קורס ספקטרוסקופיה, תשע"ג

פרופ' רון נעמן

מיפוי תכנים של הרצאה 3

המיפוי נעשה על ידי מירב דינור בהנחיית פרופ' רון בלונדר

זמן	תוכן
1:00	פוטנציאל מסוג אחר, אוסילטור הרמוני.- גרף פרבולה $v(x) = 1/2\ kx^2$
1:48	תופעה פיזיקלית שמתוארת ע"י הפוטנציאל הזה היא קפיץ הנגזרת היא קו ישר שלילי / חיובי צד אחד קפיץ מתוח צד שני מכווץ.
2:16-3:10	פונקצית הגל בתוך הפוטנציאל הזה.
3:27	הסיכוי הגבוה ביותר למצוא את החלקיק הוא באמצע ב – 0 האם פונקצית הגל מתאפסת בקצוות? לא, זהו לא קיר אינסופי של פוטנציאל. פונקצית הגל יכולה לחדור לתוך הפוטנציאל (מלווה בציור)
4:26	ההבדלים בין פונקצית הגל של חלקיק בתיבה לפונקצית הגל של אוסילטור הרמוני (מלווה בציור) 1. פונקצית הגל חודרת את מחסום הפוטנציאל
4:56	כתיבת ההמילטונין שמתאר את הבעיה, כתיבת משוואת שרדינגר לאוסילטור הרמוני.
5:41-6:27	אנרגיה של מצב היסוד $E_0= 1/2\ \hbar\omega$ התדר ω תלוי במסה ותלוי בקשיחות $\omega =\sqrt{k/m}$ K קבוע המתאר עד כמה הקפיץ קשה
6:45	הקשר בין הקבוע לתדירות- קשר ישר
7:14-8:10	אודות התוצאה של האנרגיה הראשונה במכניקה קלאסית האנרגיה הכי נמוכה היא אפס.החלקיק ימצא בדיוק באמצע הבור. שני גדלים ידועים מיקום ומהירות.
9:35-9:51	מכניקה קוונטית עיקרון אי הודאות
10:20	הבנת הנוסחה אי ודאות במקום σ_{px} מהירות * מסה באותו הכיוון $(p=m*v)$ מיקוםσ_x
11:31	אי ודאות של מקום במכניקה קלאסית = 0
12:23	דוגמא מצוינת של קפיץ עם מסה
12:45-13:36	ניסוי דומה במכניקה קוונטית. החלקיק מתואר ע"י פונקצית גל ולכן יש הסתברות למצוא אותו בכל מיני מקומות על הפונקציה. החלקיק הוא לא נקודה אלא גל ויש לו הסתברות סופית להיות במרחב. בכל מדידה של מקום תהיה הסתברות למצוא מסביב לאיזשהוא מקום, גודל המסביב הוא σ
13:36-13:58	לגבי בתנע- מאותן סיבות גם במדידה של התנע יהיה אותו אי ודאות.
13:58-14:37	עקון אי הודאות- אם נתון אחד ידוע, השני לא!!! תנע / מקום
15:12-16:04	עיקרון אי הודאות- שונה ממכניקה קלאסית, המכפלה גדולה מ $\hbar/2$ היא לא 0 אם יש וודאות גדולה על x המדידה על p_x יותר גרועה, פחות ודאית
16:08-16:47	בגלל זה במכניקה קוונטית לא יכול להיות שהחלקיק יהיה בתחתית הבור כי אז היינו יודעים גם את האנרגיה וגם את התנע. בנקודה 0 יש לו אנרגיה מסוימת

זמן	תוכן
16:47-17:39	מעין סיכום נקודתי על ההבדל הזה בין מכניקה קלאסית לקוונטית.
17:57-18:33	נוסחה כללית לאנרגיות באוסילטור הרמוני $Ev = (1/2 + v) * \hbar\omega$ $v = 0,1,2$ מספר הרמה מחליפים v ב n
18:57-19:35	n מספר הקוונטי של הרמה. ניתן לראות את המרחק בין הרמות באוסילטור הרמוני- כפולות של $\hbar\omega$ תדירות לא משתנה היא תלויה בקבוע הקפיץ ובמסה.
19:40	ציור של רמות האנרגיה ופונקצית הגל. הבדל נוסף- פונקצית הגל חלקיק בתיבה ואוסילטור, פתרון ל n גדול מאוד.
20:56	מתאר בדיוק את מספר הסינוסים ככל ש n יותר גדול הסינוסים יותר צפופים ונוצר מעין רצף
21:42-22:23	דומה לקלאסית- הסיכוי למציאת חלקיק בכל מקום במרחב המוגדר הוא כמעט זהה
23:00-23:53	אוסילטור הרמוני- מכניקה קלאסית דוגמא קפיץ, איפה הוא מבלה הכי הרבה זמן? המהירות הכי גבוהה היא במרכז, את המרכז הוא יעבור הכי מהר, בקצוות הוא מאט וכמעט עוצר.
24:52-25:20	הסבר על קפיץ- קפיץ רפוי קפיץ מתוח, הוא עוצר כאשר הוא מכווץ ביותר.
26:08-26:26	סיכום נקודתי על קפיץ- מהירות התחלתית 0 מאיץ, המהירות הגבוהה ביותר היא כאשר הוא מתוח ביותר, ואז המהירות יורדת עד שהיא מגיעה ל 0 כשאר הוא מכווץ ביותר. ובמכניקה קוונטית- בקצוות תהיה אמפליטודה גדולה יותר (מלווה בציור)
26:33-27:42	מכניקה קוונטית אנלוגיה לקפיץ. ציור של המצב המעורר של אוסילטור הרמוני, אמפליטודה גדולה יותר בקצוות.. האנלוגיה למכניקה הקוונטית טובה יותר ככל שנמצאים באנרגיה גדולה יותר.
28:33-30:05	חזרה על הסבר הקפיץ- הוא מסביר יותר טוב את העובדה שכאשר מותחים את הקפיץ עולים באנרגיה הפוטנציאלית, ז"א מתחילים במקום גבוה יותר על הפרבולה(בניגוד לקפיץ רפוי שהאנרגיה הפוטנציאלית שלו היא 0) כאשר מאיצים, מחליפים אנרגיה פוטנציאלית עם קינטית. בתחתית הבור אין בכלל אנרגיה פוטנציאלית.
30:05-30:23	$1/2kx^2 = 1/2 mv^2$ מכניקה קלאסית הסבר מצוין. הכיווץ הוא אותו דבר כמו המתיחה רק לכיוון ההפוך
31:32-31:53	אורך גל דברולי תאור כללי. דברולי הוא הראשון שנותן קשר בין המסה והמהירות של חלקיק לאורך הגל שלו.
32:56-33:26	מה זה ספקטרום? מעבר בין רמות קוונטיות באטומים ובמולקולות, ננו חלקיקים
33:39	מערכות קצת יותר מסובכות, מולקולת מימן. מספר החלקיקים- לכל אטום מימן 2 חלקיקים פרוטון ואלקטרון, סה"כ 4 חלקיקים
34:40	ההמילטונין של מולקולת המימן צריך להתייחס לאינטראקציות
35:25-37:01	אנרגיה קינטית של שני האלקטרונים ואנרגיה קינטית של הפרוטונים. $H = T_N + T_e$ האיבר הראשון מכיל רק את הקורדינטות הגרעיניות.
37:15-37:37	אנטרקציות בין פרוטון לאלקטרון אנרגיה V_{ep}
37:43-37:48	V_{ep} כולל את כל האינטראקציות בין הפרוטונים לאלקטרונים

זמן	תוכן
38:15-38:28	אינטראקציות של דחיה Vpp דחיה בין פרוטונים Veeד חיה בין האלקטרונים
38:49-39:20	בעיה מורכבת, אין לה פתרון אנליטי. צריך לעשות קירובים, צריך להזניח דברים.
39:55-41:00	כדי להזניח צריך לחשוב על סקלות הזמנים, על מהירויות מי זז יותר מהר יחסית למה. האלקטרונים זזים יותר מהר. ניתן לקבוע מרחק (בין הגרעינים) ועל פי זה לחשב את הבעיה כבעיה אלקטרונית. He = Te +Vpp +Vee + Vpe בעיה אלקטרונית הרבה יותר קלה לפתרון
41:18-41:32	r הוא פרמטר למשל באינטראקציה בין הגרעינים
41:32-42:48	שאלה מהקהל- האם ניתן לצמצם את כוחות המשיכה והדחייה כשנוצר כבר קשר? לא! הכח שווה אותה אנרגיה קולומבית רק הסימן שונה. הבעיה שצריך לפתור היא אלקטרונית בלבד. מספר המימדים- n חלקיקים 3*n - 6 דרגות חופש
43:26-43:32	כאשר מורידים מהבעיה 2 חלקיקים הבעיה מאוד קטנה, הורדנו 2 פרוטונים.
43:49-44:14	האם נפטרנו לגמרי מבעיה הגרעינית? לא, אבל השתמשנו בו כקבוע. יחסית לאלקטרונים הוא סקלר לא משתנה.
44:27-44:35	פתרון של הבעיה האלקטרונית
44:35-44:54	הערה- האם הפתרון מתייחס רק למולקולות או גם לזוג אטומי מימן בודדים? תשובה- רק למולקולה
45:11-45:41	ההמילטונין תלוי רק בקורדינטות האלקטרוניות. R הוא מספר R = 100Åלמשל
45:48-46:18	בדוגמא המרחק בין שני הגרעינים הוא קבוע וגודלו 100Å . הפתרון של המשוואה יהיה רמות מותרות, רמות מקוונטיות.
46:41-46:59	כל מקום שיש תלות בגרעינים, במקום משתנה כותבים מספר.
47:48	הקשר בין הדחייה שבין הפרוטונים לבין המרחק
49:00	המרחק הוא לא הפוטנציאל אבל מציבים אותו ומקבלים אנרגיה במספר.
50:25	ניתן לפתור את משוואת שרדינגר כמו בחלקיק בקופסא. הפוטנציאל 1/ R פתרון הבעיה נותן אנרגיות שמתאימות למצב האלקטרוני.
51:15-52:04 הסבר מאוד יפה וברור	$H_e\psi_e = E_e\ \psi_e$ המלטונין אלקטרוני ז"א מפעילים אותו על הפונקציה האלקטרוני, ומקבלים את האנרגיות. כמה אנרגיות יש? ∞ ממצב היסוד ועד ∞ האנרגיה היא לא מספר אלא תלויה ב r בכל R נקבל מספר שונה. בכל מרחק בין אטומי מימן, יתקבלו קבוצות אנרגיות שונות.
52:04-53:03	אם עוקבים אחרי מצב היסוד במרחקים שונים מקבלים בור פוטנציאל. מצב שני- מצב שני מעורר, מתקבלת עקומה אחרת של מצב מעורר אלקטרוני.
53:10-53:35	חזרה תמציתית
54:00-54:22	האנרגיה שמתקבלת היא אנרגיה אלקטרונית, ולא הגרעינים שאותם הפכנו לקבוע.כשהם קרובים יש אינטראקציה, כשהם קרובים מדי יש כמו קיר, וכשהם רחוקים אין אינטראקציה
54:26-55:06	מה קורה לתנועה האיטית של הגרעינים?
55:06-55:14	כל המלטונין של אלקטרונים נותן אנרגיה כפונקציה של המרחק.
55:28	מה קבלנו? אנרגיה שתלויה בגרעינים ומשטח פוטנציאל שתלוי במרחק בין הגרעינים. קרוב ל 0 זה נראה כמו אוסילטור הרמוני

זמן	תוכן
	(תחתית הבור). הבעיה הגרעינית תתן אם נפתור אותה רמות אנרגיה של הגרעינים ככל שזה יותר קרוב לאוסילטור הרמוני, הקירוב יעבוד יותר טוב. האנרגיה האלקטרונית מגדירה את הפוטנציאל שהגרעינים מרגישים. גרעינים זזים לאט, והאלקטרונים מסתדרים במהירות בכל מצב.
57:23	התקבלו רמות הויברציה של מולקולת מימן במצב האלקטרוני היסודי.
57:59-58:15	קירוב נוסף- קשר כימי תמיד מקבל פוטנציאל שקרוב בתחתיתו לאוסילטור הרמוני.
58:22-58:55	ניתן למצוא את האנרגיה למצב היסוד- בקירוב.
59:15-1:00:12	ניתן לדעת מה אורך הקשר, ניתן לעורר את המולקולה לויברציה יותר גבוהה ולחשב.
1:00:12-1:00:25	סיכומון מהיר פתרון של מולקולת המימן במצב היסודי וויברציות שונות
1:00:33-1:01:00 1:02:43	פונקצית הגל- תלויה רק ב R $\psi_{p(r)}$ ונראית כמו גאוסיאן. פונקצית הגל הכללית $\psi = \psi_p(R) * \psi_e(R,r)$ הפונקציה הכללית מורכבת מפונקציה שתלויה רק במרחק בין הגרעינים, ומתארת מהי ההסתברות למצוא 2 גרעינים במרחק מסוים. ופונקציה שתלויה גם בקורדי נטה של כל אלקטרון, מיקום של כל אלקטרון, פונקציה זו תלויה גם ב R אבל פרמטרית לכל R
1:03:07-1:03:43	מה קבלנו? פתרון למצב ויברציוני ואלקטרוני הכי נמוך, למולקולה הכי פשוט, מימן.
1:03:43-1:04:02	אלקטרונים בונים את הבור,והקירוב לאוסילטור הרמוני בנה את הרמות הויברציוניות. רמות ויברציוניות נמצאות רק כשיש בור. ברמה השניה של המימן אין בור היא לגמרי דוחה.
1:04:14-1:04:45	ברמה השניה אין מצב קשור, אין מצב שבו הגרעינים אחד ליד השני.
1:05:06	אם יהיו אלקטרונים ברמה השניה המולקולה לא תהיה קשורה.
1:05:38-1:05:49	אם הצלחנו לעורר אלקטרונים להיות במצב השני, המולקולה מיד תתפרק, הפרוטונים יברחו, הקשר הכימי ישבר.