

19.4.12 lecture PCIII

Chemische Bindung und Molekulare Spektroskopie (Lehramt)

Subjects:

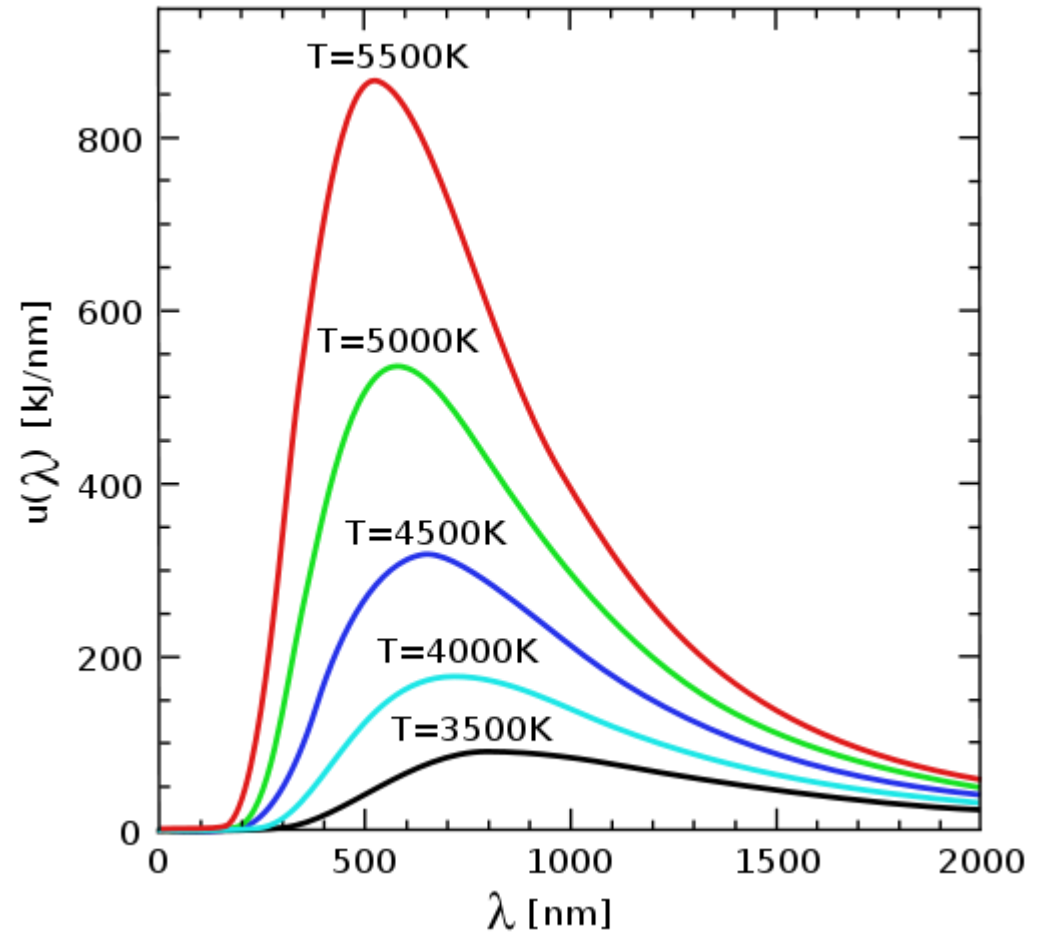
- black body radiation
- quantization of energy
- photoelectric effect
- hydrogen atom energy states
- wave-particle duality
- uncertainty principle

Radiation of heated bodies (Black body radiation)



A huge plume of molten rock that is linked to volcanic eruptions has been detected below southern Africa.

B.Israel, OurAmazingPlanet Staff Writer / June 21, 2010



The more heated material, the more intense radiation

Black body radiation- quantization of energy

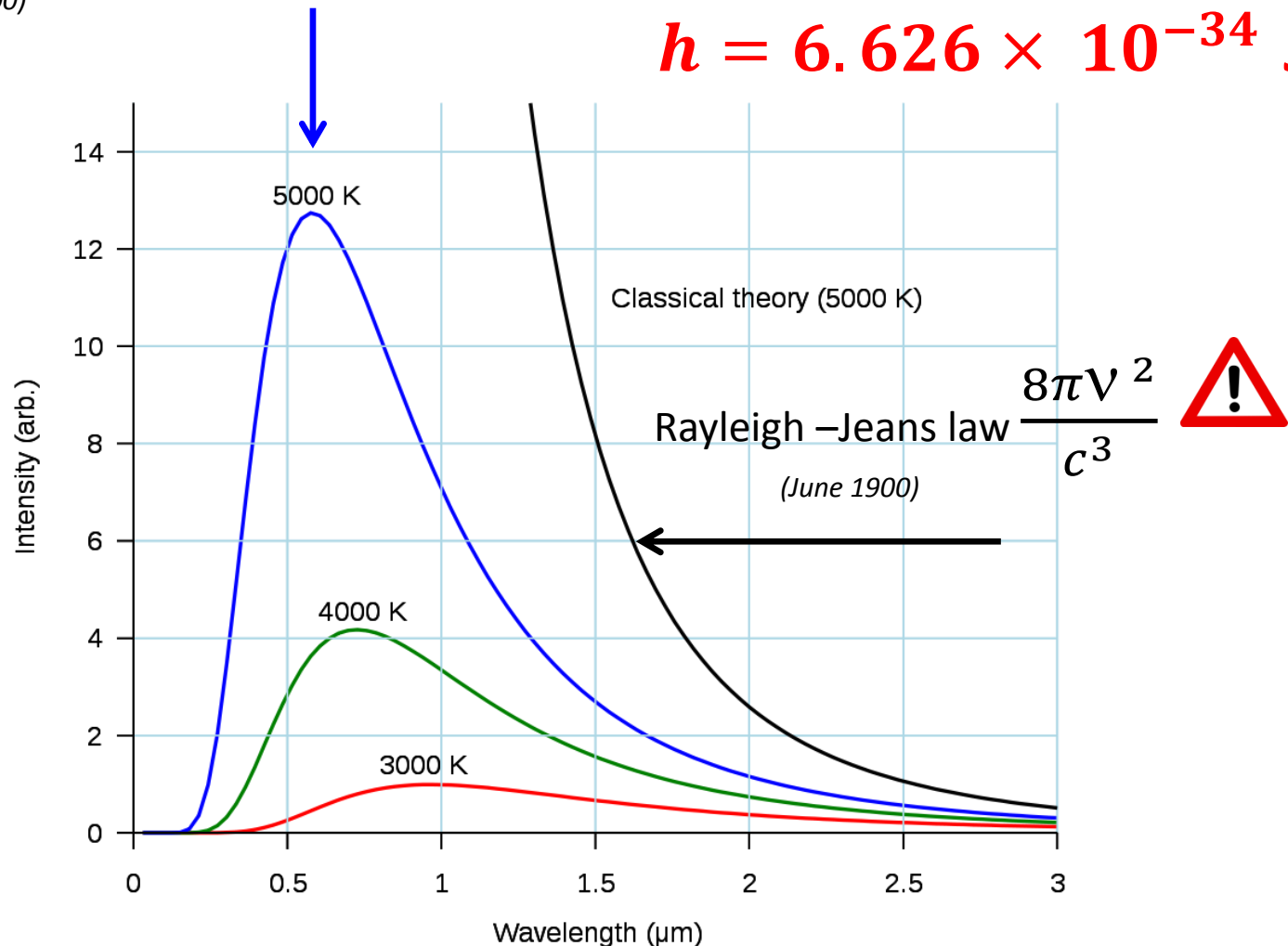
Planck law $\frac{8\pi V^2}{c^3} \frac{h\nu}{(e^{h\nu/kBT}) - 1}$

(October-december 1900)

Planck equation

$E \propto n\nu, E = nh\nu$

$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$



Energy is quantized

- Quantization of energy and light :Photoelectric effect
(A. Einstein 1905)
- *Interpretation of energy levels in Hydrogen atom*
(N. Bohr 1913)

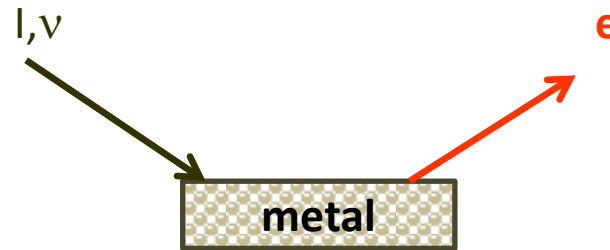
microscopic vs. macroscopic world and the necessity to a new formalism

- *Wave-Particle duality (L. de Broglie 1923)*
- *Uncertainty rule (W. Heisenberg 1927)*

Quantum mechanics formalism is born!

E. Schrödinger , W. Heisenberg, M. Born, P. Jordan (1925-1927)

photoelectric effect : light in packets of $h\nu$



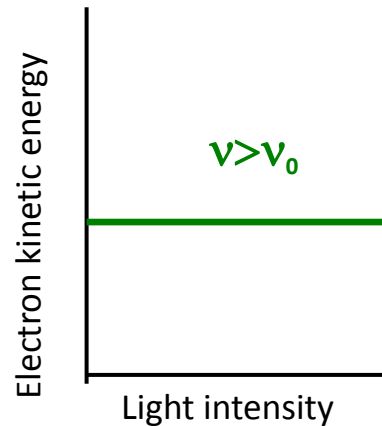
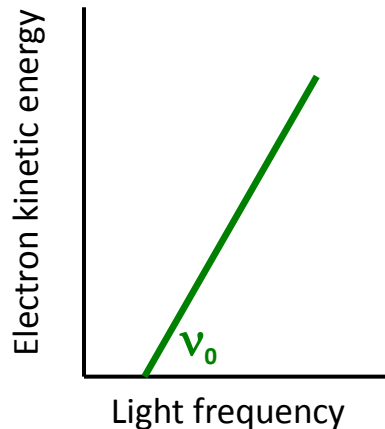
$$h\nu = E_{kin} + \Phi$$

Φ : work function

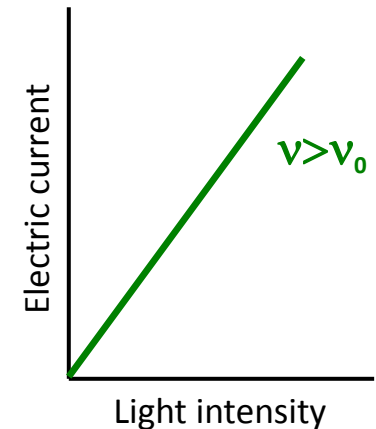
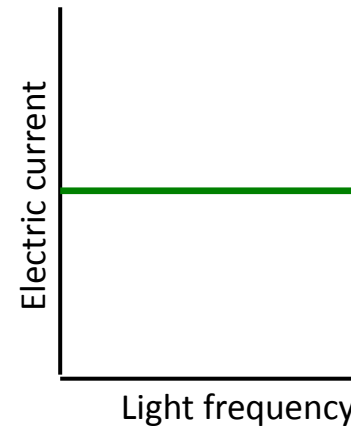
$$E_{photon} = h\nu$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2$$

(a)



(b)



(a) Above a certain threshold ($\Phi = h\nu_0$) electron is emitted. The kinetic energy of electron increases linearly with frequency and it is independent of the light intensity.

(b) The number of electrons emitted per second (i.e. the electric current) is independent of frequency and increases linearly with the light intensity.

Bohr and Hydrogen atom

Emission lines as finger prints or elemental barcodes: light is emitted at discrete frequencies

Picture is adapted from www.nasa.gov

Hydrogen



Helium



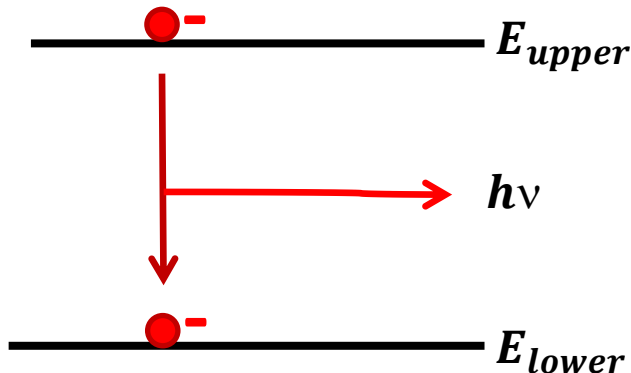
Carbon



empirically derived formula by J.Rydberg -1880

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{f^2} - \frac{1}{i^2} \right), i, f > 0$$
$$R_H = 109677.581 \text{ cm}^{-1}$$

Bohr approach : quantized energy levels- 1913



$$E_{upper} - E_{lower} = \Delta E = h\nu$$

ν : emission /absorbption frequency



Wave-Particle duality of matter

Einstein :

$$\begin{array}{l} E_{\text{photon}} = h\nu \\ E_{\text{photon}} = mc^2 \end{array} \Rightarrow h\nu = mc^2, \nu = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \lambda_{\text{photon}} = \frac{h}{mc}$$

* Rest mass of a photon = 0 but relativistic mass of a photon $\neq 0$

In a similar way, de Broglie suggested for a particle of mass m :

$$\lambda = \frac{h}{mv}, p = mv = \text{linear momentum}$$

Example :

-an electron travelling at $1.0 \times 10^6 \text{ m/s} = 7.0 \times 10^{-10} \text{ \AA} = 7 \text{ \AA}$

- a particle with a mass 1.0 g travelling at $1.0 \text{ cm/s} = 7.0 \times 10^{-27} \text{ cm}$

Linear momentum is quantized, as well.

Quantum effects can not be considered for macroscopic objects and vice versa.

uncertainty principle



Zeitschrift für Physik September (1925) pp.879-893
Über quantentheoretische Umdeutung
kinematischer und mechanischer Beziehungen.

879

Von W. Heisenberg in Göttingen.
(Eingegangen am 29. Juli 1925.)

In der Arbeit soll versucht werden, Grundlagen zu gewinnen für eine quantentheoretische Mechanik, die ausschließlich auf Beziehungen zwischen prinzipiell beobachtbaren Größen basiert ist.

Bekanntlich läßt sich gegen die formalen Regeln, die allgemein in der Quantentheorie zur Berechnung beobachtbarer Größen (z. B. der Energie im Wasserstoffatom) benutzt werden, der schwerwiegende Einwand erheben, daß jene Rechenregeln als wesentlichen Bestandteil Beziehungen enthalten können (wie z. B. Ort, Umlaufzeit des Elektrons), die also jenen Regeln offenbar jedes anschauliche physikalische Fundament mangelt, wenn man nicht immer noch an der Hoffnung festhalten will, daß jene bis jetzt unbeobachtbaren Größen später vielleicht experimentell zugänglich gemacht werden könnten. Diese Hoffnung könnte als berechtigt angesehen werden, wenn die genannten Regeln in sich konsequent und auf einen bestimmten Bereich der Hoffnungen für das Wasserstoffatom und der Starkereffekt dieses Atoms auf sich bezogen wären. Die Erfahrung zeigt aber, daß sich nur die Regeln der Quantentheorie fügen, daß aber schon beim Problem der "gekrenzten Felder" (Wasserstoffatom in elektrischem und magnetischem Feld verschiedener Richtung) fundamentale Schwierigkeiten auftreten, daß die Reaktion der Quantenregeln auf die Behandlung der Atome mit mehreren Elektronen sich als unmöglich erweisen kann, und daß schließlich eine Ausdehnung der Quantenregeln, Es ist üblich geworden, dieses Versagen der quantentheoretischen Regeln, die ia wesentlich durch die Anwendung der klassischen Mechanik

"The whole problem with the world is that fools and fanatics are always so certain of themselves, and wiser people so full of doubts." - Bertrand Russell (1872 - 1970)

Measuring the exact location of a particle in a small area of space is together with an uncertainty in its momentum and conversely. It means that one can't measure (x,p) simultaneously in a precise way. In other words *one measuring effects the other!*

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi} \quad \text{or} \quad \Delta x \cdot m\Delta v_x \geq \frac{h}{4\pi}$$

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

Example :

The minimum uncertainty on the position of (a) an electron in H atom and (b) a virus which move at speed of $1.0 \mu\text{m}/\text{s}$ is calculated as follows:

Take $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $m_{\text{virus}} = 1.00 \times 10^{-15} \text{ kg}$

$$\Delta x \geq \frac{h}{4\pi m \Delta v}$$

$$(a) \Delta x_e = \frac{6.62 \times 10^{-34} \text{ j.s}}{4\pi \times 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 1 \times 10^{-6} \text{ m/s}} = 58 \text{ m} \quad \text{far larger than the size of atom } (\approx 100 \text{ pm})$$

$$(b) \Delta x_{\text{virus}} = \frac{6.62 \times 10^{-34} \text{ j.s}}{4\pi \times 1.00 \times 10^{-15} \text{ kg} \times 1 \times 10^{-6} \text{ m/s}} = 5.3 \times 10^{-14} \text{ m}$$