פיזיקה קוונטית 1

פרק 4 - המודל הקוונטי לאטום המימן ספין והטבלה המחזורית

תוכן העניינים

פתרון עבור אטום המימן ותנע זוויתי קוונטי:

סיכום כללי:

משוואת שרדינגר לפוטנציאל התלוי רק ב-r:

משוואה ל-$\theta(\theta)$:

$$\frac{1}{\theta(\theta)}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\theta(\theta)}{\partial\theta}\right)+l(l+1)\sin^2\theta=m^2$$

משוואה ל-$\phi(\varphi)$:

$$\frac{\partial^2\phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}=-m^2\phi(\varphi)$$

פתרון לחלק הזוויתי:

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\theta(\theta)\phi(\varphi)=\varepsilon\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

$$\varepsilon=\begin{cases}(-1)^m & m>0\\ 1 & m\geq 0\end{cases}$$

$l\geq 0$ ו- $|m|\leq l$ שלם.

$$P_l^m(x)\equiv(1-x^2)^{|m|/2}\left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|}P_l(x)$$

$$P_l(x)\equiv\frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l(x^2-1)^l$$

$$Y_0^0=\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\qquad Y_2^{\pm2}=\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}}sin^2\theta\, e^{\pm2i\phi}$$

$$Y_1^0=\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta\qquad Y_3^0=\left(\frac{7}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(5\,cos^3\theta-3\,cos\,\theta)$$

$$Y_1^{\pm1}=\mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta e^{\pm i\phi}\qquad Y_3^{\pm1}$$

$$=\mp\left(\frac{21}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}}sin\,\theta\,(5\,cos^2\theta-1)e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0=\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(3\cos^2\theta-1)\qquad Y_3^{\pm2}=\left(\frac{105}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}}sin^2\theta\,cos\,\theta\,e^{\pm2i\phi}$$

$$Y_2^{\pm1} = \mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi} \qquad Y_3^{\pm3} = \mp\left(\frac{35}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^3\theta\, e^{\pm 3i\phi}$$

$$P_1^1 = \sin\theta \qquad P_3^3 = 15\sin\theta\,(1-\cos^2\theta)$$

$$P_1^0 = \cos\theta \qquad P_3^2 = 15\sin^2\theta\cos\theta$$

$$P_2^2 = 3\sin^2\theta \qquad P_3^1 = \frac{3}{2}\sin\theta\,(5\cos^2\theta - 1)$$

$$P_2^1 = 3\sin\theta\cos\theta \qquad P_3^0 = \frac{1}{2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$$

$$P_2^0 = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$$

אורתוגונליות:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} [Y_l^m(\theta,\varphi)]^* \left[Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)\right] \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

המשוואה לחלק הרדיאלי:

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}(V(r)-E) = l(l+1)$$

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = Eu(r)$$

פתרון עבור אטום המימן:

מתוך פתרון המשוואה תנאי שמקוונטט את האנרגיה:

$$E_n = -\frac{mk^2e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}$$

$$E_1 = -\frac{mk^2e^4}{2\hbar^2} = -13.6\ eV$$

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

הפתרון לפונקציה תלוי בקבועים n ו-l:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n-l)!]^3}}\, e^{-\frac{r}{na}}\left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)$$

רדיוס בוהר:

$$a=\frac{\hbar^2}{kme^2}=0.529\cdot10^{-10}m$$

$$L_{q-p}^{p}(x)\equiv(-1)^p\left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x)$$
$$L_q(x)\equiv e^x\left(\frac{d}{dx}\right)^q\left(e^{-x}x^q\right)$$

$$R_{10}=2a^{-\frac{3}{2}}exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$
$$R_{20}=\frac{1}{\sqrt{2}}a^{-\frac{3}{2}}\left(1-\frac{1}{2}\frac{r}{a}\right)exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$$
$$R_{21}=\frac{1}{\sqrt{24}}a^{-\frac{3}{2}}\frac{r}{a}exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$$
$$R_{30}=\frac{2}{\sqrt{27}}a^{-\frac{3}{2}}\left(1-\frac{2}{3}\frac{r}{a}+\frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)exp\left(-\frac{r}{3a}\right)$$
$$R_{31}=\frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-\frac{3}{2}}\left(1-\frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)exp\left(-\frac{r}{3a}\right)$$
$$R_{32}=\frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-\frac{3}{2}}\left(\frac{r}{a}\right)exp\left(-\frac{r}{3a}\right)$$
$$R_{40}=\frac{1}{4}a^{-\frac{3}{2}}\left(1-\frac{3}{4}\frac{r}{a}+\frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)exp\left(-\frac{r}{4a}\right)$$
$$R_{41}=\frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}}a^{-\frac{3}{2}}\left(1-\frac{1}{4}\frac{r}{a}+\frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\frac{r}{a}exp\left(-\frac{r}{4a}\right)$$
$$R_{42}=\frac{1}{64\sqrt{5}}a^{-\frac{3}{2}}\left(1-\frac{1}{12}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)^2 exp\left(-\frac{r}{4a}\right)$$
$$R_{43}=\frac{1}{768\sqrt{35}}a^{-\frac{3}{2}}\left(\frac{r}{a}\right)^3 exp\left(-\frac{r}{4a}\right)$$

פתרון כללי:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$$
$$n=1,\ 2,\ 3,\ \ldots$$

l שלם ומקיים: $0\le l\le n-1$

m שלם ומקיים: $-l\le m\le l$

אורתוגונליות:

$$\int \psi^*_{nlm}\psi_{n'l'm'}\, r^2 \sin\theta\, dr d\theta d\phi = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

פונקציית ההסתברות הרדיאלית (צפיפות ההסתברות למצא את האלקטרון במרחק r מהגרעין):

$$P_{nl}(r) = |R_{nl}|^2 r^2$$

תנע זוויתי:

התנע הזוויתי הוא: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = (L_x, L_y, L_z)$

נגדיר אופרטורים: $\widehat{L^2}, \widehat{L_z}, \widehat{L_x}, \widehat{L_y}$

$$\widehat{L^2} Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$$

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

גודל התנ"ז יכול להיות גם אפס וזה בניגוד למודל של בוהר.

את הכיוון נתאר באמצעות הגודל של L_z, משם אפשר למצא את $\cos\theta = \frac{L_z}{|L|}$

$$\hat{L}_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$$

גם הכיוון של וקטור התנע הזוויתי מקוונטט!

רמות אנרגיה ניוון וספקטרום הפליטה:

צפיפות המצבים: $g(n) = 2n^2$ (ה-2 מגיע מהספין).

כללי מעבר (Selection Rules):

1. $n_i > n_f$
2. $\Delta l = l_f - l_i = \pm 1$
3. $\Delta m = m_f - m_i = 0, \pm 1$

שאלות:

1) הסתברות להיות רחוק מרדיוס בוהר

א. חשבו את ההסתברות של אלקטרון במצב היסוד באטום מימן, להימצא במרחק שגדול מרדיוס בוהר מהגרעין.

ב. מצאו את הרדיוס הממוצע בו נמצא האלקטרון במצב היסוד.

2) כוח ממוצע

פונקציית הגל של המצב: $n = 2\,, l = 1\,, m = 0$ היא: $\psi_{210} = \frac{\mathrm{r}\cdot cos\theta}{\sqrt{32\pi a^5}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}}$.

מצאו את גודל הכוח החשמלי הממוצע שפועל על האלקטרון.

נוסחאות עזר:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x}\,dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$\int_0^{\pi} \boldsymbol{cos}^2\,\theta\,\boldsymbol{sin}\,\theta\,d\theta = \frac{2}{3}$$

$$\int_0^{\pi} sin^5\quad \theta d\theta = \frac{16}{15}$$

3) הראו כי התנז לא בכיוון Z

הראו שהתנע הזוויתי המסלולי של האלקטרון באטום המימן לא יכול להיות מקביל לציר Z.

4) גז מעורר

נתון גז של אטומי מימן שבכל אחד מהם האלקטרון נמצא ברמה התחלתית ($n = 4, l = 3$).

נתון שאין אינטראקציה בין האטומים, טמפרטורת הגז נשארת קבועה כל הזמן ולא קיים שדה מגנטי חיצוני.

כמה קווי פליטה שונים (אורכי גל שונים) נראה בספקטרום הפליטה של הגז (ספקטרום הפליטה מתקבל כאשר האלקטרונים יורדים לרמות נמוכות יותר)?

רשמו את מצבי האנרגיה הנמוכים ביותר שבהם יכולים להימצא האלקטרונים לאחר זמן רב (השתמשו במספרים הקוונטים (n, l) כדי לאפיין את מצבי האנרגיה).

5) צבר אטומי מימן במצב 2 בשטרן גרלך

צבר אטומי מימן נמצא במצב $n = 2$ (ועם תנע זוויתי כלשהו).

בכל סעיפי השאלה יש להתחשב גם בספין.

א. כמה כתמים יהיו על המסך עבור הצבר בניסוי שטרן גרלך?

ב. ציינו איזה מצב קוונטי גרם לכל כתם על המסך.

אורך המגנט בניסוי הוא L והמרחק מסוף המגנט ועד המסך הוא $10L$.
השדה המגנטי הוא $B(z)=B_0\frac{z}{L}$ ומהירות האטומים היא v.

ג. מה יהיה המרחק בין שני הכתמים הנוצרים מהמצבים בהם האלקטרון נמצא ברמה $2s$?

ד. כמה רמות אנרגיה שונות קיימות לצבר (תחת שדה מגנטי)?
כמה אורכי גל שונים יכולים להיפלט מהצבר?

תשובות סופיות:

1) א. 0.677 ב. $1.5a$

2) $\frac{ke^2}{12a^3}$

3) הוכחה.

4) 5 קווים, $1s$ ו-$2s$.

5) א. ישנם 5 אופציות שונות למומנט המגנטי ולכן נקבל 5 כתמים.
ב. הכתם הכי נמוך שייך ל-$m+2m_s=2$ וככל שהערך יורד הכתם יהיה יותר גבוה.
ג. $21\frac{\mu_B B_0 L}{mv^2}$
ד. לצבר 5 רמות אנרגיה שונות עבור הערכים השונים של המומנט המגנטי.
7 אורכי גל שונים.

מומנט מגנטי מסילתי ואפקט זימן הנורמאלי:

סיכום כללי:

מומנט כוח על דיפול מגנטי:

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

אנרגיה פוטנציאלית של דיפול מגנטי בשדה מגנטי:

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

כוח על דיפול מגנטי בשדה מגנטי לא אחיד:

$$\vec{F} = (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla})\vec{B}$$

מומנט דיפול מגנטי כתוצאה מתנועת האלקטרון סביב הגרעין:

$$\vec{\mu} = \frac{-\mu_B}{\hbar}\vec{L}$$

גודל קבוע שנקרא המגנטון של בוהר:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.788 \cdot 10^{-5}\, {eV}/{T}$$

האנרגיה הפוטנציאל כתוצאה האינטראקציה של המומנט המגנטי המסילתי עם שדה מגנטי חיצוני:

$$U = \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L} \cdot \vec{B} = \mu_B B m$$

כאשר m הוא המספר הקוונטי של Lz.

תוספת לשינוי באנרגיה כתוצאה ממעבר בין הרמות בעקבות אפקט זימן:

$$\Delta E_z = \mu_B B \Delta m$$
$$\Delta m = \pm 1{,}0$$

התוספת בעקבות אפקט זימן גורמת לכל קו ספקטרלי להתפצל לשלושה קווים.

שאלות:

1) פוטון נפלט מאטום מימן בשדה מגנטי

אלקטרון נמצא ברמת האנרגיה $3p$ של אטום מימן. האטום נמצא באזור בו יש שדה מגנטי אחיד $B = 4 \cdot 10^3[T]$. מצאו את אורך הגל הקצר ביותר שיכול

להתקבל ממעבר של האלקטרון לרמה כלשהיא (הניחו שהאלקטרון אינו עולה רמות לפני הפליטה).

2) פליטה מאטום בורון ורוחב פס

גז של אטומי בורון נמצא באזור בו קיים שדה מגנטי חיצוני אחיד B.

בכל אחד מהאטומים מעוררים את האלקטרון שנמצא ברמה $2p$ לרמה $3s$ ומודדים את ספקטרום הקרינה האלקטרומגנטית שמתקבל בחזרה של האלקטרון לרמה המקורית.

א. כמה קווים יתקבלו בספקטרום? הניחו שרמת האנרגיה זהות לאלו של אטום המימן.

ב. מצאו את הערך של B עבורו נוכל להבחין כי הפיצול אכן נבע מהשדה המגנטי החיצוני אם נתון שזמן החיים של הרמה המעוררת הוא 2ns.

תשובות סופיות:

1) 100nm.

2) א. 3 קווים. ב. $B > 9mT$

ספין ניסוי ושטרן גרלך:

סיכום כללי:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$\vec{L}$ תנ"ז מסילתי, נובע מהתנועה הסיבובית של החלקיק.

$\vec{S}$ תנ"ז כתוצאה מהספין.

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

S גדולה - גודל התנ"ז מהספין.

s קטנה - הספין של החלקיק, עבור אלקטרון $s = \frac{1}{2}$.

עבור חלקיקים אחרים ערכי הספין הן כפולות שלמות של חצי $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$

חלקיקים שהספין שלהם חצי שלם $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ וכו' נקראים **פרמיונים** וחלקיקים שהספין שלהם שלם 0,1,2, נקראים **בוזונים.**

$$S_z = m_s\hbar$$

$-s < m_s < s$ בקפיצות של 1

עבור אלקטרון $m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

מומנט מגנטי מהספין $\vec{\mu}_s = -g\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{s}$

פקטור g או gyromagnetic ratio

עבור אלקטרון $g = 2.0023 \ldots \approx 2$

שאלות:

1) תוחלת של S

נתונה פונקציית הגל הבאה:

$$\frac{1}{\sqrt{4}}\Psi_{2,1,-1,\frac{1}{2}}+\frac{1}{\sqrt{4}}\Psi_{2,1,1,\frac{1}{2}}-\frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{2,1,1,-\frac{1}{2}}$$

א. הראו שהפונקציה מנורמלת (בהנחה ש-$\Psi_{\mathrm{n,l,m},m_s}$ הן אורטונורמליות).

ב. מצאו את $\langle\hat{L}_z\rangle$.

ג. מצאו את $\langle\hat{S}_z\rangle$.

ד. מצאו את ΔS_z.

2) שטרן גרלך עם תנז מסילתי

מה היה קורה בניסוי שטרן-גרלך אם לאלקטרון בקרן שפוגעת היה $l=1$?

תשובות סופיות:

1) א. הוכחה. ב. $\frac{\hbar}{2}$ ג. 0 ד. $\frac{\hbar}{2}$

2) הקרן תתפצל לחמש קרניים ונראה חמש נקודות על המסך.

אטומים מורכבים והטבלה המחזורית:

סיכום כללי:

כל אלקטרון מאכלס מצב מסוים המאופיין על ידי המספרים הקוונטים: $n,\ l,\ \mathrm{m}_l,\ \ \mathrm{m}_s$.

בגלל האינטראקציה של האלקטרונים עם עצמם האנרגיות תלויות ב-n וגם ב-l.

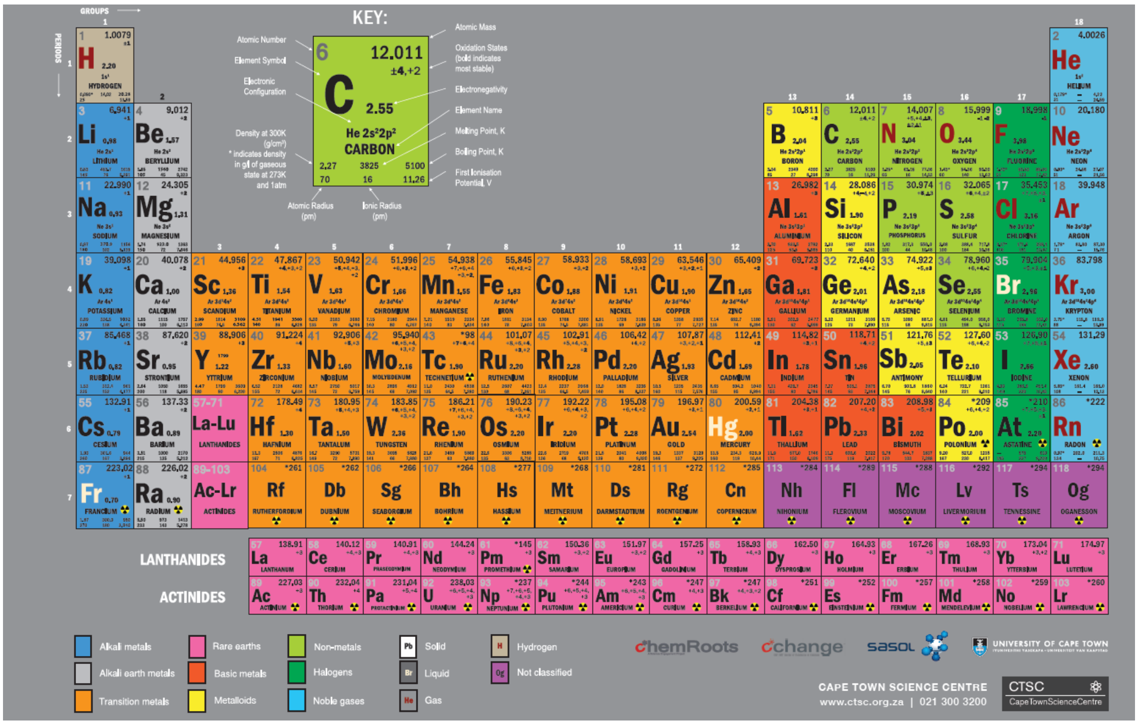
עיקרון האיסור של פאולי (Wolfgang Pauli (1900-1958 :

שני אלקטרונים באטום לא יכולים לאכלס את אותו המצב הקוונטי.

כלומר לא יכולים להיות שני אלקטרונים שיש להם בדיוק אותם מספרים קוונטים: $n,\ l,\ \mathrm{m}_l,\ \ \mathrm{m}_s$.

ככל ש-l גדל (יש יותר תנ"ז מסילתי) האנרגיה גדלה.

הטבלה המחזורית:



שאלות:

1) טיטניום

כמה אלקטרונים יש ליסוד טיטניום: Ti ($Z = 22$) ברמה הרביעית?
הניחו שהוא במצב היסוד.

2) אטום ראשון ברמה החמישית

מהו המספר האטומי של האטום "הראשון" ברמה החמישית?

3) קונפיגורציה של ברזל

רשמו את קונפיגורציית האלקטרונים של אטום הברזל: Fe Z=26
במצב היסוד. רשמו את הכתיב המלא והמקוצר.

4) קונפיגורציות הגיוניות

אלו מהקוניפגורציות הבאות הן הגיוניות ואלו לא? (עבור אטומים ברמת היסוד)

א. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^3$
ב. $1s^2 2s^2 2p^6 2d^2$
ג. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 4s^2$
ד. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$

תשובות סופיות:

1) שני אלקטרונים.
2) 37.
3) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$, $3d^2 4s^2$.
4) א. לא. ב. לא. ג. לא. ד. כן.