

# Fale materii

13/15

Andrzej Kapanowski  
*<https://ufkapano.github.io/>*

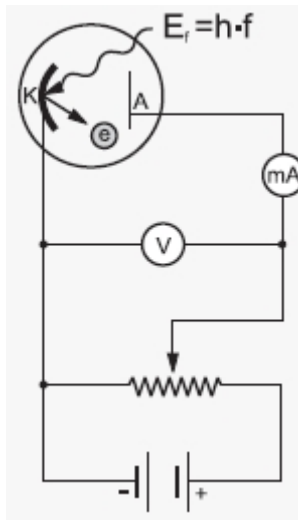
WFAIS, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

2022

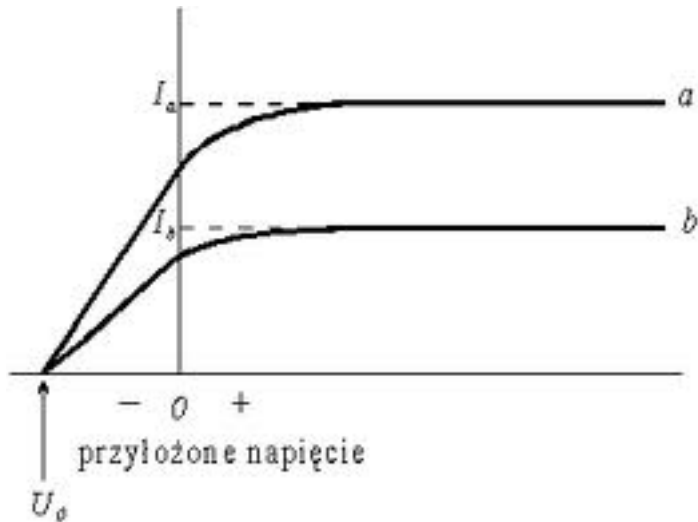
# Zjawisko fotoelektryczne zewnętrzne

- Nie wszystkie zjawiska optyczne można wytłumaczyć na gruncie falowej teorii światła. Ważną rolę w rozwoju poglądów na naturę światła odegrało **zjawisko fotoelektryczne zewnętrzne**.
- Zjawisko polega na tym, że wiązka światła monochromatycznego o wystarczająco krótkiej fali padająca na płytkę metalową (fotokatodę) wyrывa z niej elektrony (fotoelektrony).
- Energia najszybszych elektronów wynosi  $E_{k,max} = eV_0$ , gdzie  $V_0$  jest potencjałem hamującym.

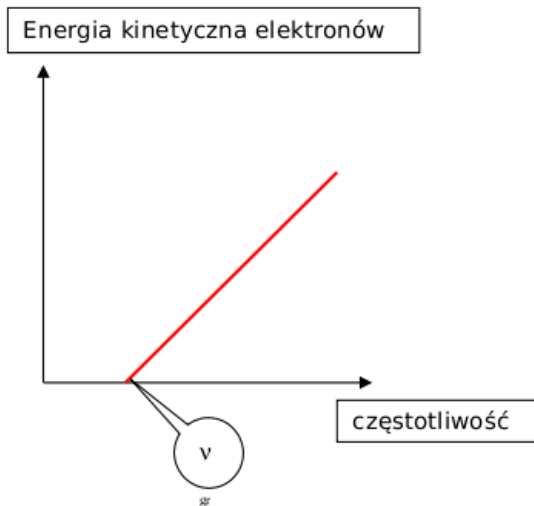
# Zjawisko fotoelektryczne zewnętrzne



# Zjawisko fotoelektryczne zewnętrzne



# Zjawisko fotoelektryczne zewnętrzne



# Zjawisko fotoelektryczne zewnętrzne

- Główne obserwacje doświadczalne:
  - (a) energia kinetyczna fotoelektronów nie zależy od natężenia światła [powinna wzrastać z natężeniem światła];
  - (b) zjawisko występuje, jeżeli częstotliwość światła jest wyższa od pewnej **częstotliwości progowej**  $\nu_0$ , czyli jeżeli długość fali jest krótsza niż **progowa długość fali**  $\lambda_0 = c/\nu_0$  [powinno występować dla dowolnej częstotliwości przy odpowiednio dużym natężeniu];
  - (c) gdy światło jest dostatecznie słabe, fotoelektrony powinny wykazywać opóźnienie w czasie w stosunku do początku naświetlania, niezbędne do magazynowania energii przez elektron, aby mógł wykonać pracę wyjścia z materiału katody.
- Tych obserwacji nie daje się wytłumaczyć w ramach fizyki klasycznej i teorii falowej.

# Równanie Einsteina

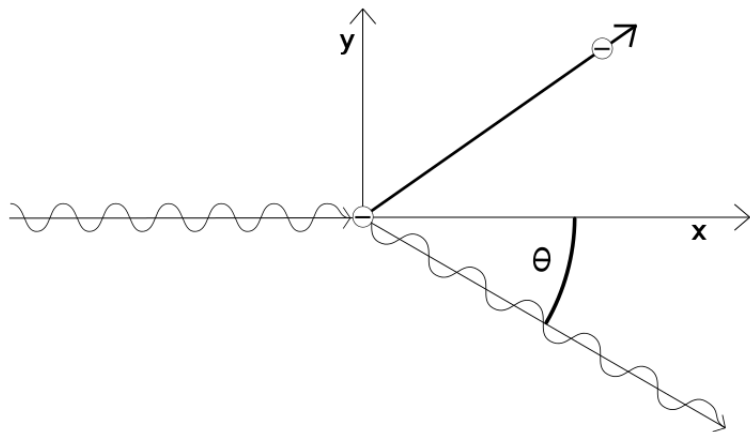
- Albert Einstein (1905) wyjaśnił efekt fotoelektryczny dzięki założeniu, że wiązka światła rozchodzi się w przestrzeni w postaci **fotonów**, z których każdy unosi porcję (kwant) energii  $h\nu$ .
- **Równanie Einsteina** wyraża zasadę zachowania energii w przypadku pochłonięcia pojedynczego fotonu przez pojedynczy elektron.

$$h\nu = E_0 + E_{k,max}, \quad (1)$$

gdzie  $E_0$  jest **pracą wyjścia**, czyli minimalną energią potrzebną do uwolnienia elektronu z katody.

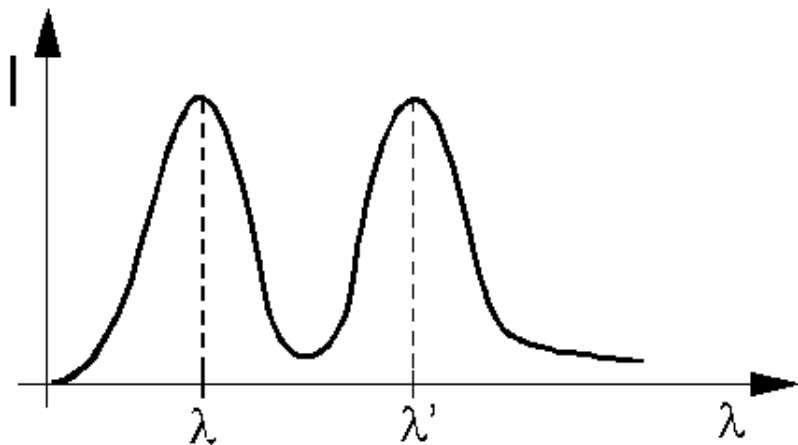
- Z doświadczenia możemy wyznaczyć **stałą Plancka**  
 $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 4.14 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}.$

# Doświadczenie Comptona





# Doświadczenie Comptona



# Doświadczenie Comptona

- W doświadczeniu Comptona (1923) wiązka promieniowania rentgenowskiego była kierowana na grafitową tarczę. Mierzono długość i natężenie promieniowania rozproszonego w różnych kierunkach względem kierunku wiązki padającej.
- Wiązka padająca: długość  $\lambda = 71.1 pm$ , energia  $hc/\lambda = 17.5 keV$ .
- Wiązka rozproszona: maksima dla  $\lambda$  i  $\lambda' > \lambda$ .
- Wyjaśnienie: **fotony niosą pęd (Einstein 1916)**

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (2)$$

- **Przesunięcie comptonowskie**

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\phi), \quad (3)$$

gdzie  $\phi$  jest kątem rozproszenia,  $m$  masa cząstki.

# Doświadczenie Younga

- W jaki sposób światło może być falą (rozciągniętą w przestrzeni) i fotonami (powstającymi i znikającymi w pewnym obszarze)?
- Różne wersje doświadczenia Younga:
  - (a) wersja standardowa (Young 1801),
  - (b) wersja jednofotonowa (Taylor 1909),
  - (c) szerokokątna wersja jednofotonowa (Lai, Diels 1992).
- Wnioski:
  - (a) światło jest generowane w źródle w postaci fotonów,
  - (b) światło jest pochłaniane w detektorze w postaci fotonów,
  - (c) światło porusza się pomiędzy źródłem i detektorem jako **fala prawdopodobieństwa**.

# Fale materii de Broglie'a

- Postulat de Broglie'a (1924): elektron i inne cząstki można opisać jako **fale materii**.
- **Długość fali de Broglie'a**  $\lambda = h/p$ ,  $p$  to pęd cząstki.
- Weryfikacja doświadczalna dla elektronu: Davisson, Germer, Thomson (1927).
- 1994 - interferencja dla cząsteczek jodu  $I_2$ .
- 1999 - interferencja dla fulerenów  $C_{60}$  i  $C_{70}$ .
- Dyfrakcja elektronów i neutronów wykorzystywana jest do badania struktury atomowej ciał stałych i cieczy.

# Funkcja falowa

- Jaka wielkość opisuje fale materii?
- Zespolona **funkcja falowa**  $\Psi(x, y, z, t)$ .
- W wielu przypadkach można zapisać  $\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot \exp(-i\omega t)$ .
- **Gęstość prawdopodobieństwa**  $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$ ,

$$\int |\Psi|^2 dx dy dz = 1 \quad (\text{unormowanie}). \quad (4)$$

- Prawdopodobieństwo (przypadające na jednostkę czasu) wykrycia cząstki w małej objętości wokół danego punktu w fali materii jest proporcjonalne do wartości  $|\Psi|^2$  w tym punkcie.

# Równanie Schrödingera

- Jak znajdujemy funkcję falową?
- Fale materii spełniają **równanie Schrödingera** (1926).
- Rozważmy cząstkę poruszającą się w kierunku  $x$  w obszarze, w którym działające siły powodują, że ma ona energię potencjalną  $U(x)$ . W tym szczególnym przypadku r. S. możemy zapisać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi, \quad (5)$$

gdzie  $E$  jest całkowitą energią mechaniczną cząstki.

- Równania Schrödingera nie wyprowadza się, jest to postulat mechaniki kwantowej. Jest to równanie nierelatywistyczne jednocząstkowe.

# Równanie Schrödingera dla cząstki swobodnej

- Dla cząstki swobodnej  $U(x) = 0$ ,  $E = mv^2/2$ ,  $p = mv$ .
- Fala de Broglie'a  $\lambda = h/p$ , liczba falowa  $k = 2\pi/\lambda$ .
- Równanie Schrödingera sprowadza się do postaci

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad k = \sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}. \quad (6)$$

- Ogólne rozwiązanie (fala biegnąca)

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}. \quad (7)$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i\omega t} = C_1 e^{i(kx - \omega t)} + C_2 e^{-i(kx + \omega t)}. \quad (8)$$

- Fala biegnąca w prawo:  $C_2 = 0$ .  
Gęstość prawdopodobieństwa  $|\Psi|^2 = |C_1|^2$  ma stałą wartość wzdłuż całej osi  $x$ .

# Nieskończony próg potencjału

- Niech  $U(x) = 0$  dla  $x < 0$ ,  $U(x) = +\infty$  dla  $x > 0$ .
- Warunek na brzegu  $\psi_2(x) = 0$  dla  $x > 0$ .
- Rozwiązanie dla  $x < 0$  (interferencja fal)

$$\psi_1(x) = C_1 e^{ikx} - C_1 e^{-ikx} = 2iC_1 \sin(kx). \quad (9)$$

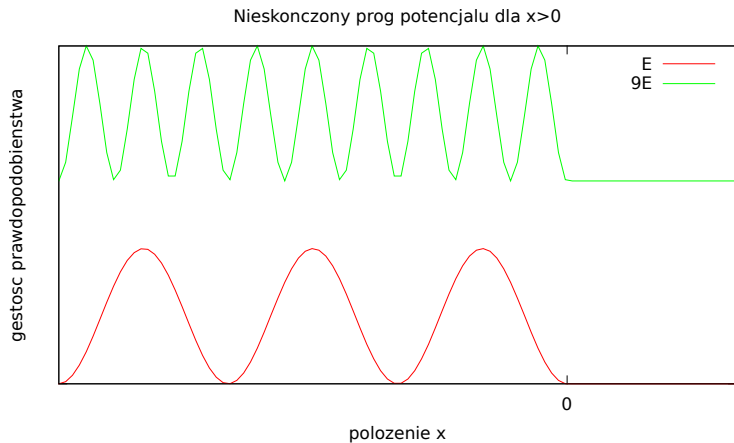
- Gęstość prawdopodobieństwa

$$|\psi_1|^2 \sim \sin^2(kx), \quad k = \sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}. \quad (10)$$

- Minima dla  $kx = -n\pi$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$



# Nieskończony próg potencjału



# Zasada nieoznaczoności Heisenberga

- **Zasada nieoznaczoności Heisenberga** (1927) dla składowych położenia i pędu

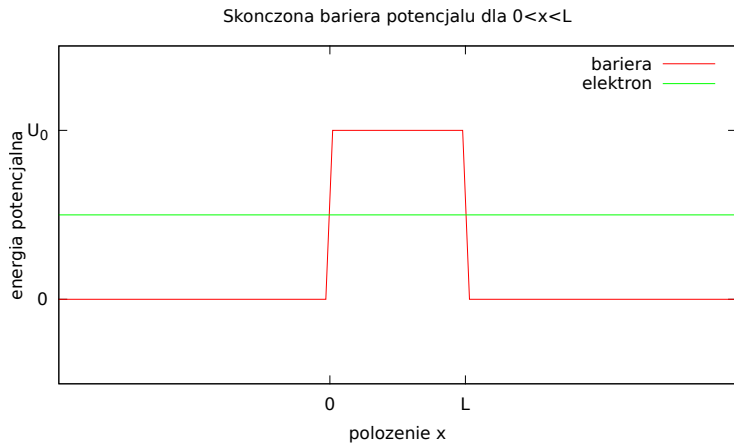
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h/(2\pi), \quad (11)$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq h/(2\pi), \quad (12)$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq h/(2\pi). \quad (13)$$

- Istnieje fundamentalne ograniczenie na wielkości niepewności pomiarowych, które nie wynika z niedoskonałości przyrządów pomiarowych.

# Skończona bariera potencjału



# Skończona bariera potencjału

- Niech  $U(x) = 0$  dla  $x < 0$  i  $x > L$ ,  
 $U(x) = U_0$  dla  $0 < x < L$ .
- Warunek na energię cząstki  $0 < E < U_0$ .
- Rozwiązanie równania Schrödingera

$$\psi_1(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}}, \quad (14)$$

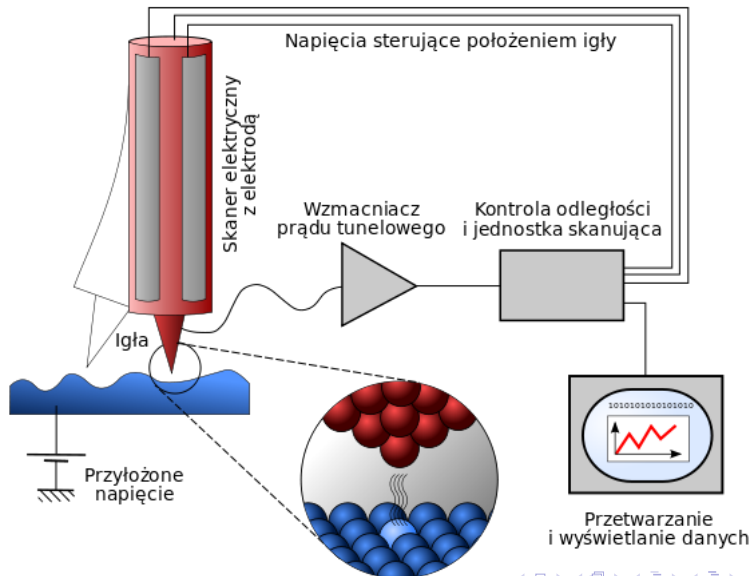
$$\psi_2(x) = C_3 e^{qx} + C_4 e^{-qx}, \quad q = \sqrt{\frac{8\pi^2 m (U_0 - E)}{h^2}}, \quad (15)$$

$$\psi_3(x) = C_5 e^{ikx}. \quad (16)$$

# Zjawisko tunelowe

- Współczynnik odbicia  $R = |C_2/C_1|^2$ ,  $T + R = 1$ .
- Współczynnik transmisji  $T = |C_5/C_1|^2 \approx e^{-2qL}$ .
- **Zjawisko tunelowe (tunelowanie przez barierę)** to kwantowe zjawisko przejścia cząstki przez barierę potencjału o wysokości większej niż energia cząstki.
- Zastosowanie: dioda tunelowa (szybkie wyłączenie przepływu elektronów).
- Nobel 1973: L. Esaki (tunelowanie w półprzewodnikach), I. Giaever (tunelowanie w nadprzewodnikach), B. Josephson (złącze Josephsona).
- Nobel 1986: G. Binning, H. Rohrer (STM).

# Skaningowy mikroskop tunelowy (STM)



# Nieskończona studnia potencjału

- Niech  $U(x) = 0$  dla  $0 < x < L$ , oraz  $U(x) = +\infty$  dla  $x < 0$  i  $x > L$ .
- Warunek na brzegu  $\psi(x) = 0$  dla  $x < 0$  i  $x > L$ .
- Rozwiązanie równania Schrödingera

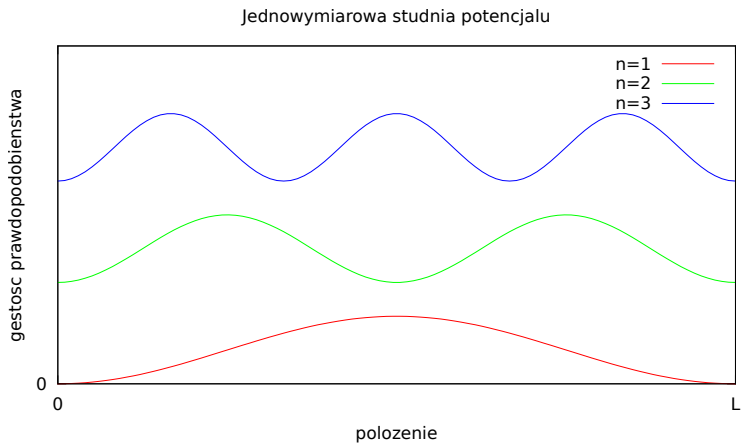
$$\psi(x) = C_1 \sin kx, \quad k = \sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}, \quad (17)$$

$$\sin kL = 0 \quad (\text{kwantowanie energii}), \quad (18)$$

$$k_n L = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (19)$$

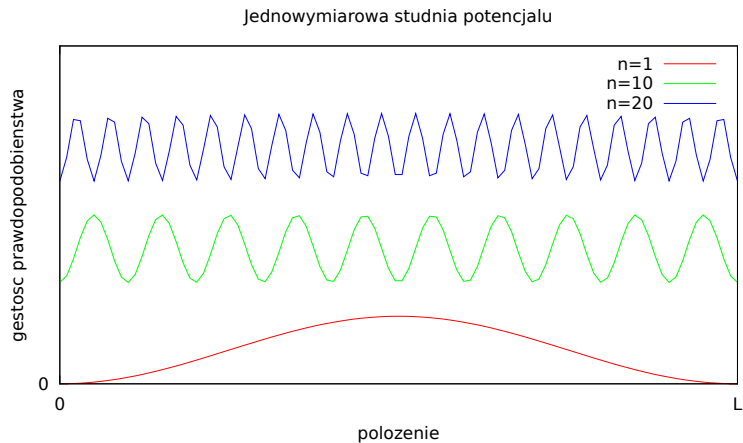
$$E_n = \frac{k_n^2 h^2}{8\pi^2 m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}, \quad n \text{ to liczba kwantowa.} \quad (20)$$

# Nieskończona studnia potencjału





# Nieskończona studnia potencjału



# Reguła lokalizacji przestrzennej

- **Lokalizacja fali w przestrzeni** prowadzi do **kwantyzacji**, a więc do powstania stanów o dyskretnych energiach. Zlokalizowana fala może przyjmować jedynie takie energie.
- Pęd cząstki w studni  $p_n = \sqrt{2mE_n} = nh/(2L)$ .
- Długość fali de Broglie'a  $\lambda = h/p_n = 2L/n$ .  
Mamy analogię do fal stojących w linie sztywno zamocowanej na końcach.
- Stan podstawowy:  $n = 1$ , energia  $E_1$ .
- Pierwszy stan wzbudzony:  $n = 2$ , energia  $E_2 = 4E_1$ .
- Drugi stan wzbudzony:  $n = 3$ , energia  $E_3 = 9E_1$ .

# Zmiany energii

- Elektron w pułapce dąży do zajęcia stanu o najniższej dozwolonej energii, czyli do zajęcia stanu podstawowego.
- Elektron może zmienić stan, może nastąpić **przeskok kwantowy** ze stanu  $E_{n1}$  do stanu  $E_{n2}$ . Energia niezbędna do przejścia wynosi  $\Delta E = E_{n2} - E_{n1}$ .
- Zlokalizowany elektron może zostać **wzbudzony** przez pochłonięcie fotonu, ale energia fotonu  $h\nu$  musi być dokładnie równa różnicy energii  $\Delta E$  pomiędzy poziomami.

$$h\nu = \Delta E = E_{n2} - E_{n1} \quad (\text{absorpcja fotonu}). \quad (21)$$

- Kiedy elektron osiąga stan wzbudzony, to szybko ulega **deekscytacji**, zmniejszając swoją energię. Elektron może zmniejszyć swoją energię przez emisję fotonu, a wtedy energia fotonu musi być równa różnicy energii między poziomami początkowym i końcowym elektronu.

# Zasada korespondencji

- Ze wzrostem liczby kwantowej  $n$  prawdopodobieństwo detekcji elektronu w studni staje się coraz bardziej jednorodne. Wynik ten jest przykładem ogólnej zasady zwanej **zasadą odpowiedniości (korespondencji)**: dla dostatecznie dużych liczb kwantowych przewidywania fizyki kwantowej przechodzą w sposób ciągły w przewidywania fizyki klasycznej (N. Bohr).
- Drugi ważny wniosek z problemu studni to **niezerowa energia stanu podstawowego (energia drgań zerowych)**. Dla  $n = 0$  otrzymujemy co prawda  $E = 0$ , ale wtedy  $\psi(x) = 0$ , co interpretujemy jako brak cząstki w studni.

# Pudło prostokątne

- Rozważmy elektron uwięziony w trójwymiarowej nieskończonej studni potencjału (pudle) o rozmiarach  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$ .
- Z równania Schrödingera otrzymujemy energię

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right), \quad (22)$$

gdzie  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  są trzema liczbami kwantowymi opisującymi stan elektronu.

- Funkcja falowa ma postać

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z). \quad (23)$$

- Stan podstawowy  $n_x = n_y = n_z = 1$ .

# Atom wodoru

- Rozważmy atom wodoru, czyli parę elektron i proton, oddziaływającą siłą elektrostatyczną.

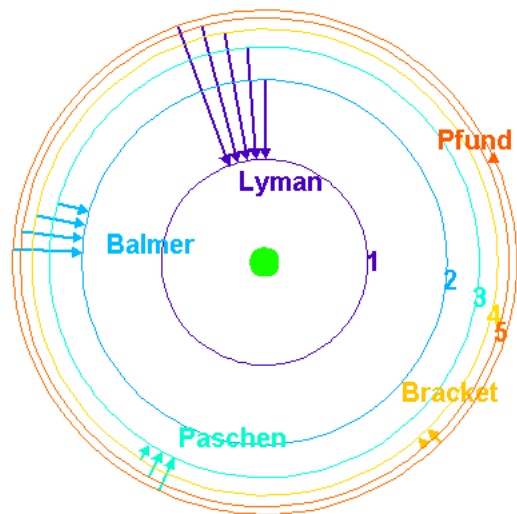
$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (24)$$

- Z równania Schrödingera otrzymujemy energię

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (25)$$

- Energia stanu podstawowego  $E_1 = -13.6\text{eV}$ .
- Promień Bohra  $a_0 = h^2\epsilon_0/(\pi me^2) = 52.9\text{pm}$ .

# Poziomy energetyczne atomu wodoru



# Liczby kwantowe w atomie wodoru

## Liczby kwantowe w atomie wodoru

Symbol	Nazwa	Dozwolone wartości
$n$	główna l. k.	$1, 2, 3, \dots$
$l$	orbitalna l. k.	$0, 1, 2, \dots, n - 1$
$m_l$	magnetyczna l. k.	$-l, -l + 1, \dots, l - 1, l$

Główna liczba kwantowa odpowiada odległości od jądra. Orbitalna liczba kwantowa jest miarą wielkości momentu pędu związanego ze stanem kwantowym. Magnetyczna liczba kwantowa jest związana z przestrzenną orientacją wektora orbitalnego momentu pędu.



# Stan podstawowy atomu wodoru

- Liczby kwantowe  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $m_l = 0$  (zerowy moment pędu).
- Funkcja falowa stanu podstawowego

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \exp(-r/a_0). \quad (26)$$

- Radialna gęstość prawdopodobieństwa  $P(r)$ ,

$$P(r)dr = |\psi(r)|^2 dV = |\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr, \quad (27)$$

$$P(r) = \frac{4r^2}{a_0^3} \exp(-2r/a_0), \quad (28)$$

$$\int_0^{+\infty} P(r)dr = 1 \quad (\text{unormowanie}). \quad (29)$$

# Radialna gęstość prawdopodobieństwa dla stanu podstawowego atomu wodoru $P(r)$

