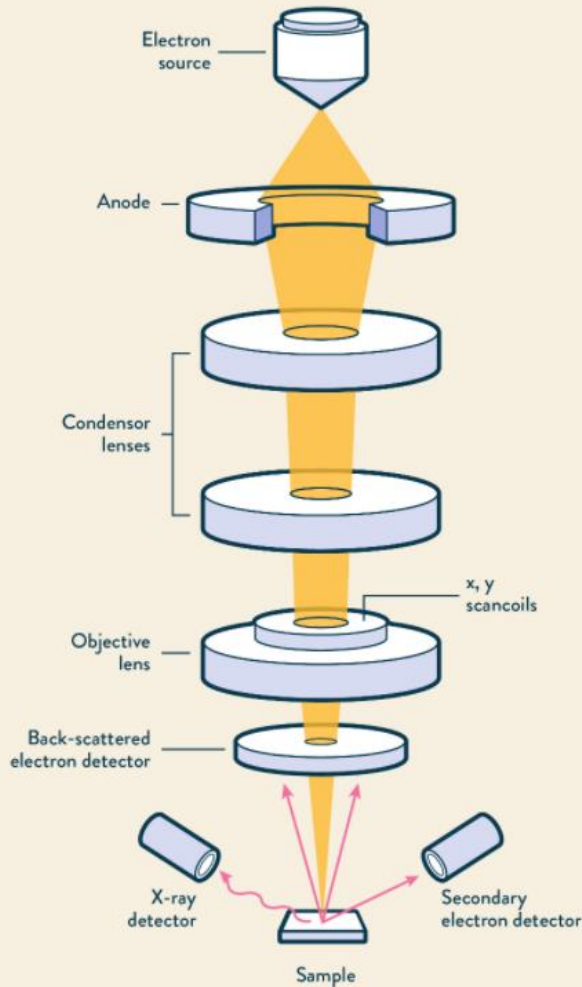
SEM vs TEM

SEM i TEM – dyfrakcja elektronów

SEM tworzy obraz poprzez wykrywanie odbitych lub wybitych elektronów.

TEM wykorzystuje elektrony transmitowane przez próbkę do tworzenia obrazu.

**TEM - struktura krystaliczna, morfologia i informacje o stanie naprężenia;
SEM –informacja na temat powierzchni próbki i jej składu.**



SEM i TEM

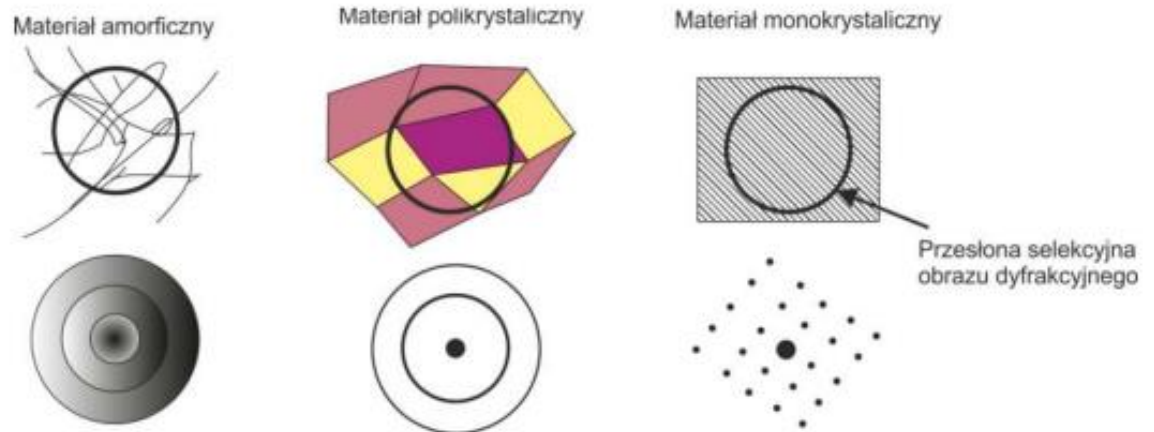
Obrazy otrzymywane z TEM

Koherentne ugięcie fali elektronowej na atomach; rozpraszanie elastyczne – bez straty energii.

Zdolność rozdzielcza rzędu $0.5\text{\AA}$

Powiększenie $50 \cdot 10^6$.

Energia kinetyczna elektronów do 400keV .



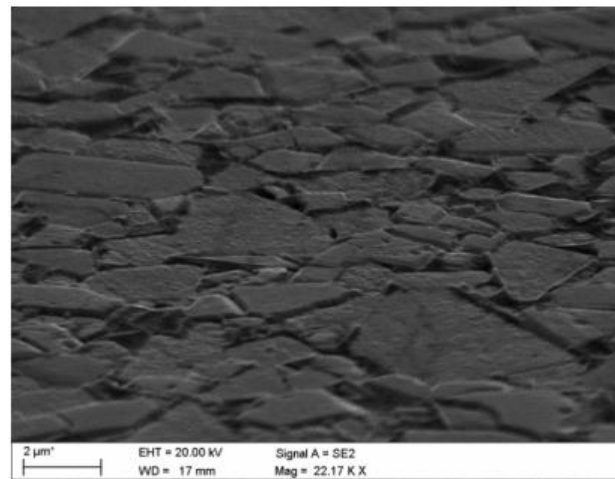
Obrazy otrzymywany z SEM (węgiel spiekany)

Rozpraszanie nieelastyczne – ze stratą energii.

Zdolność rozdzielcza rzędu 1nm

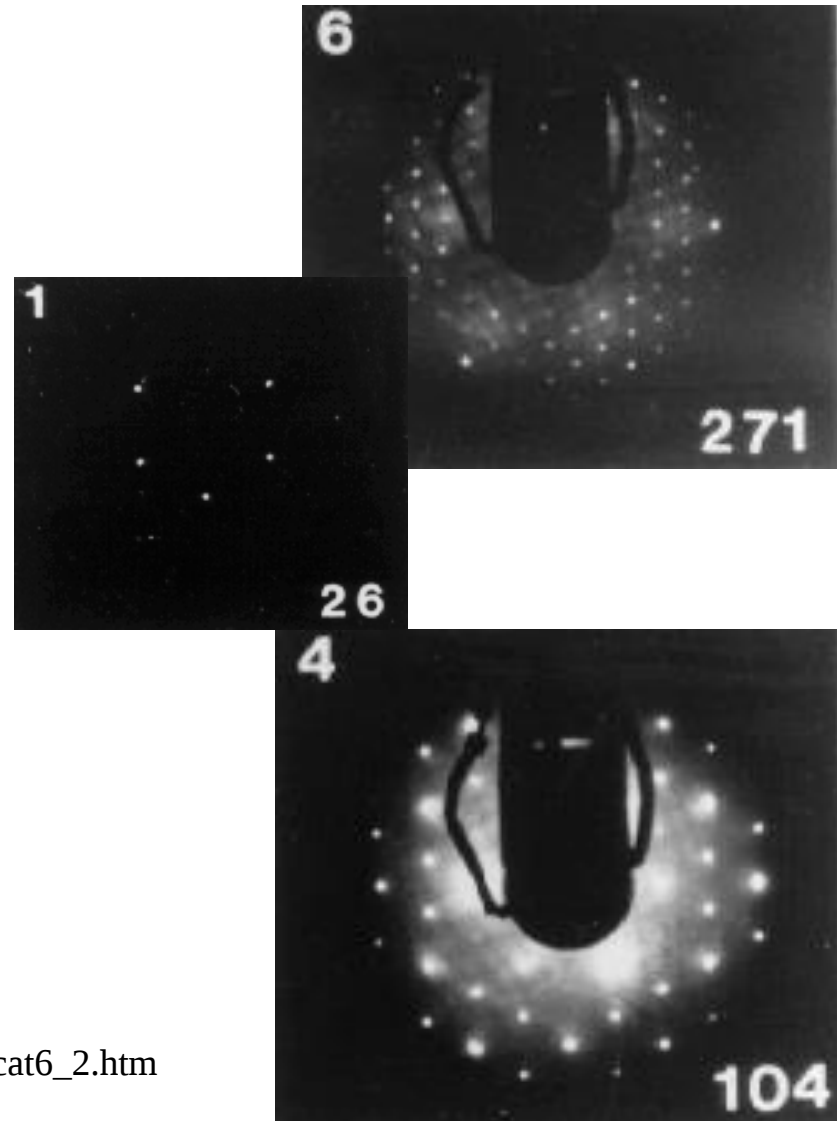
Powiększenie $5 \cdot 10^5$.

**Energia kinetyczna elektronów
Do 40keV .**



Dyfrakcja elektronów

Elektronom o energii 20eV odpowiada długość fali de Brogliea' 0,27nm. To odległość, która odpowiada odległościom między atomami sieci krystalicznej.



Zadanie

Zdolność rozdzielcza mikroskopu elektronowego

W mikroskopie TEM wiązka elektronów o długości fali 1 pm wychodzi przez otwór o promieniu $2 \mu\text{m}$. Jaki jest najmniejszy kąt pomiędzy rozróżnialnymi punktowymi źródłami?

Rozwiązanie

Możemy bezpośrednio skorzystać ze wzoru na zdolność rozdzielczą $\Delta\theta$ mikroskopu (omawianą we wcześniejszym rozdziale) dla fali o długości $\lambda = 1 \text{ pm}$ i średnicy otworu $D = 2 \mu\text{m}$

$$\Delta\theta = 1,22 \frac{\lambda}{D} = 1,22 \cdot \frac{1 \text{ pm}}{2 \mu\text{m}} = 6,1 \cdot 10^{-7} \text{ rad} = 3,5 \cdot 10^{-5} ^\circ.$$

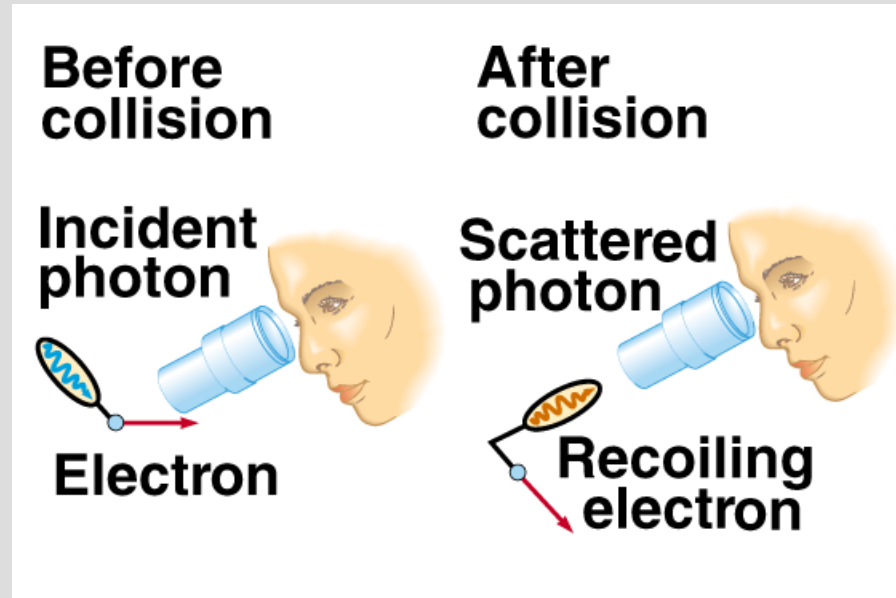
Znaczenie

Gdybyśmy użyli zwykłego mikroskopu i światła o długości fali 400 nm , zdolność rozdzielcza wynosiłaby tylko 14° i wszystkie szczegóły obrazu byłyby rozmyte.

Zasada komplementarności

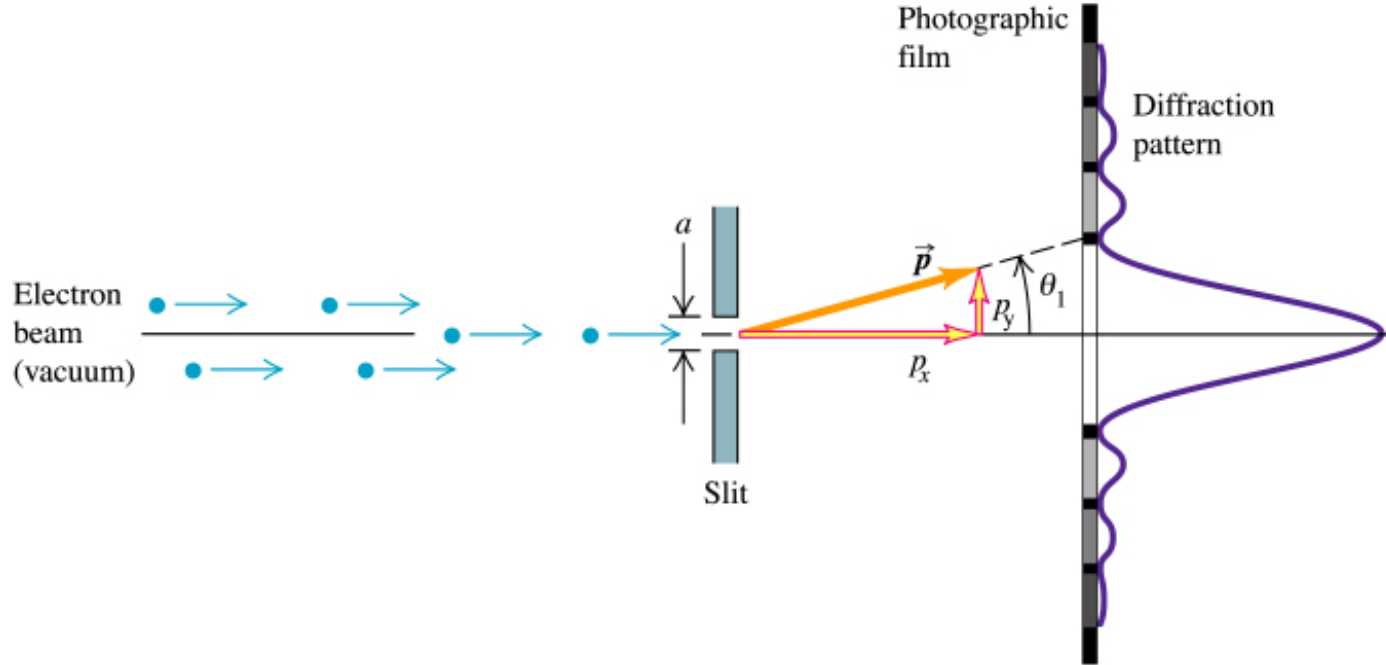
Fotony czy też elektrony oraz obiekty mikroświata w jednych zjawiskach mogą zachowywać się jak fala, a w innych jak cząstka tzn. wykazują zarówno własności falowe jak i korpuskularne. Obie te cechy uzupełniają się wzajemnie , dając pełny opis danego obiektu.

Zasada nieoznaczoności - interpretacja



Proces pomiaru zaburza stan układu

Zasada nieoznaczoności



Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Elektron po przejściu przez szczelinę zyskuje składową pędu w kier. osi y :

$$a \sin \Theta_1 = \lambda \quad \Theta_1 \cong \frac{\lambda}{a} \quad p_y = p_x \tan \Theta_1 \cong p_x \Theta_1$$

$$p_y = p_x \frac{\lambda}{a} \quad (p_y)_{\text{śr}} = 0 \quad \Delta p_y \geq p_y = p_x \frac{\lambda}{a} = p_x \frac{h}{p_x a} = \frac{h}{a}$$

$$\Delta p_y a \geq h$$

Zasada nieoznaczoności

- Fizyka klasyczna
 - dokładność pomiaru jest zdeterminowana jedynie jakością aparatury pomiarowej
 - Nie ma teoretycznych ograniczeń na dokładność z jaką mogą być wykonane pomiary
- Mechanika kwantowa
 - Obowiązuje **zasada nieoznaczoności**: pewnych wielkości fizycznych nie można zmierzyć równocześnie z dowolną dokładnością

Zasada nieoznaczoności dla równoczesnego pomiaru pędu i położenia:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$$

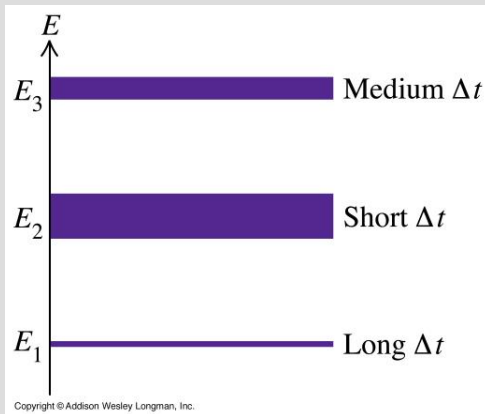
Przykład. Pęd poruszającego się z prędkością $v=5000\text{m/s}$ elektronu zmierzono z dokładnością $\pm 0.003\%$. Z jaką maksymalną dokładnością można było wyznaczyć położenie tego elektronu?

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} = 1.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

Zasada nieoznaczoności energii

Zasada nieoznaczoności dla równoczesnego pomiaru energii i czasu:

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar/2$$



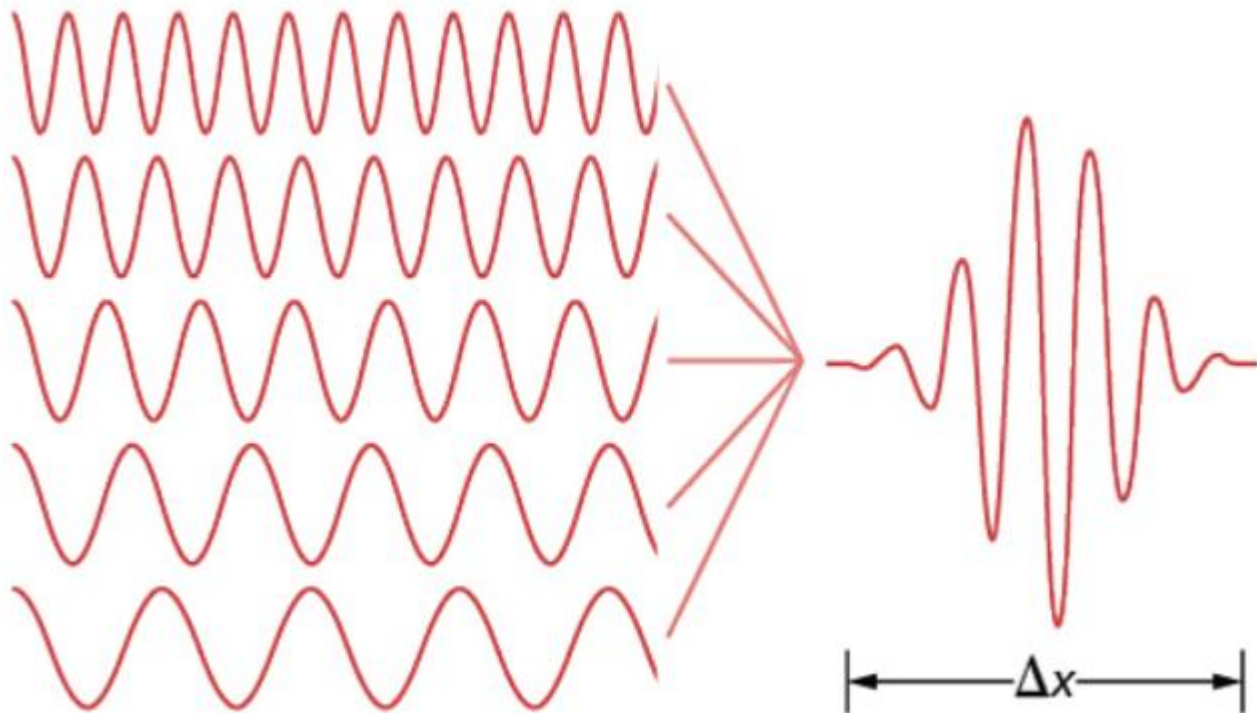
Przykład: Czas przebywania atomu sodu w stanie wzbudzonym zmierzono z dokładnością $\Delta t = 1.6 \cdot 10^{-8}$ s. Z jaką maksymalną dokładnością można było wyznaczyć wartość energii tego stanu?

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t} \approx 6.5 \cdot 10^{-8} \text{ eV}$$

Paczka falowa

Fale płaskie o różnych długościach

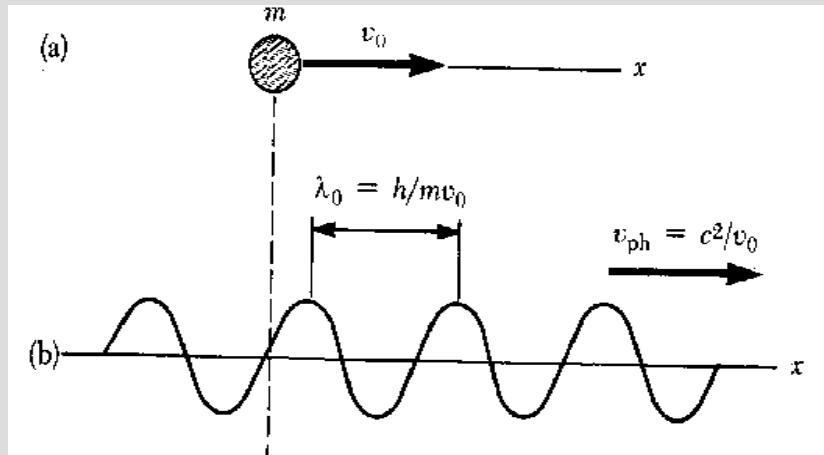
Paczka falowa



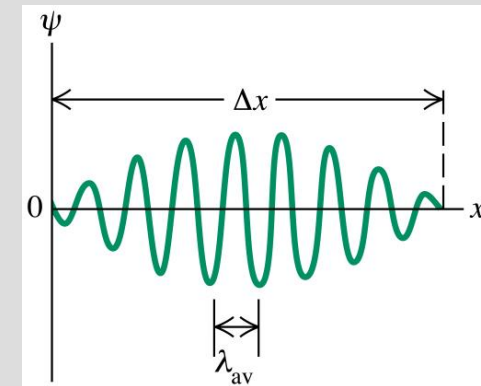
Openstax tom 3
rozdz. 7

$$\Psi(x) = \int_0^{\infty} A(\lambda) \sin \frac{2\pi x}{\lambda} d\lambda$$

Cząstka czy fala?

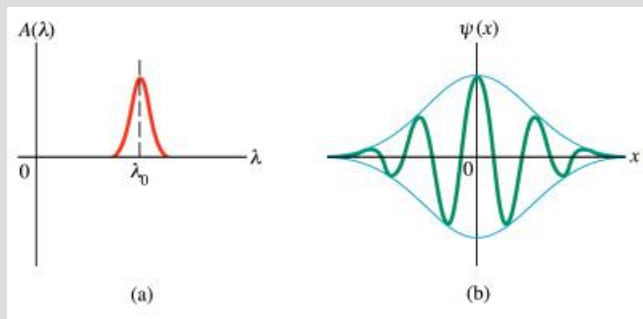


Cząstka swobodna

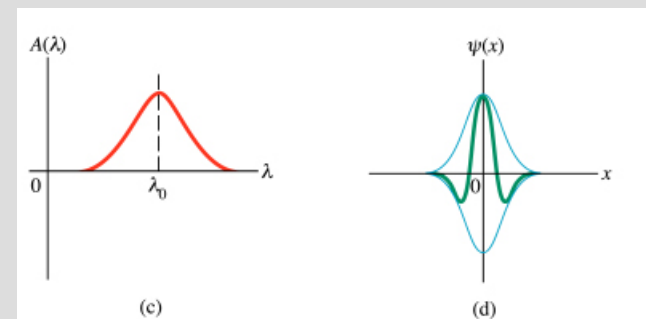


Cząstka zlokalizowana

$$\Psi(x) = \int_0^{\infty} A(\lambda) \sin \frac{2\pi x}{\lambda} d\lambda$$



$$\lambda = \frac{h}{p}$$



$\Delta\lambda$ małe $\rightarrow \Delta p_x$ małe i Δx duże

$\Delta\lambda$ duże $\rightarrow \Delta p_x$ duże i Δx małe

Funkcja falowa

Zgodnie z hipotezą de Broglie'a, cząstki takie jak elektron czy proton, mają własności falowe.

Własności falowe cząstki (lub innego obiektu) w mechanice kwantowej opisuje tzw. **funkcja falowa** $\Psi(x,t)$:

- zawiera w sobie wszystkie informacje o obiekcie (np. cząstce)
- w ogólnym przypadku jest to funkcja zespolona współrzędnych przestrzennych oraz czasu
- musi być funkcją ciągłą , a także musi mieć ciągłą pochodną
- kwadrat modułu funkcji falowej

$$|\psi|^2 = \psi * \psi$$

jest **gęstością prawdopodobieństwa** znalezienia cząstki w chwili t w pewnym punkcie przestrzeni

$$p = |\Psi|^2 \Delta V \Rightarrow \int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

Cząstka swobodna wg mechaniki kwantowej

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) + iA \sin(kx - \omega t),$$

gdzie A jest amplitudą funkcji, k jej liczbą falową, a ω odpowiada częstości kątowej. Wykorzystując wzór Eulera $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$, możemy zapisać to równanie w następujący sposób

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = Ae^{i\phi},$$

gdzie ϕ to kąt fazowy. Jeżeli mamy do czynienia z funkcją wolnozmienną w przedziale Δx , prawdopodobieństwo znalezienia cząstki jest równe

$$P(x, x + \Delta x) = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) \Delta x = Ae^{i\phi} A^* e^{-i\phi} \Delta x = A^* A \Delta x.$$

Jeżeli A jest liczbą zespoloną ($a + ib$, gdzie a i b są stałymi rzeczywistymi), to

$$A^* A = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2.$$

Zauważmy, że części urojone zniknęły. Tak więc

$$P(x, x + \Delta x) \approx |A|^2 \Delta x$$

ma wartość rzeczywistą. Interpretacja $\Psi^*(x, t) \Psi(x, t)$ jako gęstości prawdopodobieństwa daje pewność, że przewidywania mechaniki kwantowej są mierzalne w rzeczywistym świecie.

Cząstka swobodna wg mechaniki kwantowej cd.

Funkcja falowa cząstki swobodnej:

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) + iA \sin(kx - \omega t), \quad \Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

$$\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2} p^2 \psi$$

$$E = \frac{1}{\psi} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$p^2 = -\frac{1}{\psi} \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + U$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi$$

$$\psi(x, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et)} \psi(x)$$

Równanie Schrödingera zależne od czasu i jego rozwiązanie

Stacjonarne równanie Schrödingera

Funkcję falową, Ψ dla danej cząstki, lub bardziej złożonego układu fizycznego, otrzymujemy rozwiązując równanie różniczkowe nazywane równaniem Schroedingera. Jeżeli energia potencjalna cząstki U nie zależy od czasu, to równanie Schrödingera jest równaniem niezależnym od czasu i nazywa się **stacjonarnym równaniem Schrödingera**.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + U(x) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Cząstka swobodna

Cząstka swobodna - na cząstkę nie działają żadne pola.
Energia potencjalna cząstki $U(x)=0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x)$$

Szukamy rozwiązania w postaci $\Psi(x)=A\cos(kx) + iA \sin(kx)=Ae^{ikx}$

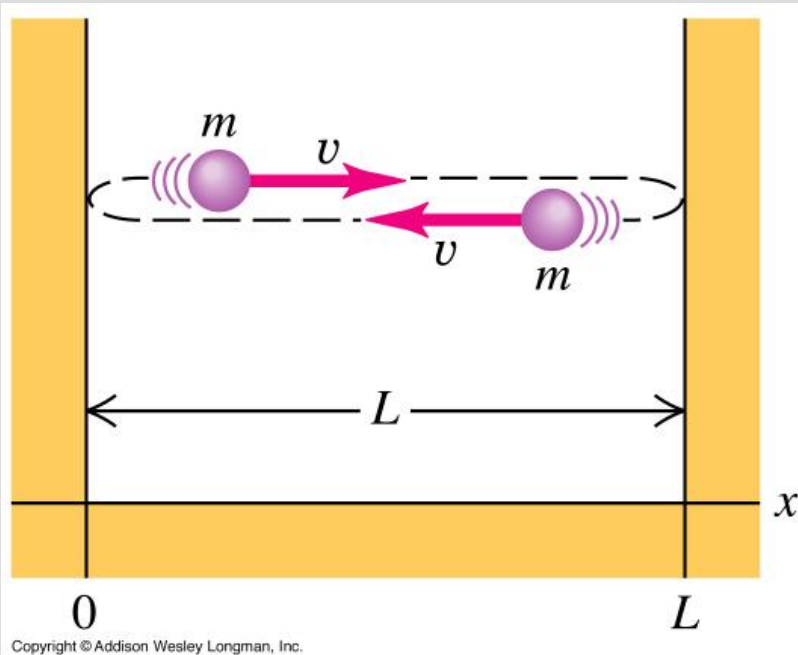
$$-\frac{\hbar^2}{2m} A(-k^2 e^{ikx}) = EAe^{ikx}$$

Funkcja ta będzie rozwiązaniem gdy:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Cząstka w studni potencjału

1. Przypadek klasyczny



Znajdująca się w głębokiej studni piłka może posiadać **dowolną** energię kinetyczną.

W szczególnym przypadku gdy znajduje się w spoczynku na dnie studni posiada energię całkowitą równą **zeru**.

Drgająca struna

Fala stojąca powstaje gdy jest spełniony warunek:

$$L = n \frac{\lambda}{2} \quad \lambda = \frac{2L}{n}$$

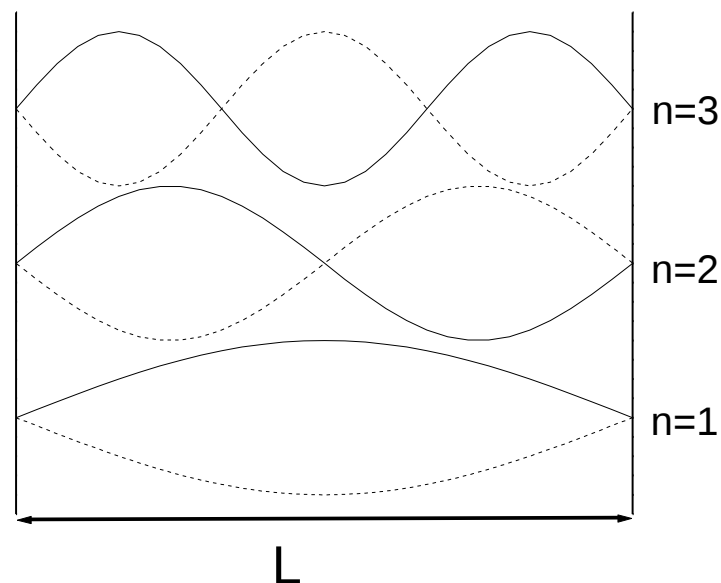
Długość fali stojącej jest skwantowana.

Falę stojącą opisuje równanie:

$$y(x) = A \sin(kx)$$

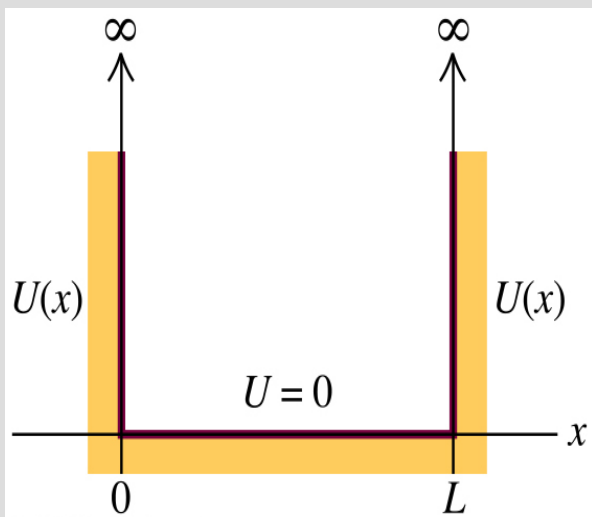
Podstawiając $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{2L/n} = \frac{\pi n}{L}$ otrzymujemy:

$$y(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$



Cząstka w studni potencjału

2. Przypadek kwantowy



Energia potencjalna

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{dla } x \in (-\infty, 0) \cup (L, \infty) \\ 0 & \text{dla } x \in (0, L) \end{cases}$$

Warunki brzegowe: $|\Psi(0)|^2 = |\Psi(L)|^2 = 0$

Równanie Schrödingera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$$

Cząstka w studni potencjału

W obszarze studni $x \in (0, L)$ cząstka jest cząstką swobodną. Może poruszać się w prawo i w lewo. Szukamy więc rozwiązania w postaci fali stojącej $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = C\sin(kx + \alpha)$

Warunek brzegowy dla $x=0$: $|\Psi(0)|^2 = 0 \rightarrow \alpha = 0$

spełniony jest jedynie gdy $\alpha = 0$

Warunek brzegowy dla $x=L$: $|\Psi(L)|^2 = |C|^2 [\sin(k \cdot L)]^2 = 0$

spełniony jest jedynie gdy $kL = n\pi$.

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

oraz

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

skąd

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Cząstka w studni potencjału -wnioski

Pytanie: czy n może być równe zero?

Dla $n=0$ energia $k=0$ oraz $\Psi(x)=C \sin(0 \cdot x)=0$.
Oznacza to, że prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w tym obszarze $|\Psi(x)|^2 \Delta x = 0$

Wniosek: najmniejsza wartość $n=1$. Cząstka musi mieć energię różną od zera. Najmniejsza energia:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} 1^2$$

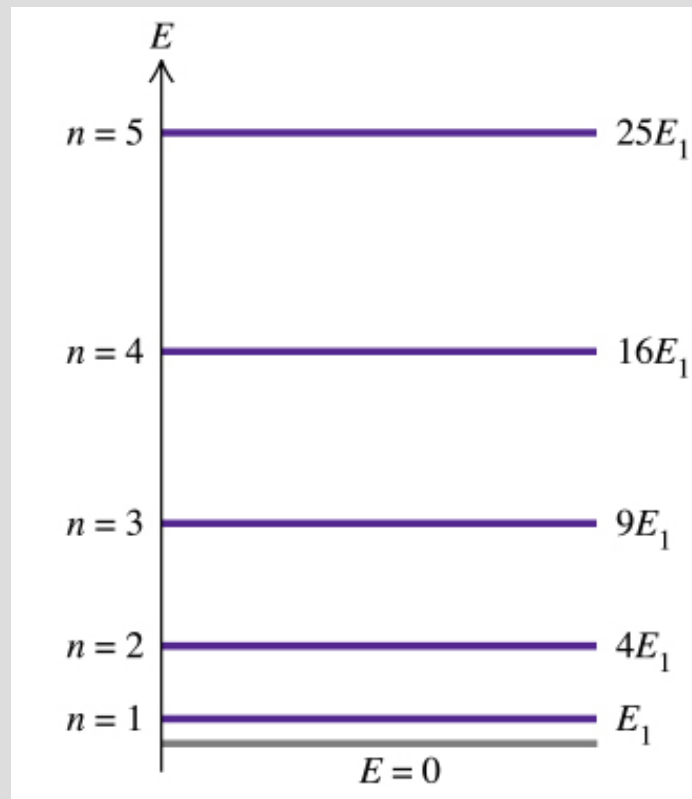
Cząstka w studni potencjału -wnioski

W nieskończonej studni potencjału energia cząstki może przyjmować tylko pewne ściśle określone, różne od zera wartości:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

gdzie

$$n = 1, 2, 3, \dots$$



Cząstka w studni potencjału - wnioski

Funkcja falowa :

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n}{L} x$$

Warunek unormowania : cząstka musi się znajdować w obszarze 0-L:

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$

$$\int_0^L \left| A \sin \frac{\pi n}{L} x \right|^2 dx = 1 \qquad 2 \sin^2 x = 1 - \cos 2x$$

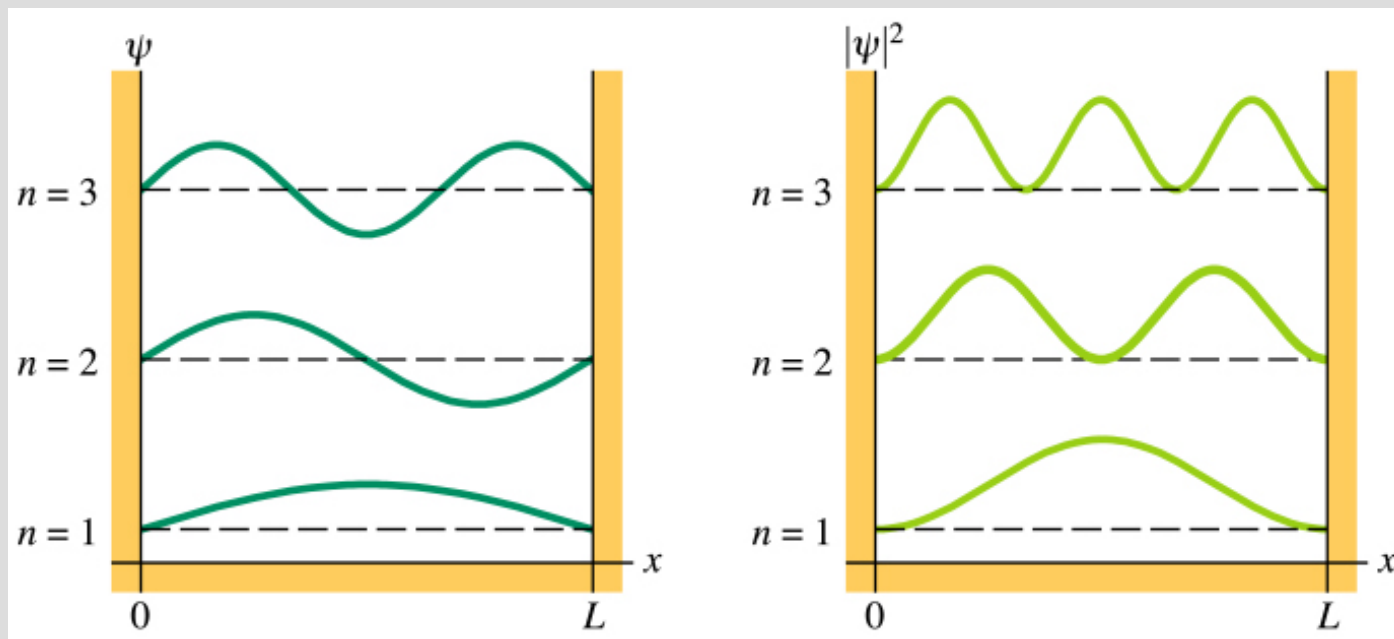
$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

Cząstka w studni potencjału -wnioski

Funkcja falowa :

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

Wewnątrz studni powstaje fala stojąca materii z węzłami na brzegach studni.



Cząstka w studni potencjału -wnioski

Przykład 1

Pyłek o masie 1 g w studni o szerokości 1 cm

a) minimalna energia

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{(6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{8 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot 10^{-4} \text{ m}^2} = 5.49 \cdot 10^{-61} \text{ J} = 3.43 \cdot 10^{-42} \text{ eV}$$

b) nr poziomu gdy porusza się z prędkością 3cm/s

$$E_n = \frac{1}{2}mv^2 = 4.5 \cdot 10^{-10} \text{ J}$$

$$E_n = n^2 E_1 \Rightarrow n = \sqrt{E_n / E_1} \cong 1.1 \cdot 10^{16}$$

$$E_{n+1} - E_n = (2n + 1)E_1 \approx 7.5 \cdot 10^{-26} \text{ eV}$$

Cząstka w studni potencjału -wnioski

Przykład 2

Elektron o masie $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ w studni o szerokości 0.2 nm .

a) minimalna energia

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{(6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{8 \cdot (9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) \cdot (2 \cdot 10^{-10} \text{ m})^2} = 1.51 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 9.42 \text{ eV}$$

b) poziomy drugi i trzeci

$$E_2 = 4 \cdot E_1 = 37.7 \text{ eV}$$

$$E_3 = 9E_1 = 84.8 \text{ eV}$$

$$E_2 - E_1 = 28.28 \text{ eV}$$

Kwantowanie energii

- Energia dowolnego obiektu jest skwantowana. Obiekt znajduje się na jednym z dozwolonych poziomów energetycznych
- Zmiana energii układu może odbywać się wyłącznie porcjami - *kwantami*
- W makroświecie odległość pomiędzy najbliższymi poziomami energetycznymi jest niemierzalnie mała

Kwantowanie energii - oscylator harmoniczny

Energia potencjalna oscylatora harmonicznego:

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

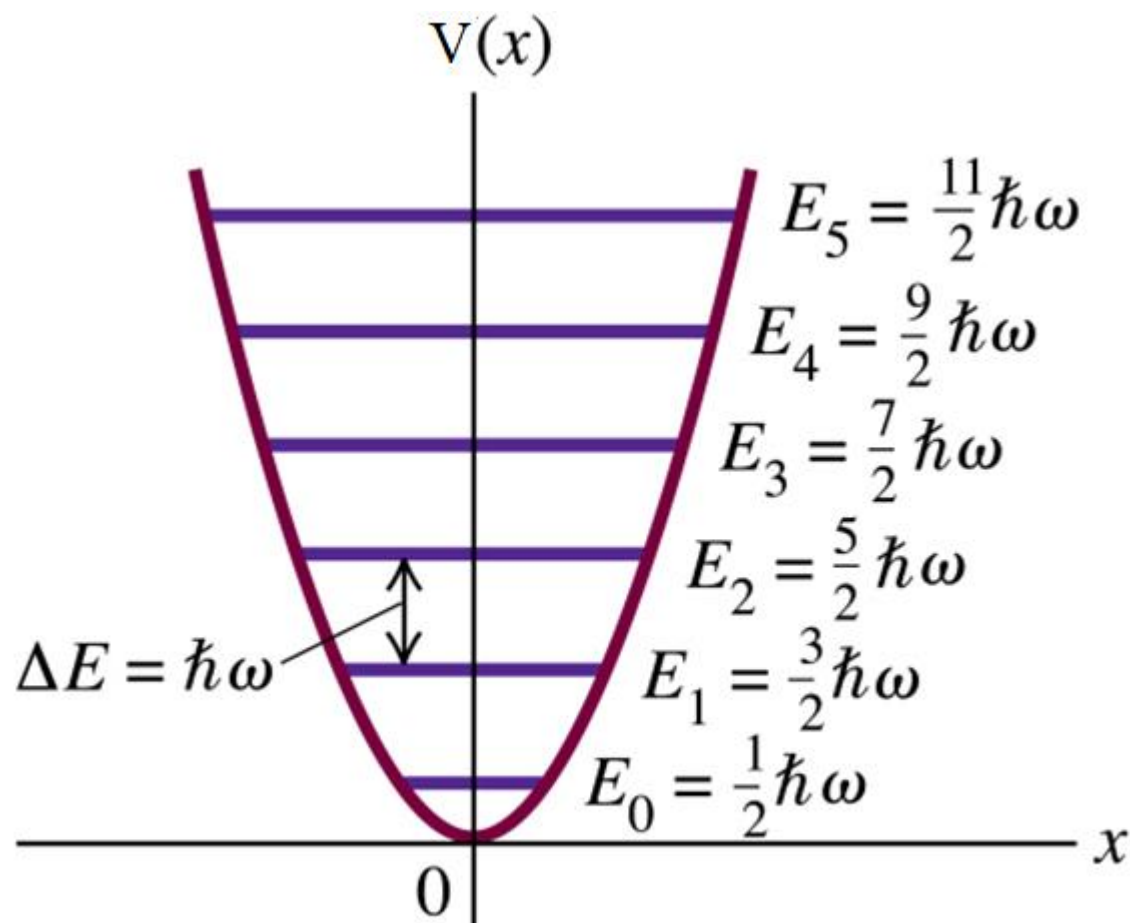
Równanie Schrödingera dla oscylatora :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{m \omega^2 x^2}{2} \Psi = E \Psi$$

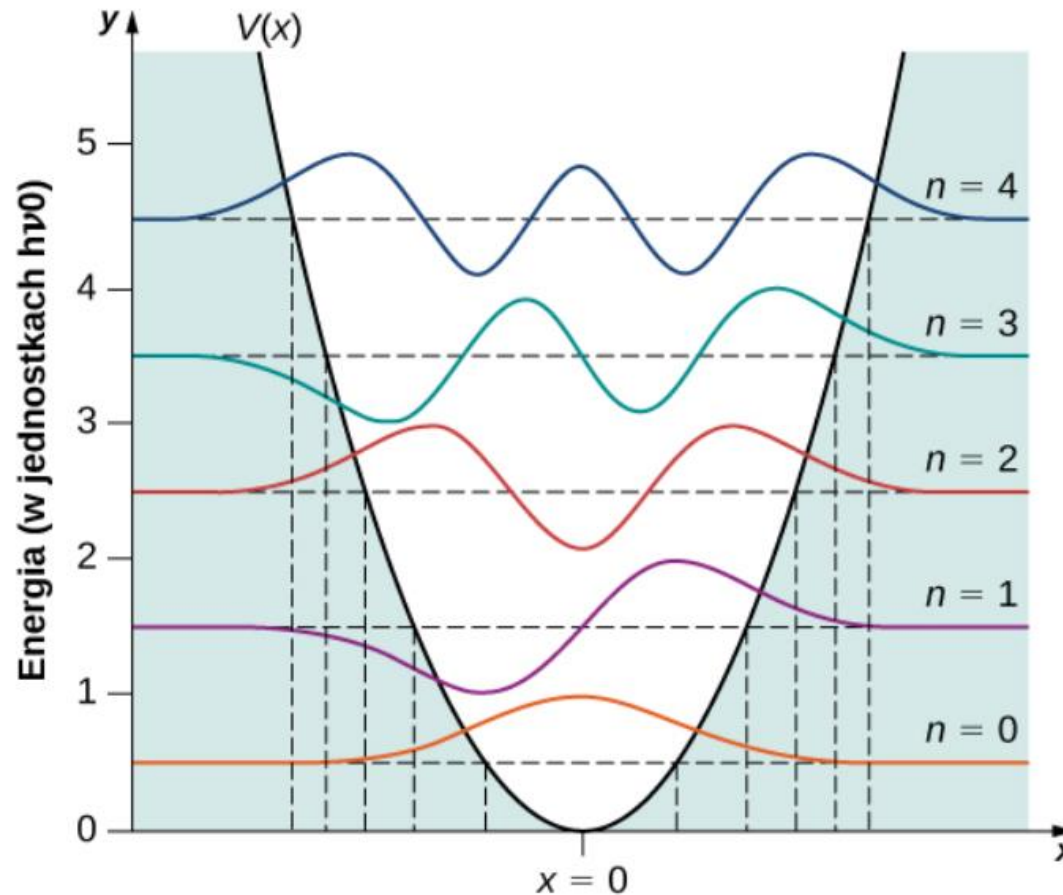
Funkcje falowe Ψ będące rozwiązaniem tego równania muszą być ciągłe i posiadać ciągłe pierwsze pochodne. Takie rozwiązania istnieją wyłącznie wtedy gdy energia całkowita oscylatora posiada jedną z wartości:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \text{gdzie } n = 1, 2, 3, \dots$$

Oscylator harmoniczny kwantowy – dozwolone energie



Oscylator harmoniczny kwantowy– funkcje falowe



Ilustracja 7.15 Pierwsze pięć funkcji falowych kwantowego oscylatora harmonicznego. Klasyczne ograniczenia ruchu oscylatora oznaczone są pionowymi liniami odpowiadającymi maksymalnym wychyleniom klasycznego oscylatora $x = \pm A$ o takiej samej energii jak kwantowy oscylator o stanie oznaczonym na rysunku.