

קורס ספקטרוסקופיה, תשע"ג

פרופ' רון נעמן

מיפוי תכנים של הרצאה 4

המיפוי נעשה על ידי מירב דינור בהנחיית פרופ' רון בלונדר

תוכן	זמן
חזרה סיכומית על השיעור הקודם. קירוב בורן אופנהיימר. מולקולה פשוטה- מימן 2 פרוטונים 2 אלקטרונים. משוואה שמגדירה את התנהגות המערכת. אם היה רק אטום מימן אחד, המשוואה היתה כוללת אנרגיה קינטית של הפרוטון אנרגיה קינטית של האלקטרון וכוח משיכה מדוע אלקטרון לא נופל לגרעין? כיון שהוא מסתובב במסלולים.	0:39-1:47
מה הבעיה במודל? מה עושה מטען חשמלי מסתובב? סימכרוטרון- מאיץ חלקיקים במסלול מעגלי, משמש לבדיקת חלבונים. הקשר הוא שמטען חשמלי מסתובב פולט קרינה. זה יור בעיות למודל בור, כיון שתוך כדי הסיבוב נפלטת קרינה, האלקטרון מאבד אנרגיה, המסלולים היו צריכים להצטמצם ובסוף האלקטרון היה נופל על הגרעין.	1:47-3:31
מודל בור איננו נכון, הוא לא קלאסי, אין מסלול הוא לא באמת מסתובב הוא גל! רק במצבי עירור גבוהים האנלוגיה הזאת נכונה, במצב היסוד האלקטרון לא מסתובב.	3:50-4:33
מה קורה כשלוקחים מולקולה עם שני מימנים? כאשר המרחק הוא אינסופי- אין שום אינטראקציה. מה קורה כשמתחילים לקרב אותם? המלטונין מלא כולל את כל דרגות החופש. המטרה היא לפתור את המשוואה הבאה: $H \psi(X) = E * \psi(x)$ שנותנת את כל האנרגיות המותרות, ומה פונקצית הגל שנותנת את ההסתברות למצוא חלקיק במרחק מסוים מהגרעין. המלטונין- אופרטור שנותן את האנרגיה כסקלר.	5:10-6:38
(בעיה מהקהל) יש מצבים של המלטונין תלוי בזמן. פותרים את משוואת שרדינגר תלויה בזמן. מתקבל המלטונין שאינו תלוי בזמן כולל אקספוננט תלוי בזמן שהוא בעצם פאזה.	8:15
פאזה- מספר קומפלקסי שמכפיל את פונקצית הגל, יש לו חשיבות כאשר יש התנגשות בין גלים. ההסתברות למצוא חלקיק כפונקציה של הזמן- צריך לחשב את הריבוע.	11:07
האפ הפאזה משנה את ההסתברות למצוא חלקיק בנקודה מסוימת? בחישוב מתמטי ניתן לראות שהפאזה לא משפיעה על ההסתברות	12:36
ז"א המלטונין שתלוי בזמן לא תלוי בזמן.	13:31
מתי יש משמעות לתלות בזמן? מצב סטציונרי- מצב עצמי של המערכת. מי אמר שהמערכת חייבת להיות במצב היסוד?	13:57-14:33
איך לקבל תלות בזמן? אם נמצאים במצב עצמי הסתברות למצוא חלקיק אלקטרון או פרוטון אינה תלויה בזמן. אבל לא חובה שנהיה במצב הראשון ניתן להיות גם במצבים אחרים, ואפשר להיות במצב של קומבינציה של שניהם. $\psi_1 + \psi_2$ - עבור חלקיק 1 יש 50% הסתברות למצוא את החלקיק ברמה 1 ו 50% הסתברות למצוא את החלקיק ברמה 2. לא ידוע איפה החלקיק.	15:15-16:36
שאלה מהקהל- מדוע שתהיה הסתברות באטום מימן רגיל למצוא אלקטרון ברמה 2? תשובה- מהות הספקטרוסקופיה היא ללמוד על רמות האנרגיה. הדרך הכי טובה לעשות את זה, לתת אנרגיה למערכת, האנרגיה חייבת להגיע לאן שהוא	16:36-18:36

תוכן	זמן
והיא גורמת לעירור. או לשינוי בדרגות חופש אחרות- אלקטרוניות או ויברציוניות.	
הוספת אנרגיה זו תלויה בזמן. אם לא נתתי אנרגיה מספיק זמן, לא עוררתי את כל האלקטרונים, וההסתברות שהאלקטרונים עברו רמה הוא 50% / 50%, בניסוי בודד לא רואים קווים באמצע, תמיד קווים בודדים מתאימים לרמות, אין קוי ביניים	18:36-19:26
מהערבוב בין המצבים הסטציונרים מקבלים מצב שהוא לא סטציונרי, הוא תלוי בזמן. למרות שההמילטונין לא תלוי בזמן.	19:26-20:12
כדי לקבל הסתברות תלויה בזמן יש שתי אפשרויות: 1. המלטונין תלוי בזמן. 2. לערבב מצבים סטציונרים	20:45-21:35
(הסבר חוזר) מה זאת תנועה? תנועה- מושג קלאסי, כדי להגיע מקוונטי לקלאסי צריך להיות: או במצב גבוה מאוד או לקחת הרבה מצבים ולערבב אותם, וכך ההתנהגות היא כמו חלקיק- תנועה קלאסית. מקבלים מסלול של חלקיק שבו ניתן לדעת מיקום ותנע.	23:05-24:27
	25:33
פתרון ל 4 חלקיקים 2 פרוטונים ו 21 אלקטרונים	
אלקטרון יכול לזוז בשלושה מימדים- 3 נגזרות חלקיות כיון שיש 2 אלקטרונים, האיבר מופיע פעמיים אבל האינדקס שונה.	27:03-27:27
אנרגיה קינטית של האלקטרונים- נגזרות חלקיות לפי קורדינטה של e 1 ונגזרת חלקיק לפי קורדינטה של e 2	27:47-28:00
שאלה מהקהל לגבי מיקומם של הנויטרונים במשוואת שרדינגר. הנויטרונים יבואו לידי ביטוי במסת הגרעין. כאשר מדברים על האינטרקה המטען הוא חשוב וכאשר מדברים על אנרגיה קינטית המסה היא שחשובה.	29:39-30:46
שאלה- האם האלקטרונים שלא משתתפים באינטראקציה נלקחים בחשבון? כן!	33:12-33:31
במערכת עם המון אלקטרונים האלקטרונים שנמצאים עמוק בליבה כד"ר F מתייחסים אליהם כמו אל אטום המימן (עושים קירוב), ורק לאלקטרונים שמשותתפים בקשרים עושים חישוב מיוחד.	33:31-34:01
שאלה – מדוע מחסרים את האנרגיה הקינטית?	35:05
תשובה- האופרטור של האנרגיה הקינטית מוגדר - \hbar^2	35:24
מה הכח שפועל בין שני חלקיקים טעונים? $\frac{1}{4} \epsilon_0 q_1 q_2 / r^2$	36:09-37:00
שאלה- מדוע פוטנציאל זה r ולא r^2 ? באוסילטור הרמוני- חוק הוק kx^2 =אנרגיה פוטנציאלית של קפיץ נגזרת שניה של פוטנציאל = כח	37:36-38:23
המשך פתרון משוואת שרדינגר, אנרגיה פוטנציאלית שאפשר לחשב, מטענים של פרוטונים ואלקטרונים שווים. אטום ממך הוא ניטרלי המטענים שווים, הפוכים בסימן ושווים בגודל.	38:32-39:42
האלקטרון הראשון איזה כוחות הוא מרגיש? נשיכה של הגרעין.	40:30
האלקטרון השני מרגיש משיכה לאותו פרוטון הפוטנציאל תלוי במרחק בין האלקטרון לאותו הגרעין.	41:17-41:40
המרחק כולל דחייה? המרחק זה מספר, הוא לא מושפע כיון שהוא מספר	42:06-42:24
יש משיכה ויש דחייה בין הפרוטונים לאלקטרונים, הסימן הוא -	43:25-43:39
במה תלוי הכח? מרחק בין האלקטרונים, מרחק בין הגרעינים.	44:05-45:08
מה עוד חסר במשוואת שרדינגר	
חזרה, פתרון של מלקולת המימן. זו בעיה שקשה מדי לפתור וחייבים לעשות קירובים	53:51-54:15

תוכן	זמן
קירוב בורן אופנהיימר	54:15-54:41
מהות הקירוב, אנחנו יודעים לפתור המלטונין של חלקיק בתיבה דו מימדי, פותרים בנפרד ל – ול y בבעיה הזו יש דרגות חופש של אלקטרונים ויש דרגות חופש של גרעינים	55:11-55:50
. היחס בין המסות- הפרוטונים כבדים פי 3 סדרי גודל האלקטרונים זזים יותר מהר. הקירוב שעשו- קיבוע הפרוטונים במרחק מסוים, כך שיחסית לאלקטרונים הפרוטונים לא זזים.	55:50-56:27
ההנחה שהפרוטונים נעים לאט יותר, נכונה כיון שהם והאלקטרונים מקבלים את אותה אנרגיה.	56:27-56:46
משמעות הקירוב- אברים במשוואת שרדינגר מתחילים לרדת, את האנרגיה הקינטית של הפרוטון ניתן להוריד. דחיה בין האלקטרונים- נשארת כיון שהיא לא תלויה בגרעינים משיכה בין פרוטונים לאלקטרונים- נשארת אבל במקום R (מרחק בין הגרעינים) משתנה הוא הופך למספר.	56:43-58:46
משיכה של אלקטרונים ופרוטונים היה תלוי גם במיקום האלקטרונים וגם בפרוטון. כיון שהגרעינים קבועים נשארו רק קורדינטות של אלקטרונים גם לגבי האלקטרון השני אותו הדבר.	59:0-159:31
בכל מקום שיש תלות בקורדינטה של גרעינים שמים מספר.. המרחק בין האלקטרונים לגרעין עדיין משתנה אבל במקום להיות תלוי בשני המשתנים הוא תלוי במשתנה אחד בלבד	59:31-1:00:22
מרחק בין אלקטרון לגרעין. תלת מימדי- וקטור לגרעין, וקטור לאלקטרון, והמרחק הוא הוקטור בניהם.	1:01:43-1:01:51
אנחנו מחפשים את המרחק בין הגרעין לאלקטרון והוא תלוי רק באלקטרון.	1:05:30-1:10:49
איבר נוסף במשוואה- אלקטרון שני לבין הגרעין השמאלי. מרחקיפ בין האלקטרונים לבין הגרעין הימני.	1:05:49-1:06:32
איבר נוסף- r_{12} מרחק בין שני האלקטרונים לא תלוי בכלל בגרעינים ולכן נשאר אותו הדבר.	1:06:50-1:07:05
מה התקבל? חצי מדרגות החופש ירדו, הבעיה יותר פשוטה.	1:07:38-1:07:53
מה שנשאר במשוואה הן דרגות חופש אלקטרוניות	1:09:29-1:31
המלטונין מלא- היה תלוי בקורדינטות של האלקטרונים וב 6 קורדינטות של הגרעין.	1:10:18-1:11:34
סיימנו עם ההמלטונין שכולל רק דרגות חופש של האלקטרונים ותלוי פרמטרית במיקום הגרעינים.	1:11:34-1:11:51
והמחיר? במקום לפתור משוואה אחת צריך לפתור ∞ משוואות, לכל מרחק נתון.	1:12:09-1:12:52
פתרון-מחפשים פונקציה גל ואנרגיות שפותרות את המשוואה. מחפשים פונקציה גל תלויה פרמטרית במיקום הגרעינים, ותלויה בקורדינטות אלקטרוניות. האנרגיה גם תלויה במקום הפרוטונים לכל מרחק נתון יש משוואת שרדינגר משלה עם פתרונות משלה ואנרגיות משלה.	1:12:51-1:14:18
אנרגית יסוד של אטום מימן הוא $1s$ פתרון של משוואת שרדינגר עבור שני גרעינים במרחק ∞ היא כמו שני אטומי מימן נפרדים. האנרגיה מוגדרת 0	1:16:05-1:17:03
מתחילים להקטין את המרחק בין הגרעינים, מתקבלת אנרגיה שונה. כאשר שני אטומי המימן מתקרבים האנרגיה יורדת, יש אינטראקציה, הם לא מתקרבים עד הסוף	1:18:52-1:19:29
בור האנרגיה מתקבל מפתרון של הבעיה האלקטרונית שתלויה פרמטרית בגרעינים	1:19:29-1:19:43
מדוע האנרגיה נמוכה כשהגרעינים מתקרבים? כל אטום הוא נייטרלי, כשהם מתקרבים כל אטום גורם לשני להפרדת מטענים, במקום שההסתברות תהיה	1:22:36

תוכן	זמן
אחידה, היא לא.	
נוצר יפול מושרה, הדיפולים מושכים אחד שני השני. (יכולים גם לדחות)	1:23:22-1:23:56
משיכה- אנרגיה פוטנציאלית יותר נמוכה	1:24:00
אנרגיה פוטנציאלית יורדת כפונקציה של המרחק בניהם, כאשר שני דיפולים מסודרים בצורה כזאת שהם מושכים אחד את השני.	1:24:40-1:24:56
זה מצב יסוד למולקולת המימן, לא פתרון יחיד, זה הפתרון הכי נמוך, יש אינסוף פתרונות.	1:25:09-1:25:25
כאשר נקבע מרחק, כמה פתרונות יש למשוואת שרדינגר? בכל מרחק יש למשוואה אינסוף פתרונות יש מצב יסוד ויש מצב מעורר, והעירור הוא לפי דרגות החופש האלקטרוניות.	1:25:55-1:26:24
חזרה- כרגע אנחנו פותרים משוואת שרדינגר אלקטרונית, וגם בה יש אינסוף פתרונות אפשריים.	1:26:24-1:26:56
שאלה מהקהל- לגבי נכונות בור הפוטנציאל כפי שמלמדים את התלמידים.	1:26:56-1:27:54
בור הפוטנציאל נכון עבור מצב היסוד האלקטרוני, אבל הוא ממש לא המצב היחיד שיש.. לבעיה האלקטרונית יש הרבה פתרונות s,p,d	1:24:54-1:28:22
ספקטרוסקופה, עירויים של דרגות חופש, אחד העירורים הוא של אלקטרונים. אפשר לעשות ספקטרוסקופיה על ויברציות ובלי לגעת בכלל בדרגות החופש האלקטרוניות, תלוי כמה אנרגיה נספק מהשדה.	1:28:54-1:29:34
מדוע כשהם קרובים מאוד האנרגיה גבוהה? כיון שהם אינם יכולים לחזור זה אל זה- חוק קולון.	1:30:00-1:30:10
חוזרים להמילטונין, לפוטנציאל הפוטנציאל בין שני גרעינים- אם המרחק שואף ל 0 האיבר שואף ל ∞	1:30:36-1:30:56
חזרה לחלקיק בתיבה גם שם יש פונקציות שונות	1:32:53-1:33:32
פתרונות שונים לאותה מערכת- אותה משוואה ואותו המילטונין, אבל באנרגיה גבוהה יותר, כמו להציב בחלקיק בתיבה n גדול יותר. העקומה התחתונה היא מצב אלקטרוני יסודי, וכל השאר הם מצב אלקטרוני מעורר.	1:33:32-1:33:49
זהו הפוטנציאל שהגרעינים מרגישים- חצי בעיה. קרוב לתחתית זה דומה לאוסילטור הרמוני. כדי לקבל פתרון מלא צריך להחזיר את האנרגיה הקינטית של הגרעינים. מכל ההמילטונין נשאר אנרגיה שתלויה במרחק בין הגרעינים $H_p = E_e(R)$	1:33:59-1:36:27
צריך להוסיף את האנרגיה הקינטית של הגרעינים $H_p = T_p + E_e(R)$ סה"כ בהמילטונין הזה לכל פרוטון יש 3 דרגות חופש. זו 6 דרגות חופש של פרוטונים ביחד.	1:36:34-1:37:11
בהתחלה הזנחנו את האנרגיה הקינטית של הגרעינים ופתרנו את המשוואה כבעיה של האלקטרונים, וכעת מוסיפים חזרה לפתרון שכבר מצאנו ופותרים עבור הגרעינים.	1:37:11-1:37:39
שאלה על כל הדרך, מדוע כעת מתייחסים גם לרכיב של הפרוטונים וגם לרכיב של האלקטרונים? ומדוע הרכיב של האלקטרונים מוגבל ברמה? תשובה- הפרדת משתנים, מחלקים את ההמילטונין פונקציה הגל תהיה שווה למכפלה.	1:38:07-1:39:43
חזרה- התחלת הבעיה כל דרגות החופש, משוואת שרדינגר כזאת קשה לפתרון. כאשר מקבעים את הפרוטונים, ניתן לפתור את הבעיה ולמצוא אנרגיה. האנרגיה אינה תלויה בקורדינטות אלקטרוניות. היא מספר.	1:40:32-1:41:22
הסיבה שחוזרים לבעיה הגרעינית, היא כדי לקבל קוונטות בתוך הבור. הרמות בתוך הבור זה מספר קוונטי של תנועה גרעינית וברציות. וברציות- תנועת הגרעינים	1:44:43-1:45:20
מבעיה מסובכת התקבלה בעיה פשוטה, שברמות נמוכות דומה לאוסילטור	1:46:30-1:47:51

תוכן	זמן
<p>הרמוני. צריך למצוא את פונקציות הגל המתאימות $H_p * \psi p = E * \psi p$ המרחק בין הרמות הויברציוניות שווה. הקשר האפייני H-H הוא במינימום של הפוטנציאל. פונקצית הגל נראית סימטרית</p>	
<p>דבר ראשון מחשבים באיזה מצב אלקטרוני נמצאים, נוסף לכל רמה יש גם מספר קוונטי של הויברציות.</p>	1:48:00-1:49:17
<p>אנרגית קשר- כמה אנרגיה צריך להשקיע כדי לשבור את הקשרים. הדגמה על הלוח. קפיצה בתוך הבור- עירור ויברציוני.. קפיצה של אנרגיה עד לקו ה 0 תגרום לשבירת הקשר.</p>	1:49:26-1:50:04
<p>כל מה שבתוך הבור יכול להיות מעורר, אבל מי שמעל הבור מתפרק.</p>	1:50:04-1:50:24
<p>חזרה- סיכום באוסילטור הרמוני התדירות אותו הדבר, ההפרשים שווים, מה שיהיה שונה זה הסיכוי למצוא אטומים במצבים מסויימים</p>	1:52:00-1:52:52
<p>נשארו ספינים, דרגות החופש של ספין. התייחסנו לויברציות, ולא התייחסנו לרוטציות באמת מולקולת מימן אינה קפיץ חד מימדי אלא היא יכולה גם להסתובב.</p>	1:52:52-1:53:46
<p>רוטציה מוסיפה עוד מספר קוונטי</p>	1:53:49-1:54:30
<p>דרכים לטפל ברוטציה.</p>	1:55:24