

# FORELESNINGSNOTATER TIL BIT 370 INNFORING I KVANTEMEKANIKK

## o FORTALE

Lesebok: Robert Scherrer:  
"Quantum Mechanics in -  
An accessible introduction"  
Pearson / Addison Wesley, 2006  
Fussum: Kapitlene 1-8 samt 15 (i utgangsproblemene)

Kvantemechanikken kan ikke "utledes",  
Det måtte innføres nye matematiske metoder  
for å lage en teori som kunne forklare eksperimen-  
telle resultater, og foreslå nye.

Av samme grunn: Innføring i kvantemechanikk  
blir en "historiefortelling".

Viktig matematikk:

- Komplekse tall
- Lineær algebra
- inkl. matriseregning

Samt, praktisk sett:

"Calculus"

Det matematiske grunnlaget er samla i  
kapitlene 2, 5 og 7.  
Vektlegginga av gjennomgåelsen av dem bestemmes  
av behovet!

Mye av stoffet vil være kjent fra kurset i  
"mikrofysikk", men overflødig.

Derfor, litt overlapping og repetisjon av kjente ting.  
Framstillinga av stoffet griper litt inn i fussum  
i BIT 350 Statistisk fysikk (og omvendt!).  
enkeltle detaljuttledninger blir derfor gjort der.

Og psst: Vi forutsetter overalt SI-enheter.

# KAPITTEL 1: KVANTEMEKANIKENS OPPRINDELSE

## 1.1 Samledning

Rundt år 1900: Fysikk = "klassisk fysikk"

- mekanisk
- Elektrisitet og magnetisme
- Termodynamikk

En revolusjon måtte til for å forklare resultatene i strid med forutsettelsen for klassisk fysikk.

Forskjell i forutsetninger:

	Klassisk	Moderne
1	Universets utvikling er deterministisk	Men nei, ikke på subatomært nivå! Teorien gir sannsynligheter, usikkerhet og fundamentale ingredienser.
2	Lys = bølger; "veldig" materie = partikler	Lys og materie har begge to egenskaper som tilhører den andre ("materiens bølgenatur")
3	Fysiske størrelser beskrives ved kontinuerlige variable	Visse fysiske størrelser er kvantisert, de kan bare ha diskrete verdier
4	En fysisk virkelighet eksisterer, uavhengig av observatør	Observatøren påvirker alltid utfallet av et eksperiment

Den nye selvsamme teoriene og ideene ble innført fordi den virker.

3 vesen av kapitlet: Noen av eksperimentene som ga opphav til kvantemekanikken.

# 1.2 svart-lege-me-straling

Losningen av et termodynamisk problem ga det første steg til utviklingen av kvantemekanikken. Egenkapene til svart-lege-me-straling, utsendelse av straling fra et objekts indre energi.

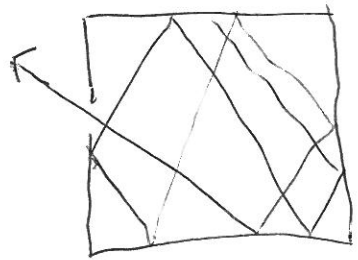
Definisjon:

Et "svart legeme" sender ut straling med samme effektivitet ved alle frekvenser.

Men ved termodynamisk likevekt må et legeme absorbere og avge straling med samme effektivitet ved alle frekvenser.

Eksempel:

Hulrom med lite hull er et "svart legeme". Det er fylt av "svart-lege-me-straling".



Hvorfor:

I dette foretaket beskrivelse, stoffet behandles i detalj i kurset i statistisk fysikk.

J. Stefan, eksperimentelt, 1879:

$$P = \sigma AT^4 \text{ (Stefan-Boltzmanns lov)}$$

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ J/sec} \times \text{m}^2 \times \text{K}^4$$

} P - effekt utsendt fra overflate av et svart legeme (1.1)

$$\rho = \frac{u}{c} \frac{P}{A} = aT^4$$

$$a = 7.56 \times 10^{-16} \text{ J/m}^3 \text{K}^4$$

} Energitettheten til straling i et svart-lege-me-hulrom (1.2)

(Vi kommer tilbake til sammenhengen mellom P og ρ!)

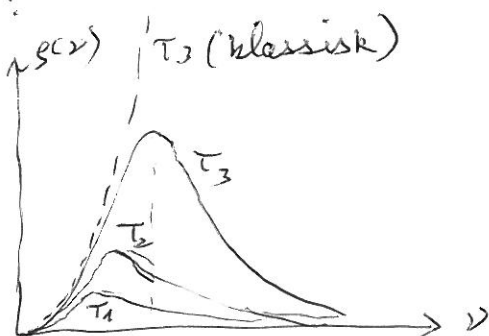
Stralingspektret:

$$\rho(\nu) d\nu - \text{energitetthet med frekvenser mellom } \nu \text{ og } \nu + d\nu$$

Normalisering:

$$\rho = \int_0^{\infty} \rho(\nu) d\nu = a T^4$$

skilt:



Toppunktverdien for  
skaleres lineært med T:

$$\nu_{\text{topp}} \propto T$$

$$(T_1 < T_2 < T_3)$$

$$\lambda_{\text{topp}} = w / T$$

$$w = 2.90 \times 10^{-3} \text{ m K}$$

Wien's forskyningslov

Klassisk teori:

$$\bar{E} = kT \text{ (klassisk oscillator)}$$

$$k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} \text{ (Boltzmanns konstant)}$$

$$n(\nu) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu \text{ (antallet tetthet for k\text{f} \text{ f\text{o}lger)} \quad (1.3)$$

$$\rho(\nu) = n(\nu) \bar{E}$$

$$\Rightarrow \boxed{\rho(\nu) d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \nu^2 d\nu} \text{ Rayleigh-Jeans-formelen} \quad (1.4)$$

Men den virker ikke;  
den gir korrekt resultat  
bare ved lave frekvenser!

ULTRAVIOLETT-  
KATASTROFEN

Max Planck kom med løsningen:

gjør Boltzmann fordelingen

$$P(E) = e^{-E/kT} / kT \quad (1.5)$$

for

$P(E)$  - energitetthetsfordeling  
for partikler med  
energi i intervallet  
(E, E+dE)

som gir

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{\infty} P(E) E dE}{\int_0^{\infty} P(E) dE} = kT \quad (1.6)$$

som for, og forenkling ikke løser problemet.

is tillegg antok Planck at den fundamentale energien bare kan vere et diskret multiplum av en fundamental energi:

$$E = 0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots$$
$$\dim(E) = J \cdot sek$$

Da:

$$\bar{E} = \frac{\sum_{E=0, h\nu, 2h\nu, \dots} EP(E)}{\sum_{E=0, h\nu, 2h\nu, \dots} P(E)}$$
$$= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{nh\nu}{kT} e^{-nh\nu/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{kT} e^{-nh\nu/kT}}$$
$$= \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

(fra summen av geometriske rekker)

Insattning av denne korrigerte verdien i utledninga fra (1.3) til (1.4) gir:

$$g(\nu) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu$$

 Plancks svart-legeme-spektrum (1.7)

Eksempel 1.1

i lav-frekvens-grensen:

$$e^{h\nu/kT} - 1 = 1 + \frac{h\nu}{kT} + \dots - 1$$
$$= \frac{h\nu}{kT}$$

Det gir:

$$g(\nu) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{\frac{h\nu}{kT}} d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu$$

Rayleigh-Jeans-formelen gjenvunnet!

Integrer  $g(\nu)$  over alle frekvenser, ved bruk av integralet

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$$

(f. eks. ved residue-regning)

Dermed fas et uttrykk for  $g$ :

$$\begin{aligned}
 g &= \int_0^{\infty} g(\nu) d\nu \\
 &= \int_0^{\infty} \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu \\
 &= \frac{8\pi (kT)^4}{c^3 h^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad \left( \text{substitusjon } \frac{h\nu}{kT} = x \right)
 \end{aligned}$$

og altså

$$g = aT^4, \quad a = \frac{8}{15} \pi^5 \frac{k^4}{c^3 h^3}$$

Stefan-Boltzmanns  
lov,  
gjenfunnet! (1.8)

Beslem maksimum av  $g(\nu)$  ved  $\frac{dg(\nu)}{d\nu} = 0$ :

$$\frac{dg(\nu_{\max})}{d\nu} = \left( 3 - \frac{h\nu_{\max}}{kT} \right) e^{h\nu_{\max}/kT} - 3 = 0$$

Ved numerisk løsning:

$$\frac{h\nu_{\max}}{kT} \approx 2.8 \Rightarrow$$

$$\nu_{\max} \approx 2.8 \frac{kT}{h}$$

Konsistent med  
Wien lov!

Nå kan både  $k$  og  $h$  bestemmes  
ved hjelp av eksperimentelle  
verdier:

$$k = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$

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

"Beste"  
nåværende  
verdier

### 1.3 Lysets natur

etter Plancks forslag:

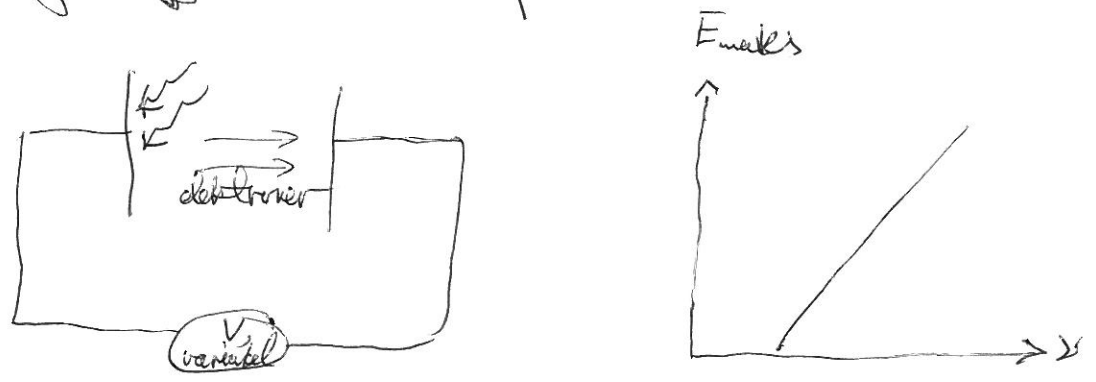
Eksperimentene viste at lys oppfører seg som en  
gass av partikler kalt fononer, hvert med energi  
 $h\nu$ . [ Jfr. Newtons forslag om "korpuskler". ]

Her:

So in eksperimentene skal outales.

# Fotoelektrisk effekt

Når lys taffer en metal plate:



- Strømmen er proportional med lysintensiteten
- Max. energi  $E_{maks}$  til ~~elektroner~~  $E_{maks}$  afhænger lineært af lys frekvensen
- (kryster med klassisk teori!)

Albert Einstein, 1905:

- Lys er partikler, fotoner, energi  $h\nu$
- Siden bindingsenergi  $E_B$  for elektroner i metallet:

$$E_{maks} = h\nu - E_B$$

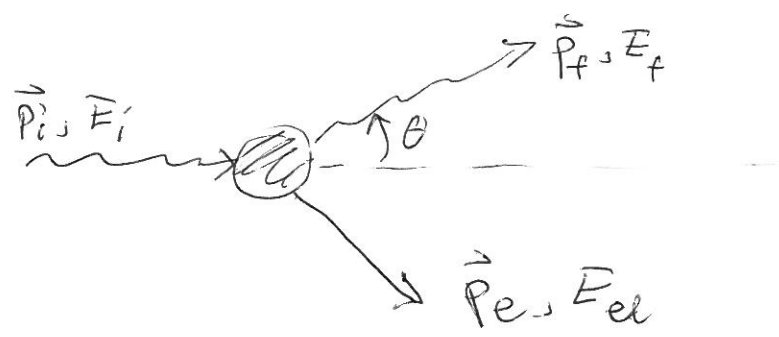
Stignings-tallet måles til å vere like Plancks konstant!  
 Dvs. den opptrer i et fenomen svært forskjellig fra svart-legeme-straling!  
 Må ha en fundamental fysisk betydning!

# Compton-effekten

Når ~~elektroner~~ fotoner "spres" på elektroner:  
 eksperimentelt

$$\lambda_f - \lambda_i = \lambda_c (1 - \cos \theta) \tag{1.9}$$

$\lambda_f$  ← utgående  
 $\lambda_i$  ← innkommende  
 $\lambda_c$  ← Compton-bølge-lengden



Klassisk, kom:

Elektronet skulle vibrere med samme frekvens som innkommende lys, og da stråle ut med samme frekvens!

År 1905: Beregningsproblem i klassisk mekanikk, elektroner partikler, energi lys kvantene

$$E_{el}^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$$

$$m_0 = m_e$$

men for de masseløse (?) lys kvantene

$$E_{foton} = pc$$

Impulsbevarelse:

$$\vec{p}_i = \vec{p}_f + \vec{p}_e \tag{1.10}$$

Energi bevarelse:

$$E_i^{(foton)} + m_{el} c^2 = E_f^{(foton)} + E_{el} \tag{1.11}$$

Omroter og kvadrer:

$$\vec{p}_i - \vec{p}_f = \vec{p}_e$$

$$p_i^2 + p_f^2 - 2 p_i p_f \cos \theta = p_e^2 \tag{1.12}$$

Utsvarende:

$$(E_i - E_f + m_e c^2)^2 = E_{el}^2 \tag{1.13}$$

Sett inn for  $E_i, E_f, E_{el}$ :

$$(p_i c - p_f c + m_e c^2)^2 = p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4$$

$$(p_i - p_f)^2 + 2(p_i - p_f) m_e c = p_e^2 \tag{1.14}$$

(1.12) & (1.14)  $\Rightarrow$

$$p_i^2 + p_f^2 - 2 p_i p_f \cos \theta = p_i^2 + p_f^2 - 2 p_i p_f \cos \theta + 2(p_i - p_f) m_e c$$



$$\frac{1}{P_f} - \frac{1}{P_i} = \frac{1}{m_e c} (1 - \cos \theta) \tag{1.15}$$

Umfør fotoeffektimpulser:

$$E = h\nu, \nu = \frac{c}{\lambda}, E = pc \Rightarrow$$

$$P = \frac{h}{\lambda} \tag{1.16}$$

⇒

$$\lambda_f - \lambda_i = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

eller

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 2.4 \times 10^{-12} \text{ m}$$

Øjerner med målinger!

Effekten er forklaret med at røntgen- eller gammastrålene fremtræder som partikler med

$$E = h\nu$$

$$P = \frac{h}{\lambda}$$

Men er lyset partikler eller bølger?

"Begge dele"!

Dualitet: Lyset opfører sig nogle gange som partikler, andre gange som bølger!

et radikalt spørgsmål da:  
 Har materie tilsvarende dualitet?

# 1.1 Materiens bølgenatur

Louis de Broglie:

Partikler kan også oppføre seg som bølger, med

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.17)$$

"Begrunnelse": Ta foton-relasjonen (1.16) og ~~les~~ les den mhp  $\lambda$ !

## Eksempel 1.2

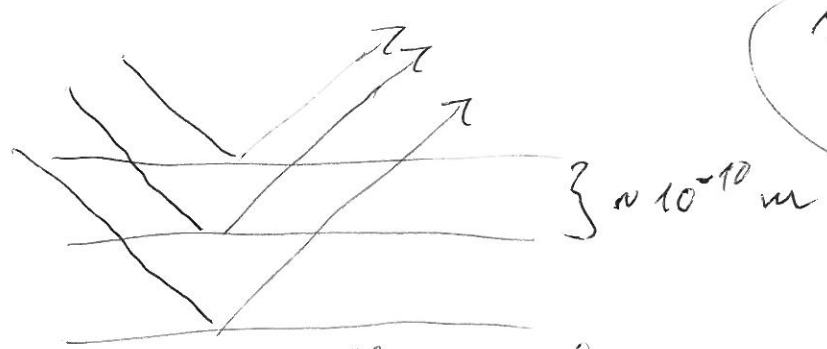
Foreleser,  $m = 70 \text{ kg}$ , går med hastighet  $v = 1 \text{ m/s}$ . Da er

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{70 \times 1} \text{ m} = 9 \times 10^{-36} \text{ m}$$

Mye mindre enn antatt protonutsbreiing; foreleseren gir ingen merkbare interferens-mønstre!

Må velge små masser for å få målbare effekter.

Påvist eksperimentelt av Davisson & Germer spredning av elektroner på nikkel-krytall-gitter som funksjon av spredningsvinkel.



Interferens-mønstre påvist!

Symmetri mellom stråling og materie: Begge kan oppføre seg som både partikler og bølger!

## 1.5 Bohr-atomet

Ekspirimentet av Ernest Rutherford:

- α-partikkel-spredning på atomer
- ⇒ kjernen er liten, positivt ladd, omgitt av negative elektroner i bane.

Problem:

- Elektroner skal stråle kontinuerlig pga. sentripetalakselerasjon, klassisk sett
- De sløser da energi og vil spiralisere inn i kjernen

Observert: Varm H-gass stråler bare i visse diskrete bølgelengder (spektrallinjer)! Allerede i det 19. århundre fant man at

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)} \quad (1.18)$$

der  $R$  - Rydbergkonstanten

$$R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$m = 1, 2, \dots$$

$$n = 2, 3, 4, \dots$$

Oppdaget av Johann Balmer i 1885 (for  $m=2$ , Balmer-serien)

Niels Bohr:

- Dreieimpulsen kan ha bare visse diskrete verdier (kvantisering)

$$\boxed{L = mvr = n\hbar, n=1, 2, 3, \dots} \quad (1.19)$$

$$\hbar = h/2\pi \quad (\text{"h kvist"})$$

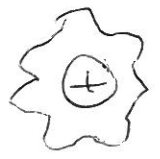
Tilsvarende stående de Broglie-bølger langs elektronbanen! (de Broglie-bølgene kom senere)

Anta

$$2\pi r = n\lambda = n h/p$$

⇒

$$L = pr = n h/2\pi = n \hbar \quad \underline{\text{Voila!}}$$



Bohr!



Skilte Bohr!

Klassisk regning videre:

$$F_{\text{Coulomb}} = F_{\text{sentripetal}}$$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} = \frac{m v^2}{r}$$

(1.20)

⇒ (1.19) - (1.20) mhp.  $r$  og  $v$ !

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} m r = m^2 v^2 r^2 = (n \hbar)^2$$

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

(1.21)

$$v = \frac{n \hbar}{m} \frac{1}{r}$$

$$v = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \frac{1}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

(1.22)

Total klassisk energi, med  $r$  &  $v$  innsett:

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

(1.23)

$$= \frac{1}{2} m \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$$E_n = - \frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$
$$= -13.6 \text{ eV} \times \frac{1}{n^2}$$

(1.24)

Der

$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{19} \text{ J}$$

energinnivåene er diskrete :

Spektrallinjene framkommer ved et overgang  $n_1 \rightarrow n_2$   
med fjer- fotonutsendelse med frekvens

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = (E_{n_1} - E_{n_2}) / h$$

dvs.

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{hc} \underbrace{\frac{m}{2h^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2}_{\text{Rydbergkonstanten!}} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

(se oppgave 1.15)

Ma ha  
 $n_2 < n_1$   
ved overgang,  
men  
 $n=1$   
er laveste  
tilstand!

Dette var den tidlige kvante mekanikkens største triumf!

Men gjensvarende problem :

Bohr-modellen misser klassisk mekanikk og kvantemekanikk under forhold hvor klassisk mekanikk stett ikke gjelder.

Likevel, se kapittel 6 :

Den fulle kvantemekaniske teorien predikerer de samme energinivåene som Bohr-modellen!

## 1.6 Forsøpig oppsummering

Slik var situasjonen rundt 1920.

Både materie og lys kunne oppføre seg noen ganger som partikler og andre ganger som bølger. Slike koherent teori se langt.