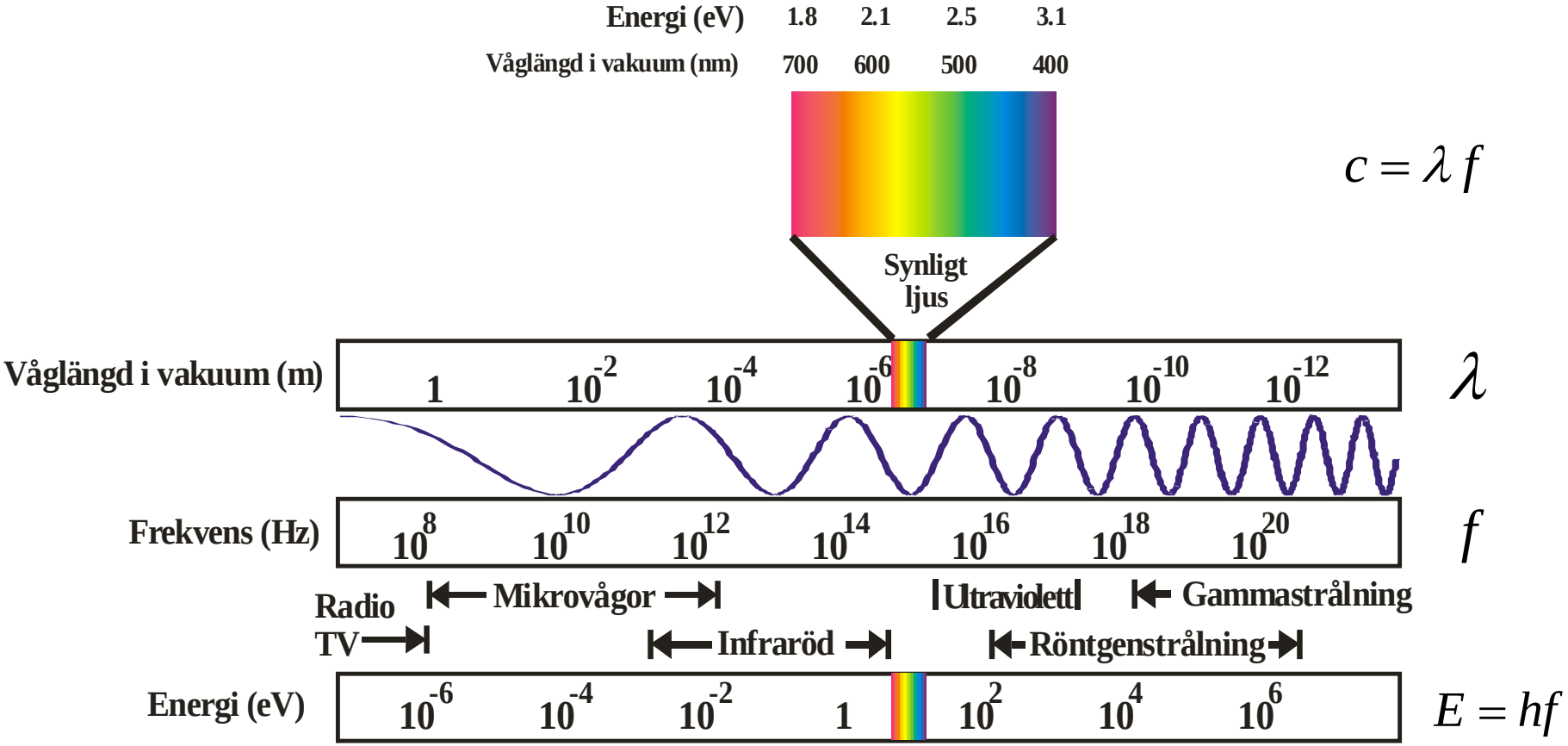
8. Energikvantisering (Energian kvantittuminen)

Lärandemål:

- Kunna beräkna energin för en foton som emitteras eller absorberas mellan givna energinivåer
- Kunna konstruera möjliga energinivå diagram från ett emissionsspektrum
- Kunna beräkna energinivåerna för en kvantiserad harmonisk oscillator från dess mikroskopiska egenskaper

Fotoner



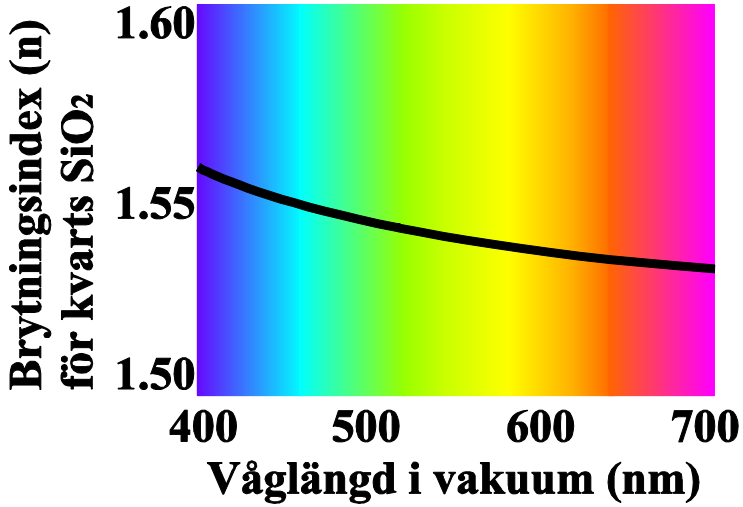
$$c = \lambda f$$

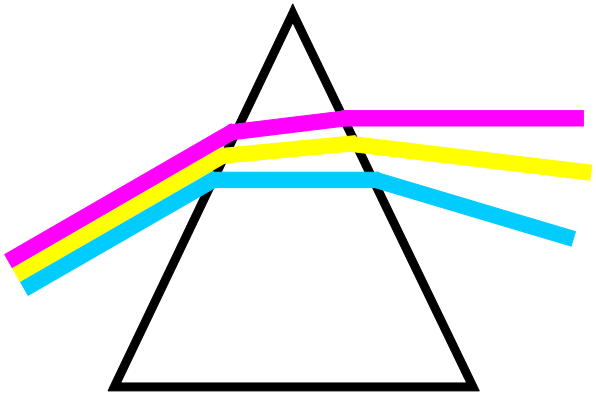
Ljus (valo)

$$\lambda_n = \frac{v}{f_n} = \frac{c}{nf_n} = \frac{c}{nf_{vak}} = \frac{\lambda_{vak}}{n}$$

$$E = hf \qquad n = \frac{c}{v}$$

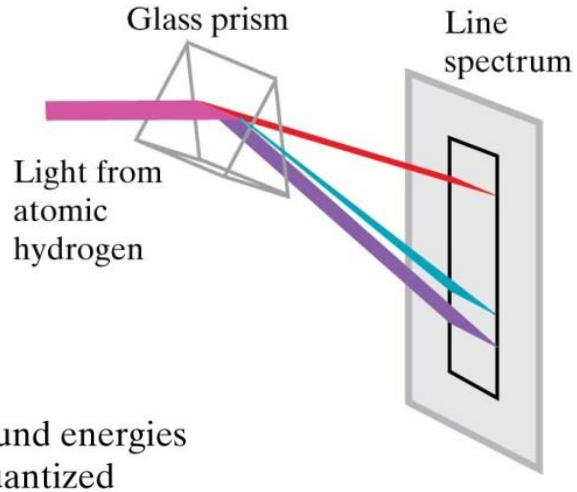
Färg	Våglängd i vakuum (nm)
Röd	700
Orange	620
Gul	550
Grön	500
Blå	450
Violett	400





Elektroniska energinivåer
(elektroniset energiatasot)

Ljus från vätgas



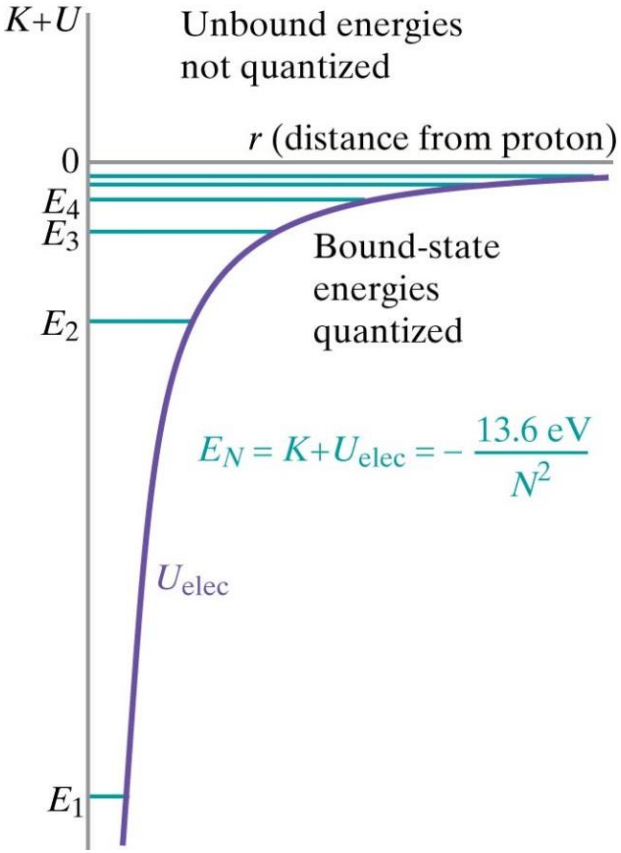
Potentiella energin mellan en proton och en elektron:

$$U_{elec} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{(+e)(-e)}{r} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

Schrödinger ekvation

$$\Rightarrow \quad E_N = K + U_{elec} = -\frac{13.6\ \text{eV}}{N^2}$$

N = 1, 2, 3, osv

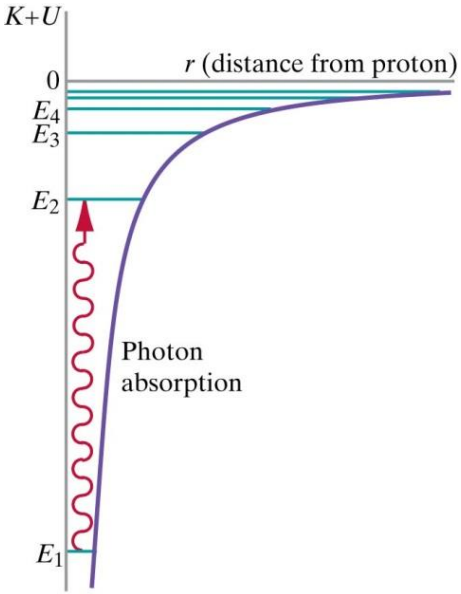


Absorption av foton: H + foton → H^*

Emission av foton: H^* → H + foton

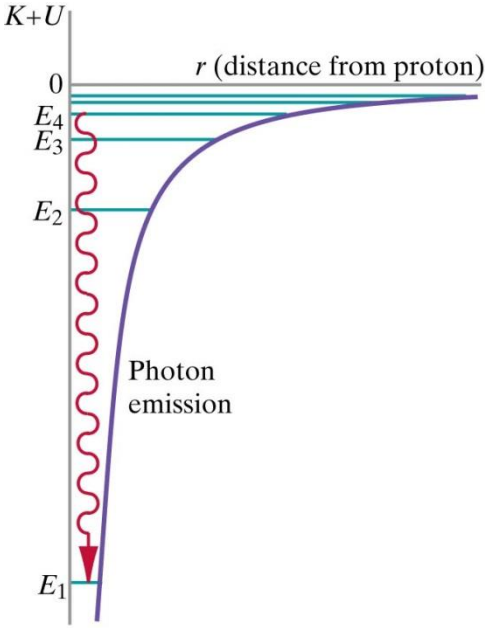
$$\boxed{E_{H^*} = E_H + K_{foton} = E_H + hf}$$

h Plancks konstant



$$E_N = K + U_{elec} = -\frac{13.6\ \text{eV}}{N^2}$$

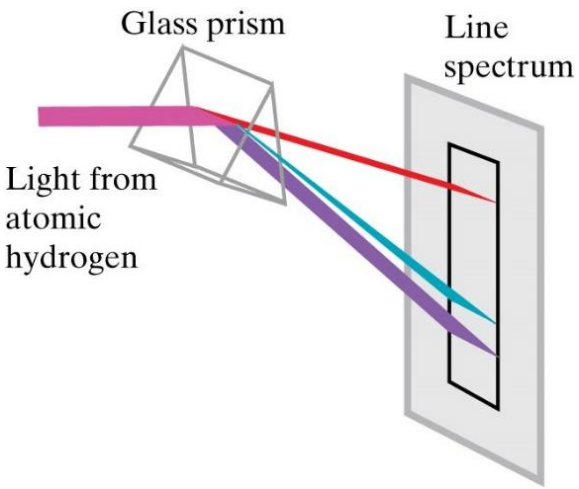
N = 1, 2, 3, osv

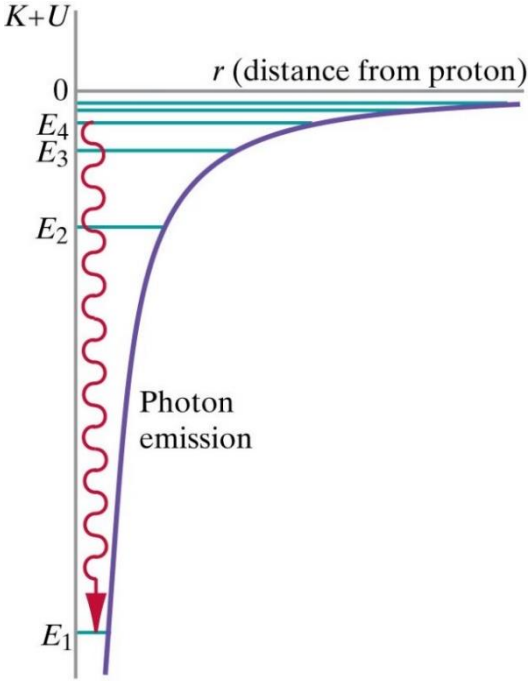


Absorption: 1→2 ➡ $-\frac{13.6\ \text{eV}}{2^2} - \left(-\frac{13.6\ \text{eV}}{1^2}\right) \approx 10.2\ \text{eV}$

Emission: 4→1 ➡ $-\frac{13.6\ \text{eV}}{4^2} - \left(-\frac{13.6\ \text{eV}}{1^2}\right) \approx 12.75\ \text{eV}$

Emissionsspektra (Emissiospektri)

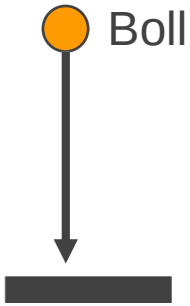




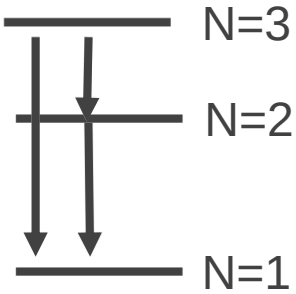
Sannolikheten att en atom i exiterat tillstånd blir kvar i exiterat tillstånd som en funktion av tiden:

$$e^{-t/\tau}$$

Medel livstiden: τ ~ 2 ns för H

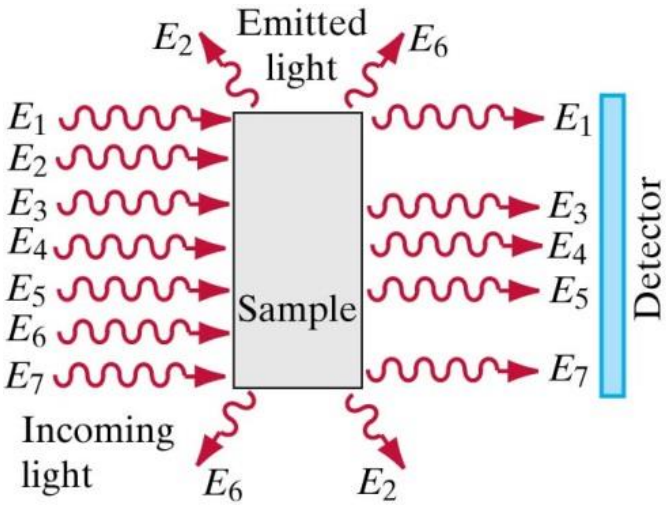


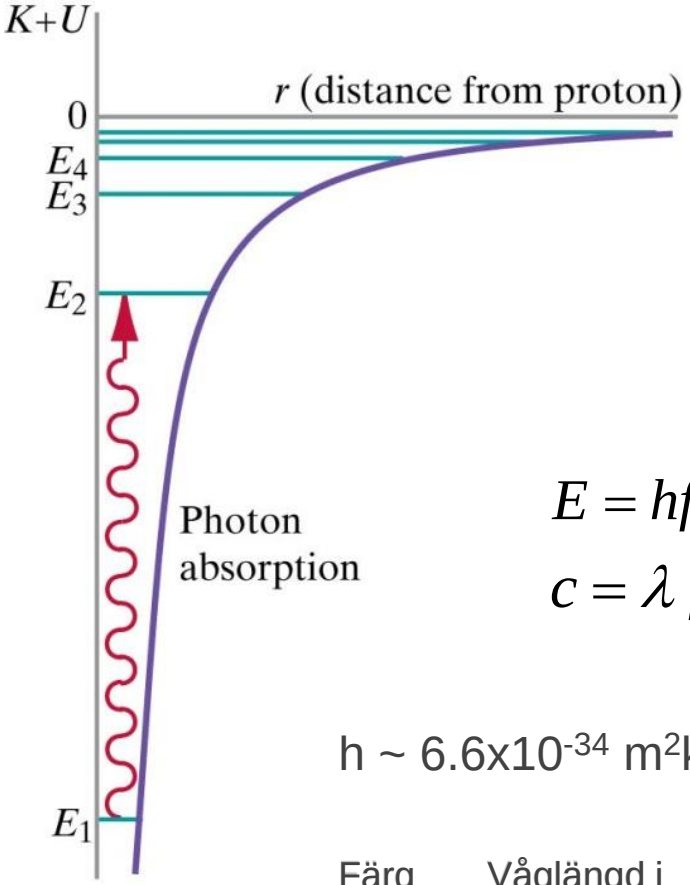
Klassisk mekanik: En boll faller kontinuerligt, kan säga hur länge det tar



Kvantmekanik: En atom ändrar tillstånd ögonblickligen vid oförutsägbar tid

Absorptionsspektra (Absorptiospektri)





$$E = hf$$

$$c = \lambda f$$

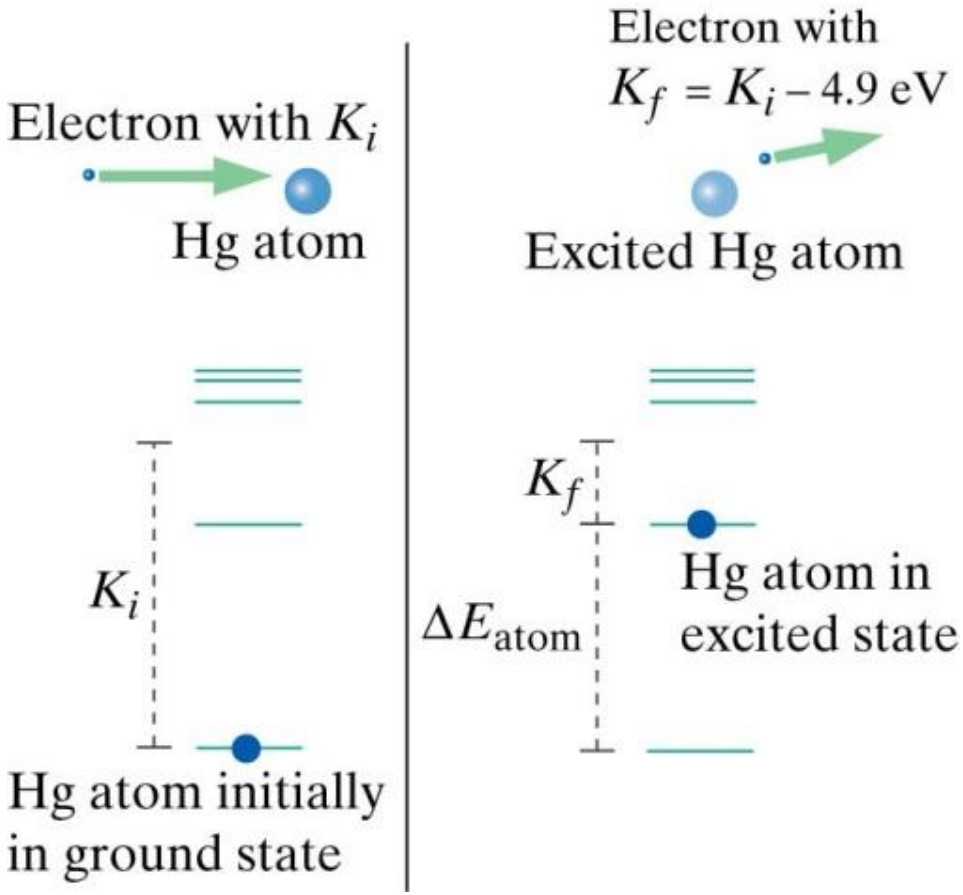
h ~ 6.6x10^{-34} m^{2}kg/s

Gaserna vid rumstemperatur är oftast i grundtillståndet

Varför är luften nästan fullständigt genomskinligt?

Färg	Våglängd i vakuum (nm)
Röd	700
Orange	620
Gul	550
Grön	500
Blå	450
Violett	400

Elektron excitering (elektroniviritys)



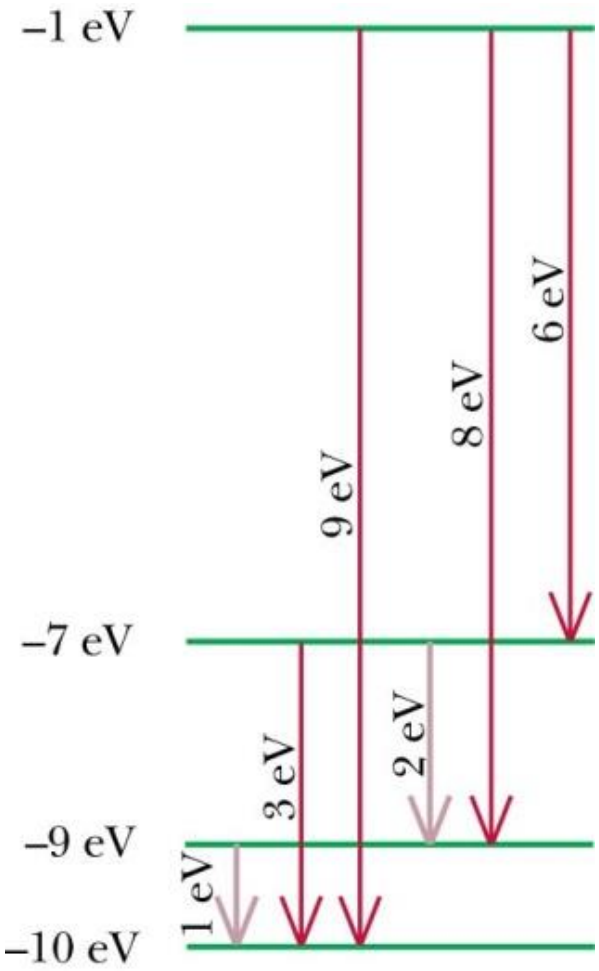
Sammanfattning

Tre processer:

1) Elektron excitering
2) Absorption av en foton
3) Emission av en foton

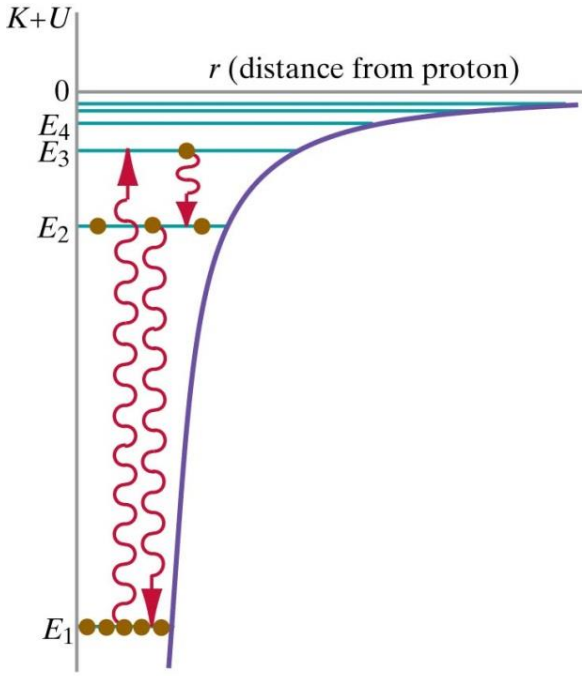
Förbjudna övergångar (kielletyt siirtymät)

Alla övergångar (elektronen ”faller” från en högre till lägre nivå) är inte möjliga.
I nästa kurs introducerar vi begreppet rörelsemängdsmoment, som också måste bevaras, vilket leder till att vissa elektroniska övergångar är inte möjliga



Temperatureffekt

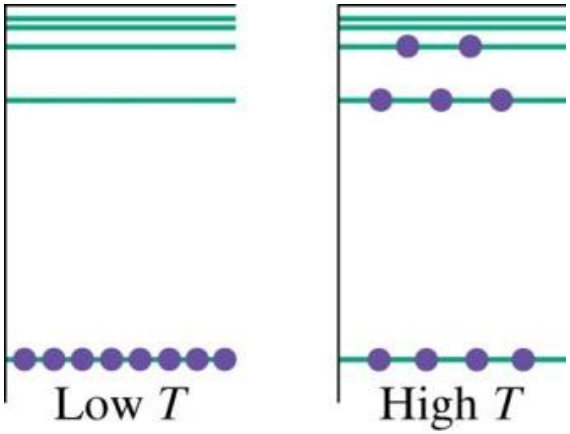
Atomerna och molekylerna kolliderar hela tiden, och en atom kan vid en kollision få så mycket energi att det sker en elektron excitering



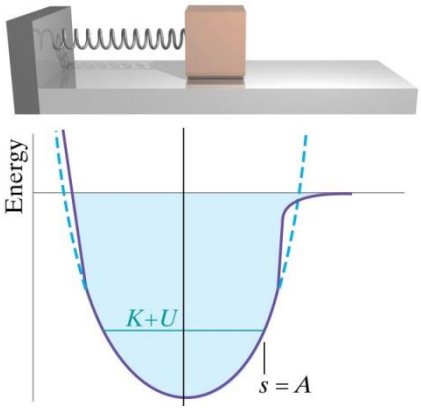
Sannolikheten att det sker en excitering med energin E vid temperaturen T ges av Boltzmann faktorn: $\exp(-E/kT)$

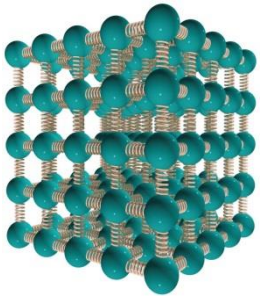
Boltzmann faktorn för E = 1 eV vid 300 K:

$$\sim \exp\left(\frac{-1.6\times10^{-19}\,\mathrm{J}}{(1.4\times10^{-23}\,\mathrm{J/K})(300K)}\right) \sim 3\times10^{-17}$$



Vibrationsenergi

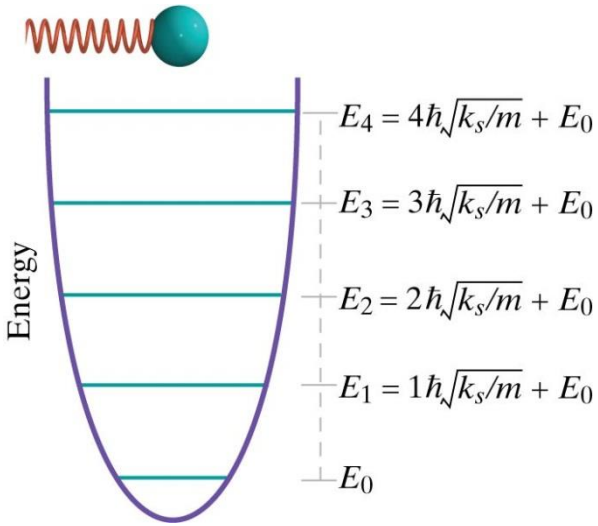




Klassiskt

$$K + U == \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}kA^2$$

Vinkelhastighet: $\omega_0 = \sqrt{k/m}$



Kvantmekaniskt

$$\boxed{\Delta E = \hbar\omega_0 = \hbar\sqrt{k/m}}$$

$$\hbar = h/2\pi$$

h är Plancks konstant $\sim 6.6\times10^{-34}$ Js

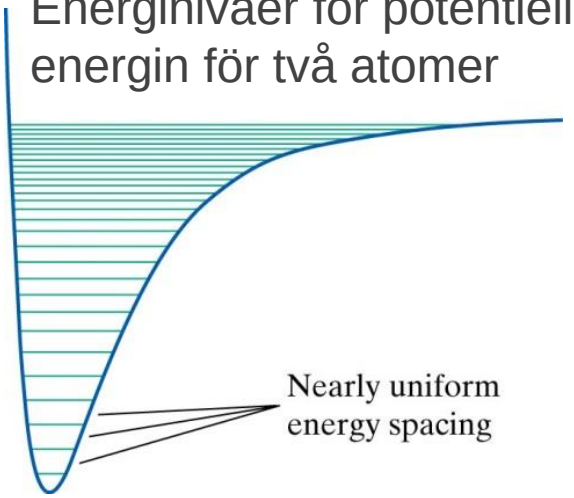
Heisenbergs osäkerhetsprincip

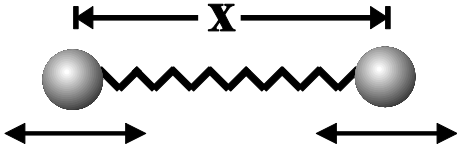
$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{k/m}}$$

Vibrationsenergi

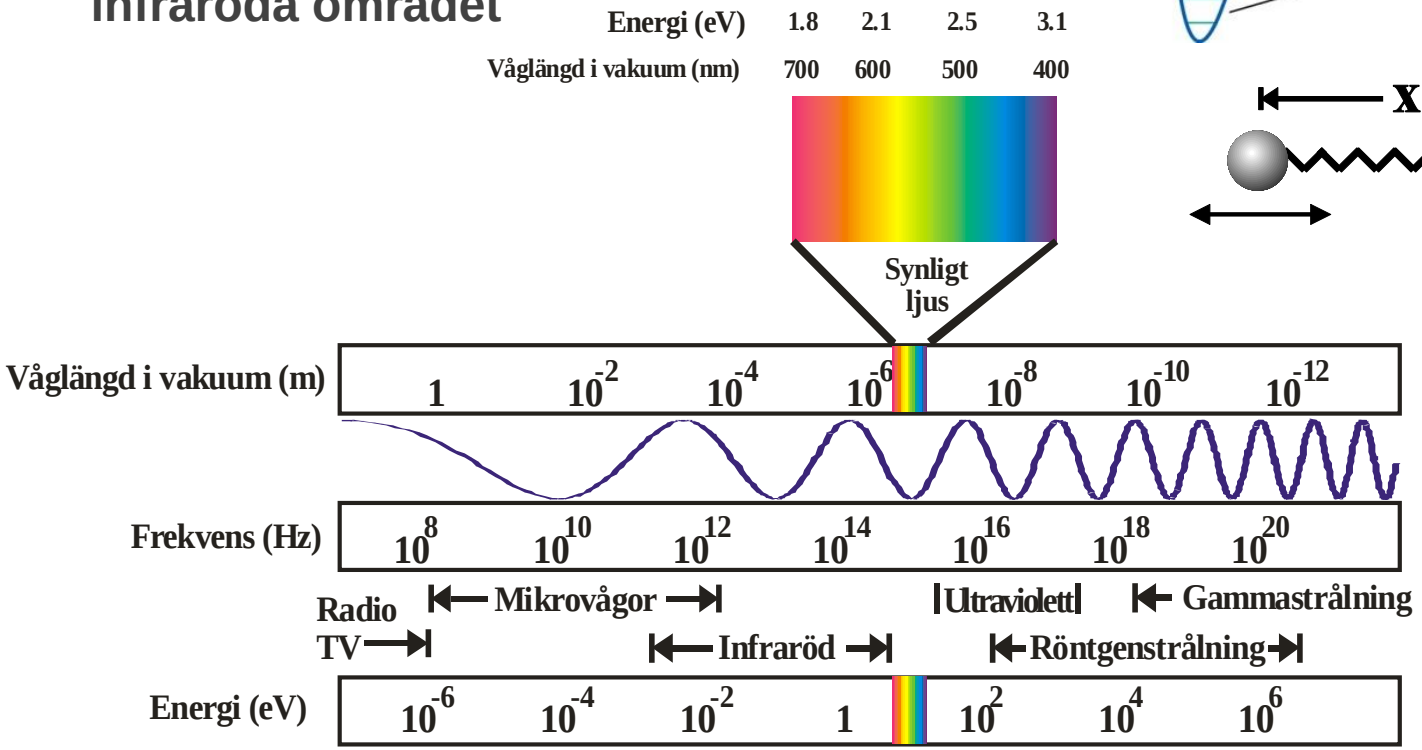
$$\Delta E = \hbar\omega_0 = \hbar\sqrt{k/m}$$

Energinivåer för potentiella energin för två atomer

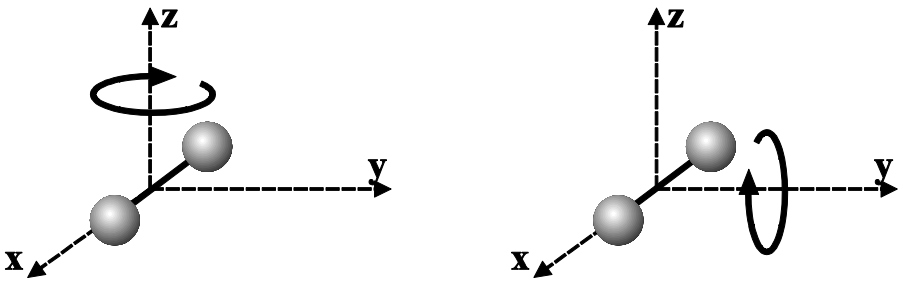


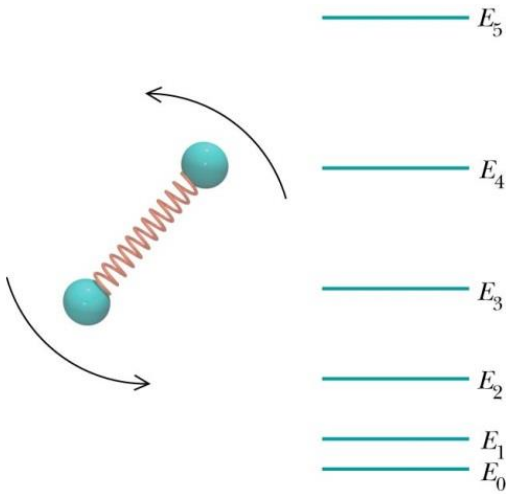


Energierna vid infraröda området

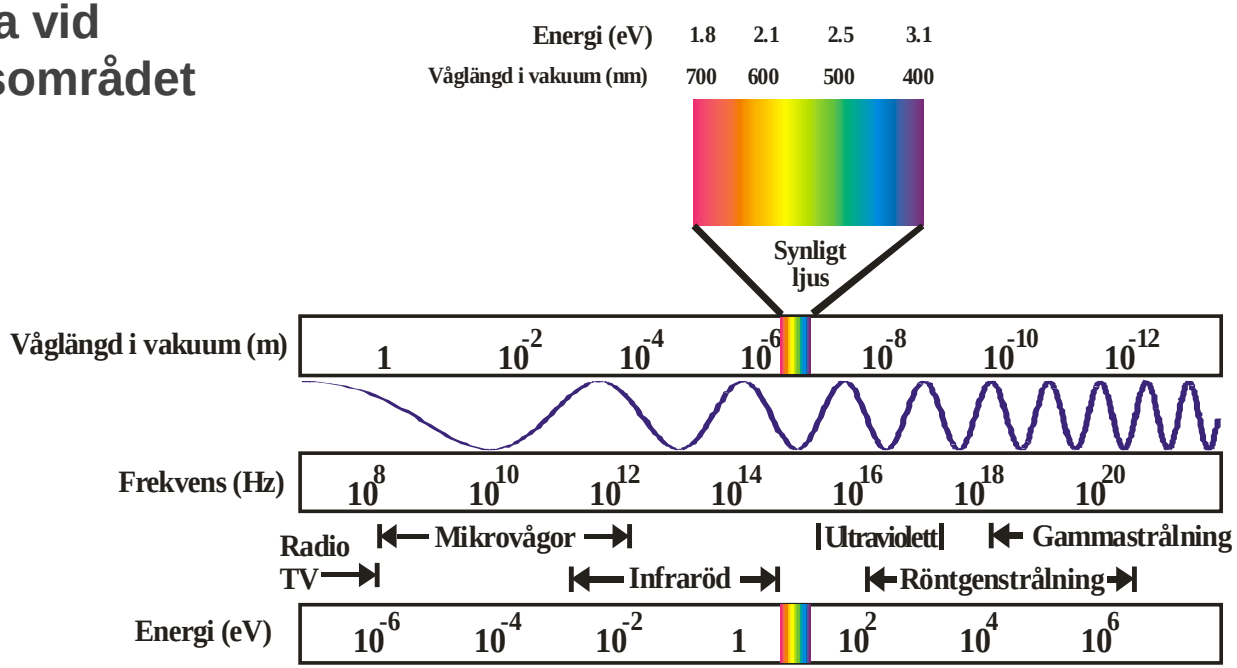


Rotationsenergi

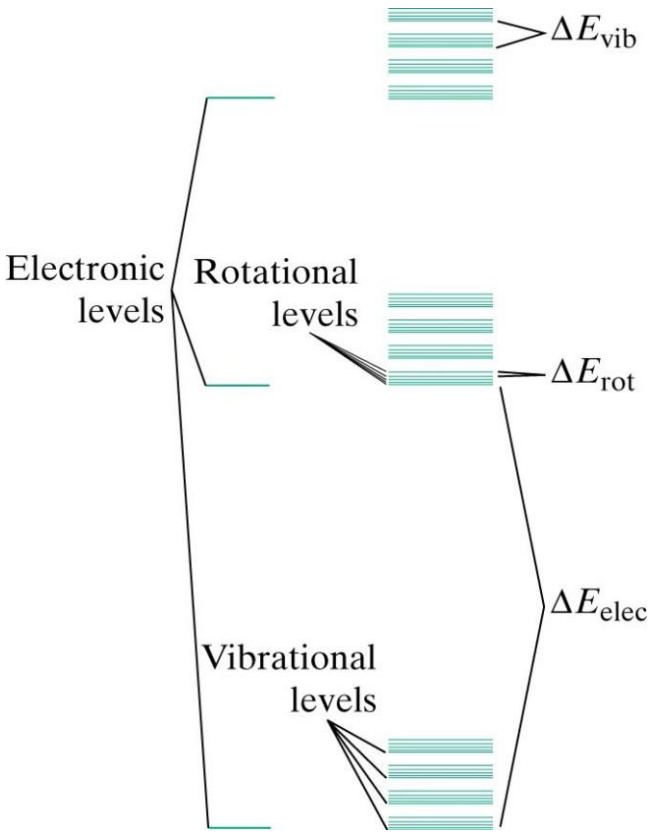




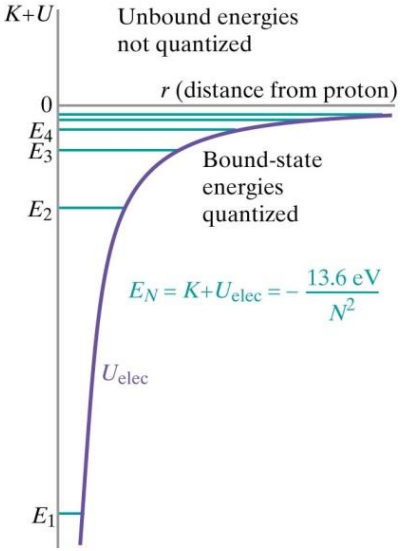
Energierna vid mikrovågsområdet



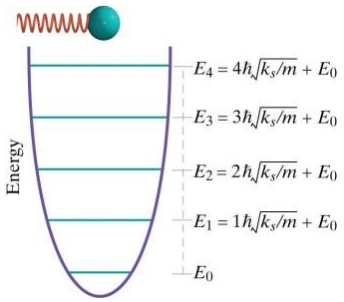
Energikvantisering för atomer och molekyler
Sammanfattning



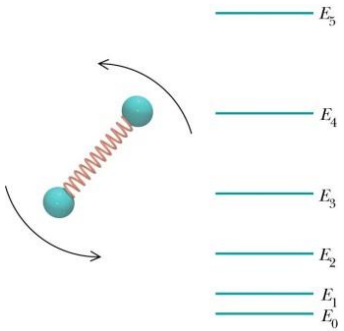
Elektronisk ~1 eV
(atomer, molekyler)



Vibration ~10^{-2} eV
(molekyler)



Rotation ~10^{-4} eV
(molekyler)



Vi har ett mikroskopiskt fjäder-massasystem vars fjäderkonstant är 50 N/m och massan är 4×10^{-26} kg. $c \sim 3.0 \times 10^{8}$ m/s, $h \sim 6.6 \times 10^{-34}$ m^2kg/s.

a) Vad är den minsta mängd vibrationsenergi som kan tillföras detta system?

b) Vad är skillnaden i massa (om det finns någon) av den mikroskopiska oscillatorn mellan att vara i grundtillståndet och att vara i det första exciterade vibrationstillståndet?

c) I en samling av dessa mikroskopiska oscillatorer är temperaturen tillräckligt hög för att grundtillståndet och de tre första exciterade tillstånden är upptagna. Vad är de möjliga energierna för fotoner som emitteras av dessa oscillatorer? (Bonusfråga: I vilken del av det elektromagnetiska spektret finns dessa emitterade fotonerna?)

Fjäder=jousi, minsta mängd=pienin määrä, kan tillföras=voidaan lisätä, skillnaden=ero, om det finns någon=jos sellainen on, grundtillstånd=perustila, första exciterade vibrationstillståndet=ensimmäinen viritetty värähtelytila, i vilken del av det elektromagnetiska spektret=missä osassa sähkömagneettista spektriä

$$\Delta E = \hbar\omega_0 = \hbar\sqrt{k/m} \qquad \hbar = h/2\pi$$

$$E_{Syst} = m_0 c^2 + K + U = M_{Syst} c^2$$

Lärandemål:

- Kunna beräkna energin för en foton som emitteras eller absorberas mellan givna energinivåer
- Kunna konstruera möjliga energinivå diagram från ett emissionsspektrum
- Kunna beräkna energinivåerna för en kvantiserad harmonisk oscillator från dess mikroskopiska egenskaper