Fale materii

13/15

Andrzej Kapanowski
https://ufkapano.github.io/

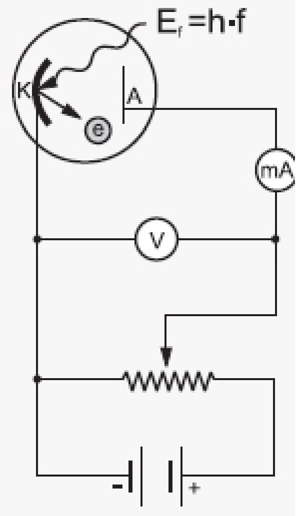
WFAIS, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

2021

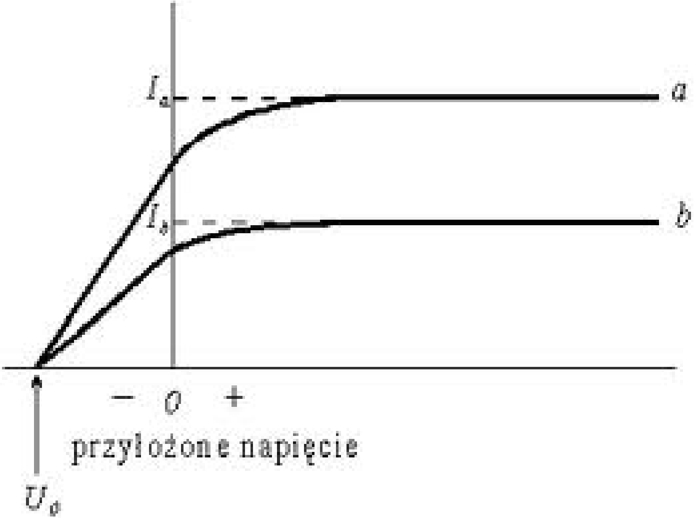
Zjawisko fotoelektryczne zewnętrzne

- 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) wyrywa z niej elektrony (fotoelektrony).
- Energia najszybszych elektronów wynosi $E_{k,max} = eV_0$, gdzie V_0 jest potencjałem hamującym.

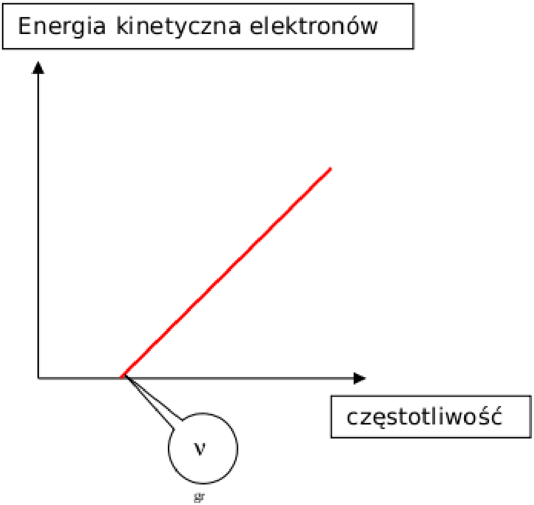
Zjawisko fotoelektryczne zewnętrzne



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 ν_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.

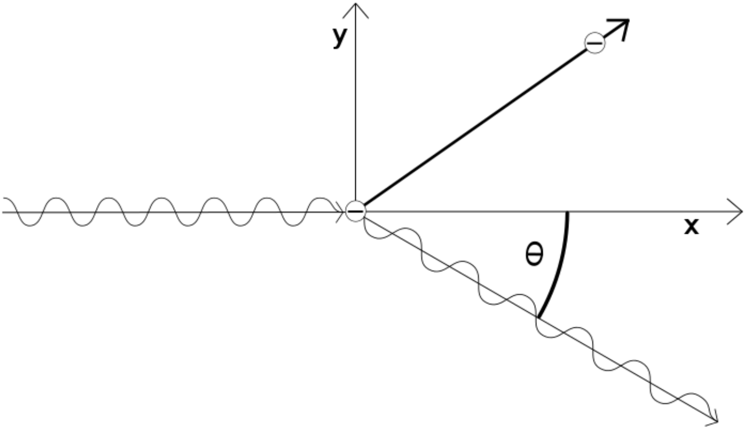
Równanie Einsteina

- 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 pojedyńczy elektron.

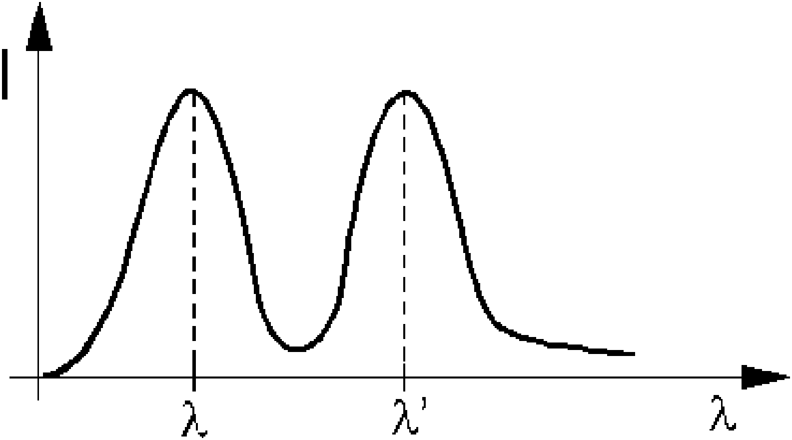
$$h\nu = E_0 + E_{k,max}, \tag{1}$$

  gdzie E_0 jest pracą wyjścia, czyli minimalną energią potrzebną do uwolnienia elektronu z katody.
- Z doświadczenia możemy wyznaczyć stałą Plancka $h = 6.62 \cdot 10^{-34} J \cdot s = 4.14 \cdot 10^{-15} eV \cdot s$.

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 λ i $\lambda' > \lambda$.
- Wyjaśnienie: fotony niosą pęd (Einstein 1916)

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \tag{2}$$

- Przesunięcie comptonowskie

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

gdzie ϕ jest kątem rozproszenia, m masa cząstki.

Doświadczenie Younga

- W jaki sposób światło może być falą (rozciągłą 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 $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$,

$$\int |\Psi|^2 dxdydz = 1 \quad \text{(unormowanie).} \tag{4}$$

- 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

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi, \tag{5}$$

  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

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

- Ogólne rozwiązanie (fala biegnąca)

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

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

- 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)

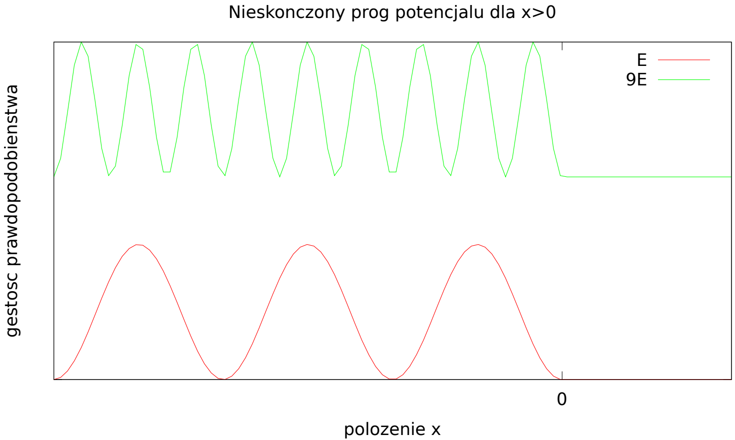
$$\psi_1(x) = C_1 e^{ikx} - C_1 e^{-ikx} = 2iC_1 \sin(kx). \tag{9}$$

- Gęstość prawdopodobieństwa

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

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

Nieskończony próg potencjału



Zasada nieoznaczoności Heisenberga

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

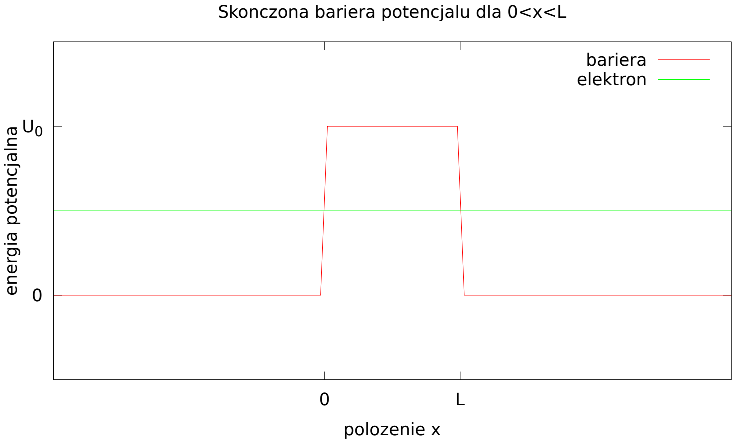
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h/(2\pi), \tag{11}$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq h/(2\pi), \tag{12}$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq h/(2\pi). \tag{13}$$

- 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

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

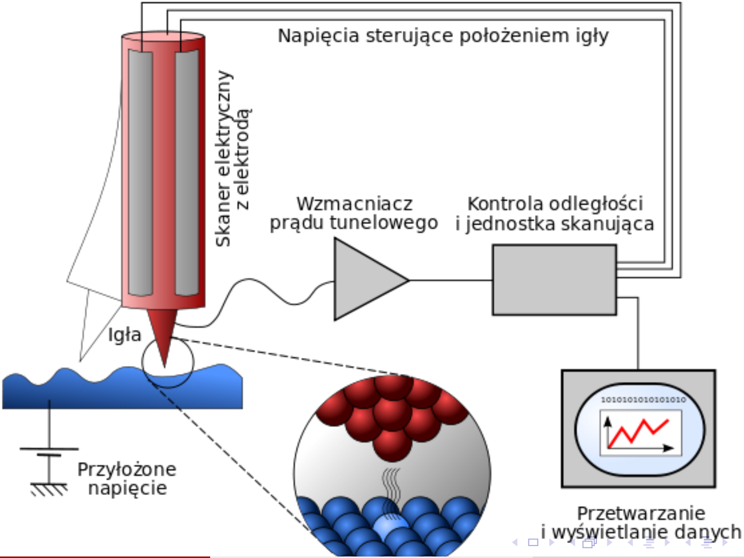
$$\psi_2(x) = C_3 e^{qx} + C_4 e^{-qx}, \quad q = \sqrt{\frac{8\pi^2 m(U_0 - E)}{h^2}}, \tag{15}$$

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

Zjawisko tunelowe

- Wpółczynnik 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 wyłączanie 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

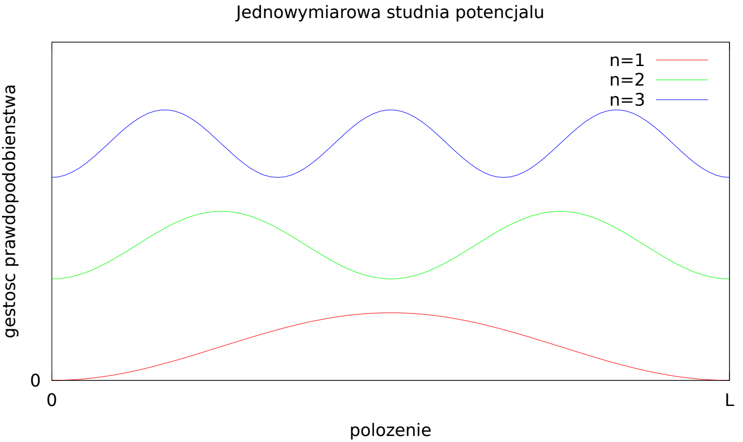
$$\psi(x) = C_1 \sin kx, \quad k = \sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}, \tag{17}$$

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

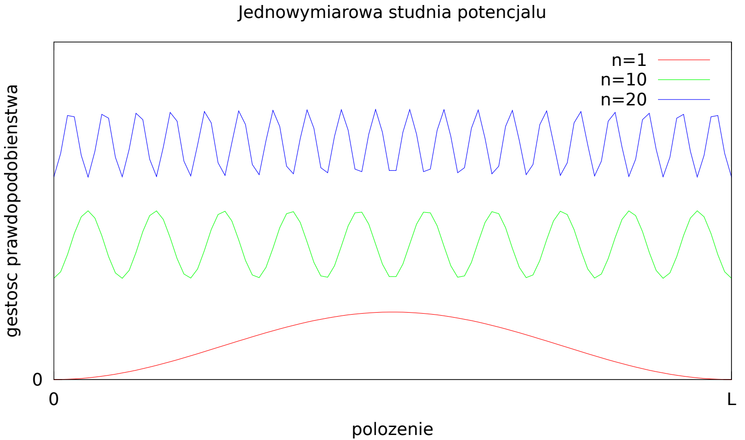
$$k_n L = n\pi, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{19}$$

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

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 ΔE pomiędzy poziomami.

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

- 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

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

  gdzie n_x, n_y, n_z są trzema liczbami kwantowymi opisującymi stan elektronu.
- Funkcja falowa ma postać

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

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

Atom wodoru

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

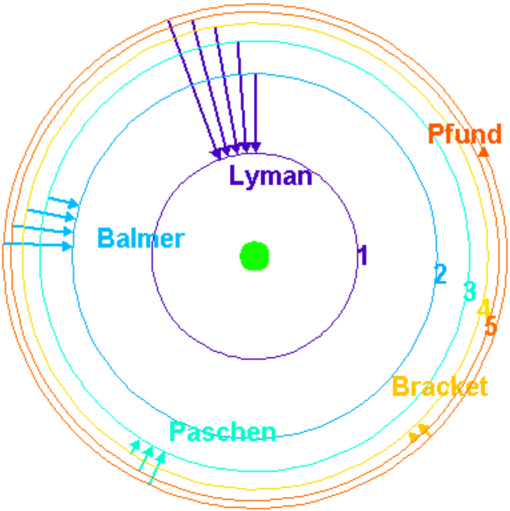
$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \tag{24}$$

- Z równania Schrödingera otrzymujemy energię

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

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

Poziomy energetyczne atomu wodoru



Liczby kwantowe w atomie wodoru

Liczby kwantowe w atomie wodoru

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

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

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

- Radialna gęstość prawdopodobieństwa $P(r)$,

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

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

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

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