TFY 4215 vår 2018

- BB : Obligatoriske flervalgstester og oblig. numerisk øving
  Beskjeder underveis. Lenke til åpen nettside.

- Åpen nettside : Notater. Frivillige øvinger. Framdriftsplan. osv.

- Hovedbok : Hemmer (PCH) eller Griffiths (DJG)

- Utdypende stoff : Tilleggene til Ingjald Øverbø (IØ)

- Digital eksamen (inspera) onsdag 30. mai kl 15-19.
  50 flervalgsoppgaver.

- Kursets innhold :

  Innledning til kvantemekanikken
  Schrödingerligningen
  Postulatene
  Eksempler og anvendelser
  Numeriske løsningsmetoder
  Molekylfysikk. Beregninger.

- Studasser : Åsmund Folkestad, Marius Kalleberg Hope,
  Sebastian Johansen, Martin Tømterud

- Referansegruppe :

  BFY Halvor Melkild
  MLREAL Endre Sørmo Rundsveen
  MTFYMA Thakshina Tharmapalan
  MTNANO Håvard Bakke

Fysikk ved ca 1900 :

- Newtons lover. Galileisk relativitet ($v_{AC} = v_{AB} + v_{BC}$)
- Termodynamikk og Statistisk mekanikk
  [Kelvin, Boltzmann, ...]
- Maxwells ligninger. Interferens, diffraksjon. Lys er bølger.
  [Maxwell, Hertz, ...]
- Materie er partikler. Atomet : Negativt ladde elektroner i jevnt fordelt positiv ladningsfordeling.
  [J.J. Thomson, 1897, NP 1906] (NP = nobelpris)

Problemer med klassisk, ikke-relativistisk fysikk, før og etter 1900 :

- Linjespektre

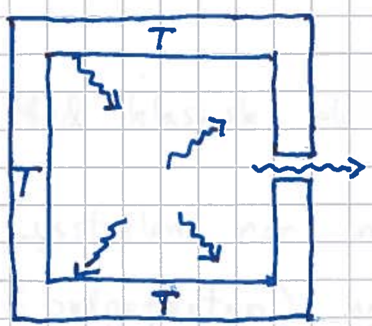
  Absorpsjon og emisjon av elektromagnetisk (EM) stråling med karakteristiske bølgelengder λ.
  Eks:
  Mørke linjer i solspekteret (Fraunhofer-linjer) pga absorpsjon i atmosfæren [Fraunhofer, 1814]

  Balmer-serien i hydrogen, absorpsjon ved 410, 434, 486 og 656 nm i den synlige delen av spekteret
  [Balmer, 1885]

- Galileisk relativitet

  Holder ikke for lys. Lysfarten i vakuum er like stor i alle inertialsystem [Michelson (NP 1907) og Morley, 1887]

- Stråling fra svart legeme

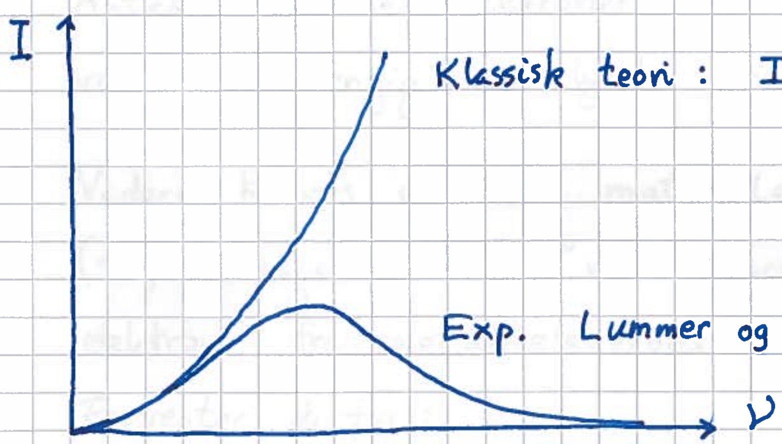


Hulrom med liten åpning ≈ svart legeme; temp. T

$I(\nu, T)$ = utstrålt effekt pr flateenhet og frekvensenhet

$I(\nu, T)\,d\nu$ = utstrålt effekt pr flateenhet for frekvenser mellom ν og $\nu + d\nu$

(= frekvensfordelingen ; W/m^2)



Klassisk teori : $I(\nu) \sim \nu^2$; Rayleigh-Jeans lov

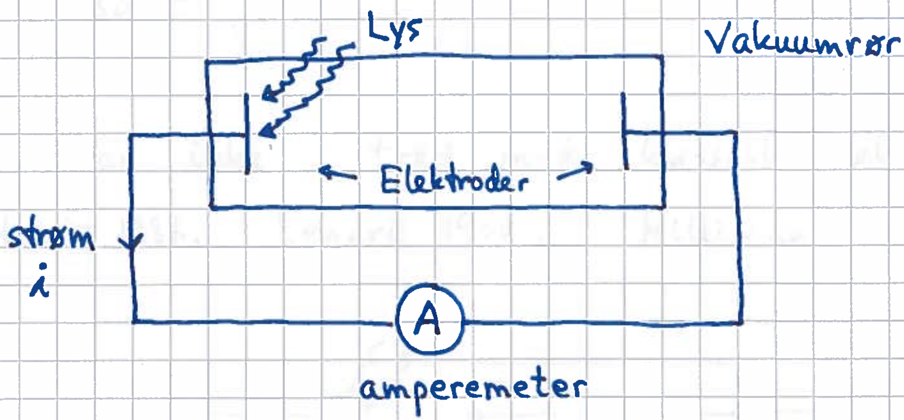
Exp. Lummer og Kurlbaum, 1898 m/fl.

⇒ Klassisk teori <u>helt feil</u> for høye frekvenser ν
(men OK for lave ν, evt. høye temp. T)

"Ultrafiolett-katastrofen" : Total utstrålt effekt divergerer med klassisk teori,

$$j(T) = \int_0^\infty I(\nu, T)\,d\nu \rightarrow \infty$$

- Fotoelektrisk effekt



Med klassisk elektromagnetisme:

Lysstrålen har intensitet $j = c \cdot u$, der c = lysfarten (bølgefarten) og $u = u_E + u_B = \frac{1}{2}\varepsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2$. Her er $B^2 = (E/c)^2 = E^2 \cdot \mu_0 \varepsilon_0$ slik at $u = \varepsilon_0 E^2$ og $j = c\varepsilon_0 E^2$.

Poenget er at j kan økes, uavhengig av frekvensen ν.

Forventer derfor:

Antall løsrevne elektroner, og dermed strømstyrken i bør være uavhengig av lysets frekvens ν.

Videre kreves en viss materialavhengig minsteenergi W (= frigjøringsarbeidet, "work function") for å rive løs et elektron fra metallelektroden.

Forventer derfor:

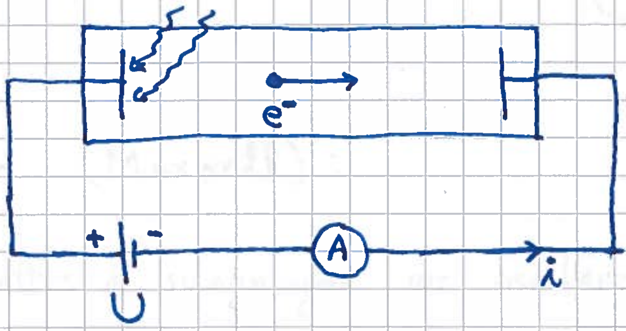
Med tilstrekkelig lav intensitet j bør det ta litt tid før en strøm i måles i kretsen.

Terskelspenning:

Løsrevne elektroner har en eller annen hastighetsfordeling, og en viss maksimal kinetisk energi K_{max}. Da trengs en "motspenning" $U = K_{max}/e$ for å redusere strømmen til null. Kaller U terskelspenningen.

Forventer at K_{max}, og dermed U øker med økende lysintensitet j.

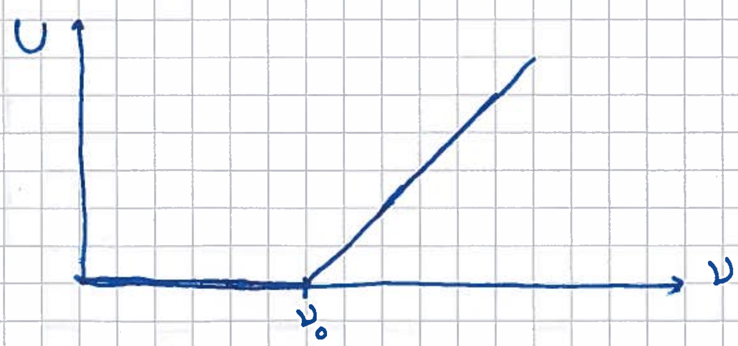
Exp. var <u>ikke</u> i tråd med klassisk elektromagnetisme.
[Hertz 1887, Lenard 1900, Millikan 1914 (NP 1923)]



* Strømmen i avhenger av ν. Monokromatisk lys med $\nu < \nu_0$ = terskelfrekvensen gir $i = 0$, uavhengig av j

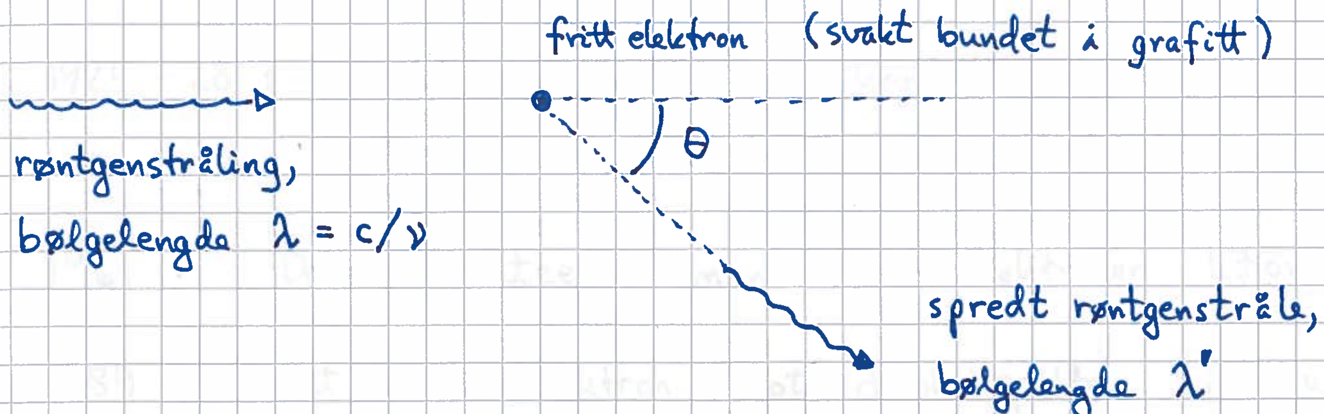
* Hvis $\nu > \nu_0$ blir $i > 0$ umiddelbart

* Terskelspenningen U er uavhengig av j, men avhengig av ν:
$U = 0$ når $\nu < \nu_0$ (selvsagt, da er jo $i = 0$!),
U øker lineært med ν når $\nu > \nu_0$



⇒ Klassisk teori helt feil.

- Comptoneffekten

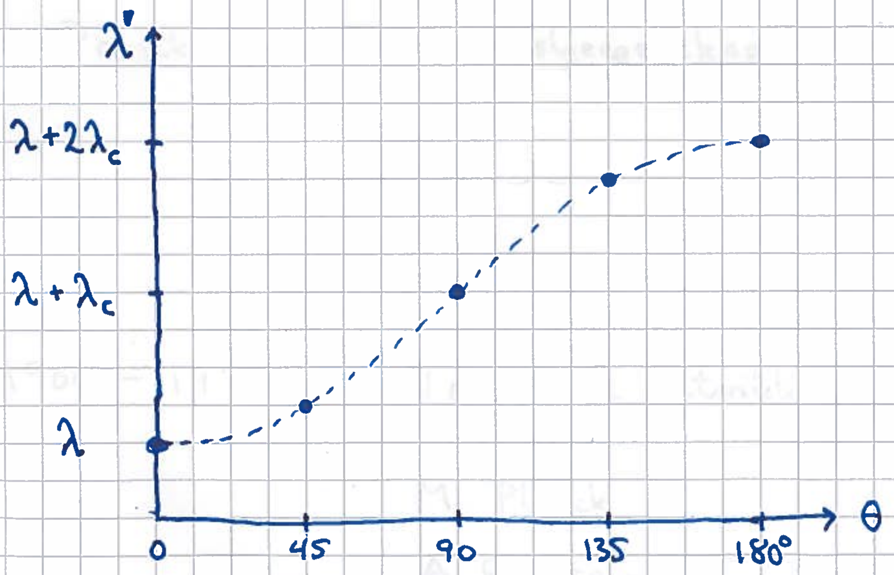


Klassisk teori (Maxwell):

Elektronet settes i svingninger av oscillerende kraft $\vec{F}(t) = -e\vec{E}(t)$, med samme frekvens ν som innkommende stråle (bølge).
Elektronet sender ut igjen absorbert energi i form av stråling med samme frekvens

$\Rightarrow$ Forventer spredt stråle med $\lambda' = \lambda$, uavhengig av θ

Compton (1923; NP 1927) målte $\lambda'(\theta) \neq \lambda$:



$\lambda_c = 0.024$ Å

- Interferens med partikler

1925 - 28 : Elektroner sendt mot krystall av Ni
[Davisson og Thomson, NP 1937]

1961 : Dobbeltspalteeksperiment med elektroner [Jönsson]

1989 : Ett og ett elektron mot dobbeltspalte [Tonomura]

2003 : Ett og ett C_{60}-molekyl mot diffraksjonsgitter
[Zeilinger et al] (Test 1)

2015 : $C_{168} H_{94} F_{152} O_8 N_4 S_4$ (430 atomer ; 5310 g/mol)

[Arndt et al]

$\Rightarrow$ Lys (EM bølger) har partikkelegenskaper !

Partikler har bølgeegenskaper !

1900 - 1923 : Teoretisk utvikling.

M. Planck

A. Einstein

A. Compton

N. Bohr

L. de Broglie

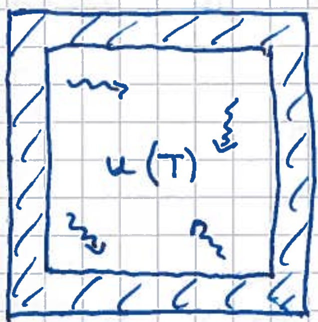
Plancks strålingslov (Test 1)

Plancks kvantehypotese (1900, NP 1918):

$$E_n = n \cdot h\nu \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Dvs, for EM stråling med gitt frekvens ν er strålingsenergien <u>kvantisert</u>. Samsvar med eksperimenter ble oppnådd med $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34}$ Js (Plancks konstant)

Utledning:



Antar metallboks med hulrom i termisk likevekt, EM strålingsenergi $u(T)$ pr volumenhet, volum $V = L^3$.

Frekvensfordeling:

$$u(T) = \int du = \int_0^\infty d\nu \, \frac{du}{d\nu}, \quad \text{der}$$

$$\frac{du}{d\nu} = \frac{1}{V} \frac{dU}{d\nu} = \frac{\langle E \rangle}{V} \frac{dN}{d\nu}, \quad \text{med}$$

$\langle E \rangle$ = midlere energi pr svingemode (tilstand)

dN = antall tilstander mellom ν og $\nu + d\nu$

$\frac{dN}{d\nu}$ = tilstandstettheten (svingemoder pr frekvensenhet), fastlegges med grensebetingelser for $\vec{E}$-feltet: $\vec{E} = 0$ i metallet; kontinuerlig $E_\parallel$ i grenseflaten mellom metall og hulrom (dvs veggene)

$\Rightarrow$ stående bølger $\vec{E}(\vec{r},t) \sim \sin(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)$ med bølgelengder slik at

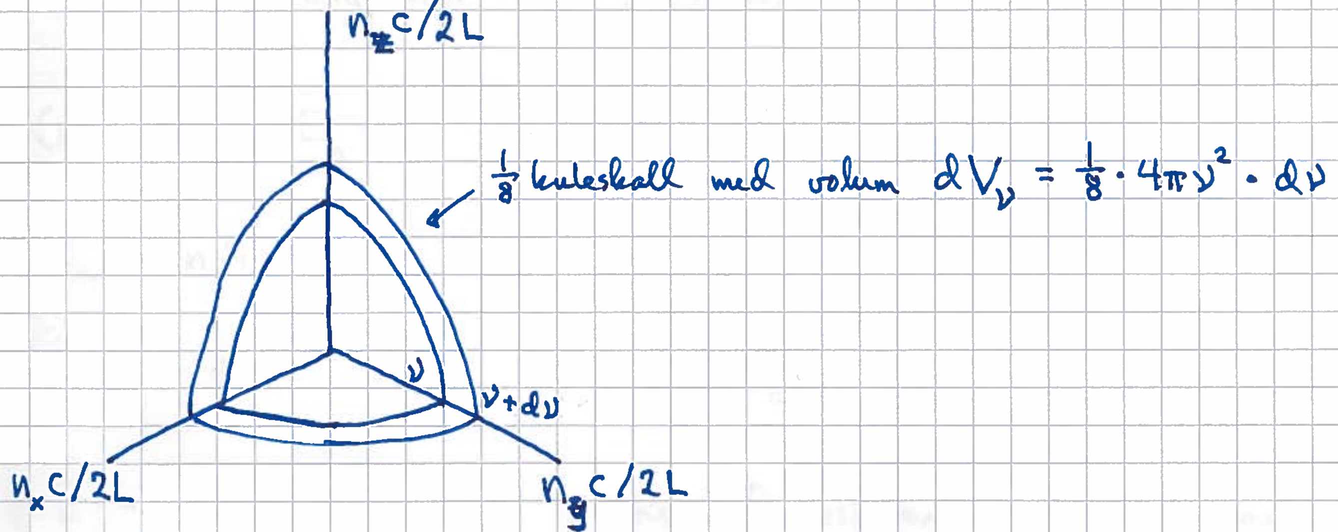
$$k_i = n_i \pi / L \quad ; \quad i = x,y,z \quad ; \quad n_i = 1,2,3,\dots$$

$$k = |\vec{k}| = 2\pi/\lambda = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\pi}{L}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

som gir frekvensene

$$\nu = c/\lambda = \frac{c}{2L}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

som tilsvarer punkter i positiv oktant i rom med akser $n_x c/2L$, $n_y c/2L$, $n_z c/2L$:



1 frekvensverdi opptar volum $(c/2L)^3$ i dette rommet

2 uavhengige polarisasjonsretninger for hver frekvensverdi

(Eks : Hvis $\vec{k} = k\hat{z}$ er $\vec{E} = E_x\hat{x} + E_y\hat{y}$; transversal bølge)

Dermed :

$$dN/dV_\nu = 2\cdot 1/(c/2L)^3 = 16\,V/c^3$$

$$\Rightarrow dN/(\pi\nu^2 d\nu/2) = 16\,V/c^3 \quad \Rightarrow \quad dN/d\nu = 8\pi\nu^2\,V/c^3$$

$$\Rightarrow \frac{du}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\cdot\langle E\rangle$$