

Bohrs atommodell [IØ 1.4]

16

Utgangspunkt for Niels Bohr i 1913 (NP 1922):

- Balmerserien for H-atomet:

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right); \quad n=3,4,5,6; \quad R \approx 10^7 \text{ m}^{-1}$$

- Spredning av α -partikler (He^{2+}) mot tynn gullfolie viste at atomets positive ladning og masse er samlet i en liten kjerne.

(E. Rutherford, 1911)

- Strålingsenergi er kvantisert i enheter $h\nu$.
(Planck, Einstein)

Bohrs ideer (postulater):

- Elektronet i H-atomet er akselerert og skal i følge Maxwells ligninger emitte EM-bølger og stadig miste energi. Dette må være forhindret. Elektronet kan bare være i stasjonære tilstander med bestemte energier.
- Elektronet kan foreta kvantesprang mellom stasjonære tilstander ved å absorbere eller emitte et strålingskvant, med noen bestemte energier.
(foton)

Balmerserien antyder stasjonære tilstander med energi $E_n = -hcR/n^2$, og dermed

emisjon av foton med energi

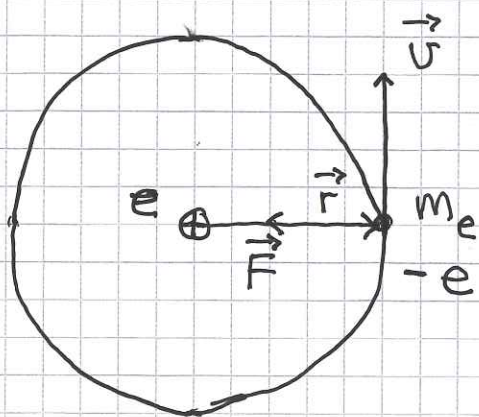
$$h\nu = hc/\lambda = hcR \left(-\frac{1}{n^2} + \frac{1}{j^2} \right) = E_n - E_j$$

ved overgang fra tilstand $n = 3, 4, 5, 6$ til tilstand $j = 2$ (evt. absorpsjon fra j til n).

Lymanserien (1906-1914): UV-stråling pga overganger mellom $n = 2, 3, 4, \dots$ og $j = 1$. Antyder en laveste energitilstand - grunntilstanden - med energi $E_1 = -hcR \approx -13.6 \text{ eV}$.

- Elektronet går i klassiske baner rundt kjernen; generelt ellipseformet; enkløst å anta sirkelbaner.
- Elektronets dreieimpuls er kvantisert, med mulige verdier $L = |\vec{L}| = n\hbar$ ($n = 1, 2, 3, 4, \dots$).
 $\hbar = h/2\pi \approx 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$; den "reduerte" Plancks konstant.

Gir energiverdier $E_n = -13.6 \text{ eV}/n^2$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) i tråd med Balmer- og Lymanserien.



$$\text{N2: } F = m_e a \quad ; \quad a = v^2/r$$

Coulombs lov:

$$F = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$\Rightarrow v^2 = ar = \frac{Fr}{m_e} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}$$

$$\Rightarrow K = \frac{1}{2} m_e v^2 = e^2 / 8\pi\epsilon_0 r \quad (\text{antar } v \ll c)$$

$$\text{Potensiell energi: } V = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 r \quad (\text{Coulombpotensialet})$$

$$\Rightarrow \text{Total energi: } E = K + V = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

$$L = |\vec{r} \times \vec{p}| = r m_e v = n \hbar$$

$$\Rightarrow L^2 = r^2 m_e^2 \cdot \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}}_{v^2} = n^2 \hbar^2$$

$$\Rightarrow \text{Baner med radius } r_n = n^2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = n^2 \cdot a_0$$

$$\text{Bohr-radien: } a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2 \approx 0.529 \text{ \AA}$$

Tillatte energier:

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \cdot n^2} \approx -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

Er $v \ll c$? Ja:

$$K_{\max} = -E_1 = 13.6 \text{ eV} \ll m_e c^2 \approx 0.511 \text{ MeV}$$

$$\text{Kan skrive } E_n = -\frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 / n^2$$

$$\text{Finstrukturkonstanten: } \alpha = e^2 / 4\pi\epsilon_0 \hbar c \approx 1/137$$

Bohrs modell fungerte ikke for andre atomer enn hydrogen.

Vi har stasjonære tilstander og krantesprang mellom disse.

Har ikke klassiske baner, og L er kvantisert på en annen måte.

Partikkelbølger [PCH 1.5 ; D3G 1.6 ; IØ 1.5, 1.6]

Louis de Broglie (1923, NP 1929):

Som lys har også massive ($m > 0$) partikler både bølge- og partikkelegenskaper.

For lys: $E = pc$ og $E = h\nu \Rightarrow p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

For massive partikler med impuls p og energi E :

$$\boxed{\lambda = h/p ; \quad \nu = E/h} \quad \text{de Broglies hypotese}$$

Termisk de Broglie bølgelengde:

$$\langle K_{\text{trans}} \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{3}{2} k_B T = \text{midlere translasjons-energi pr partikkel i ikke-relativistisk ideell gass}$$

$$(\text{EPP: } \frac{1}{2} k_B T \text{ pr frihetsgrad ; } \langle p^2 \rangle = \langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \rangle)$$

En "typisk" bølgelengde for partiklene er dermed

$$\lambda = \frac{h}{p_{\text{rms}}} = \frac{h}{\sqrt{\langle p^2 \rangle}} = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}$$

SCHRÖDINGERLIGNINGEN

(20)

[PCH 1-3 ; DFG 1-2 ; IØ 1-3]

Erwin Schrödinger, 1925, NP med Paul Dirac i 1933

Hva slags bølgeligning kan vi bruke for de Broglies partikkelbølger?

Vi repeterer først helt grunnleggende klassisk bølgefysikk.

Bølgeligningen

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad [3D: \nabla^2 y = \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}]$$

beskriver både mekaniske og EM bølger, med y = utsving på streng, tetthet eller trykk i et fluid, elektrisk felt $\vec{E}$, magnetfelt $\vec{B}$ osv.

Generell løsning: $y(x,t) = y(x \pm v_f t)$

Spesielt viktig er harmoniske løsninger

$$y(x,t) = A \sin(kx - \omega t) \quad \text{ert.} \quad y(x,t) = A \cos(kx - \omega t)$$

eller med kompleks representasjon (ofte hensiktsmessig)

$$y(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

der $e^{i\alpha} = \sin \alpha + i \cos \alpha$; $i = \sqrt{-1}$

A = amplitude ; $k = 2\pi/\lambda$ = bølgetall ;

$\omega = 2\pi/T$ = vinkelfrekvens ; $\nu = \omega/2\pi = 1/T$ = frekvens ;

T = periode ; $v_f = \lambda/T = \lambda \nu = \omega/k$ = fasehastighet ;

$v_g = d\omega/dk$ = gruppehastighet

Vi ser på en fri partikkel med masse m i potensial $V=0$. [Fri: $\vec{F}=0$, $V=\text{konstant}$. I kvantemekanikk er $V = \text{potensial} = \text{potensiell energi}$.] Og med $v \ll c$.

Vi bruker en endimensjonal (1D) framstilling så mye som mulig, for enkelhets skyld, og inkluderer "åpenbare" generaliseringer til tre dimensjoner (3D) underveis.

Anta (f.eks) $\vec{p} = m\vec{v} = mv\hat{x} = p\hat{x}$
slik at $E = K = mv^2/2 = p^2/2m$

de Broglie:

$$\lambda = h/p \Rightarrow k = 2\pi/\lambda = 2\pi p/h = p/\hbar$$

$$\nu = E/h \Rightarrow \omega = 2\pi\nu = 2\pi E/h = E/\hbar$$

Vi prøver med samme type harmonisk bølge som klassisk:

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)} = e^{i(px - Et)/\hbar} \quad (A=1)$$

Vi deriverer i tid og rom:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 \Psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} \Psi$$

$\Rightarrow$ Vi satser på bølgeligningen

(SL)

$$\underline{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}}$$

som er Schrödingerligningen for fri partikkel, i 1D med $V=0$

Fra mekanikken vet vi at valget av nullpunkt for potensialet ikke har noen fysisk betydning.

Med $V = V_0 = \text{konstant}$ ($V_0 \neq 0$):

Fri partikkel ($\vec{F} = -\nabla V = 0$), $E = K + V = \frac{p^2}{2m} + V_0$

Samme planbølge $\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar}$ gir nå

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V_0 \right) \Psi \quad \text{og}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} \Psi$$

så vi satser nå på ligningen

$$\underline{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right) \Psi}$$

som er SL for fri partikkel i 1D, med $V_0 = \text{konst.}$

Men hva med et potensial $V(x)$ [$V(\vec{r})$ i 3D] som ikke er konstant overalt? Da er $\vec{F} = -\nabla V \neq 0$, og $\vec{p}$ er ikke lenger veldefinert ("skarp").

Schrödinger satset på samme ligning, som viste seg å fungere!

$$\text{SL i 1D:} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x,t)$$

$$\text{SL i 3D:} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r},t)$$

MERK: Ψ må være kompleks! Men målbare fysiske størrelser er reelle. Følgelig kan bølgefunksjonen Ψ ikke være direkte målbare!

Tolkning av bølgefunksjonen [PCH 1.7; IØ 1.6]

(23)

Max Born (1926, NP 1954) :

$$dP = |\Psi(x,t)|^2 dx \quad (= \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) dx)$$

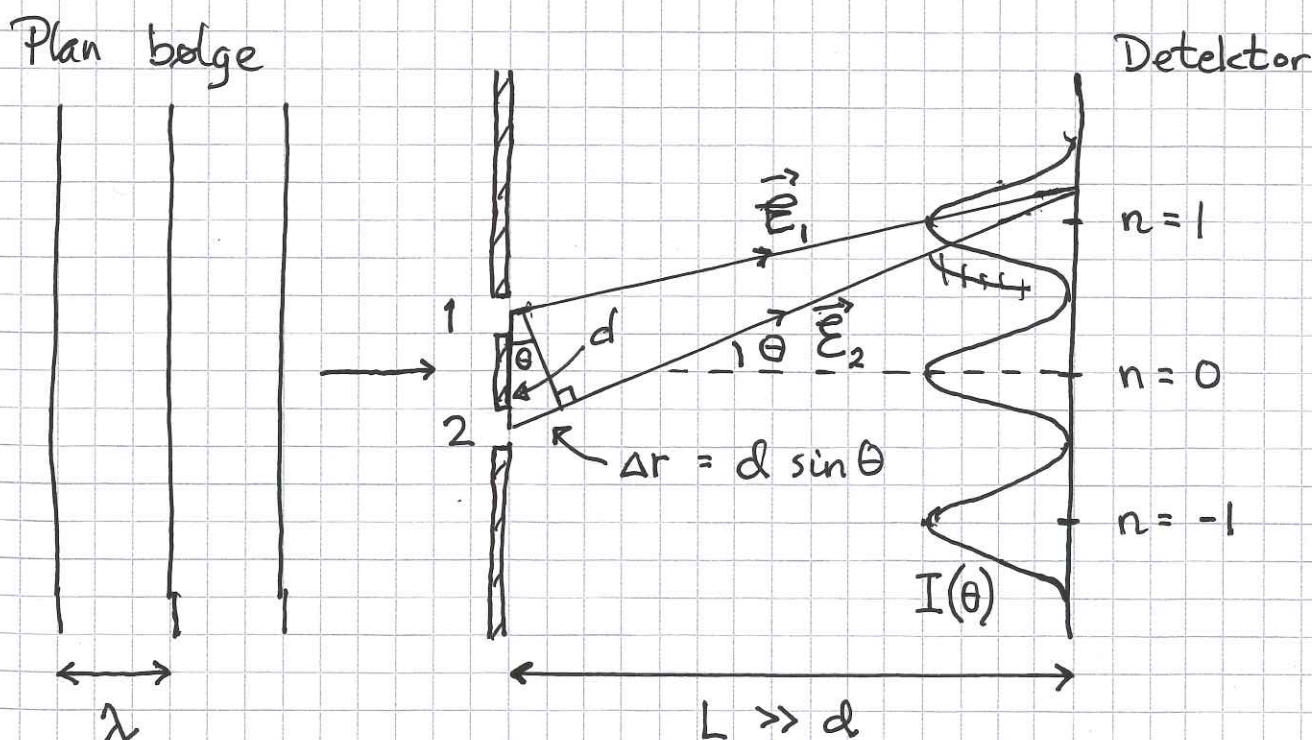
= sannsynligheten for å måle partikkelens posisjon mellom x og $x+dx$ ved tidspunktet t

$$\frac{dP}{dx} = |\Psi(x,t)|^2 = \text{sanns. pr lengdeenhet}$$

Normering : $\int dP = 1 \Rightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1}$

[3D : $\int |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1 ; d^3r = dx dy dz \text{ (f.eks)}]$

Begrunnes gjerne med interferens-exp. med dobbeltspalte (evt. diffraksjonsgitter) :



Total bølge ved detektoren : $\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$

$$\Rightarrow \text{Intensitet : } I \sim |\vec{E}|^2 = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$$

Konstruktiv interferens når $d \sin \theta = n\lambda$;

$$\vec{E}_2 \approx \vec{E}_1 ; \quad I \sim 4E_1^2 \quad (\text{max})$$

Destruktiv interferens når $d \sin \theta = (n + \frac{1}{2})\lambda$;

$$\vec{E}_2 \approx -\vec{E}_1 ; \quad I \approx 0$$

Hvis innkommende EM-bølge har svært lav intensitet, sendes ett og ett foton mot dobbeltspalten.

Resultater i tilfeldige treffpunkter på detektoren.

Etter hvert avtegnes interferensmønsteret $I(\theta)$.

Vi tolker $|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$ som sannsynlighetsfordelingen for hvor et gitt foton vil treffe på detektoren.

Helt tilsvarende exp. med partikler med masse gir tilsvarende interferensmønster.

Derfor naturlig å tolke $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ som et mål for sanns. fordelingen for hvor en gitt partikkel vil treffe på detektoren.

Bølgepakker [PCH 1.6 ; DFG 2.4]

En planbølge, med skarp impuls p , er ikke normerbar:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |e^{i(px-Et)/\hbar}|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 dx = \infty$$

Lokalisering av partikkelen til et avgrenset område oppnås med en bølgepakke, og dermed et visst slingsningsmoment i impulsen:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{i(px-Et)/\hbar} dp$$

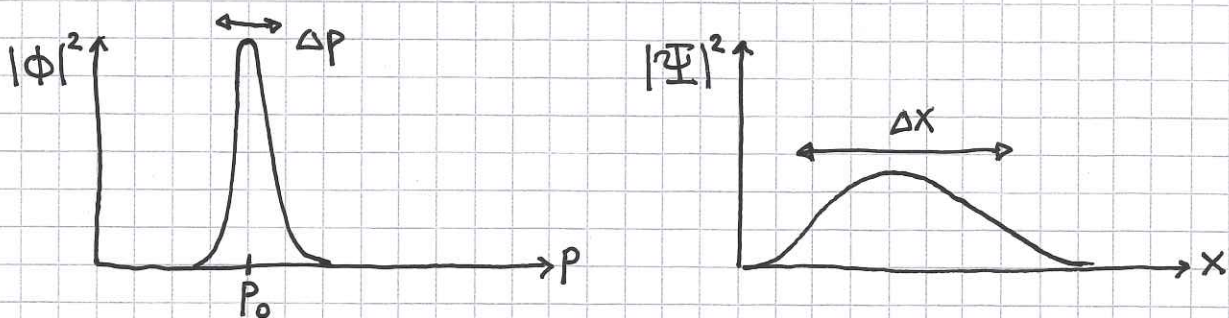
dvs en sum av plane bølger med amplituder $\phi(p)dp$.

Ved $t=0$ er Ψ og ϕ hverandres fouriertransform:

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad (\text{TMA 4120})$$

$$\phi(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) e^{-ipx/\hbar} dx$$

Smal $\phi(p) \Rightarrow$ Bred $\Psi(x,0)$; og omvendt.



Heisenbergs uskarphetsrelasjon: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$

(Benises senere)

Operatorer. Eigenfunksjoner og egenverdier

Dersom en operator $\hat{A}$ virker på en funksjon $f(x)$, og resultatet er samme funksjon $f(x)$ ganget med en konstant A , dvs

$$\hat{A} f(x) = A f(x),$$

da er $f(x)$ en egenfunksjon til $\hat{A}$ med tilhørende egenverdi A . Vi har en egenverdligning.

Eks :

$$\bullet \frac{\partial}{\partial x} \sin(px/\hbar) = \frac{p}{\hbar} \cos(px/\hbar)$$

$\Rightarrow \sin(px/\hbar)$ er ikke egenfunkt. til oper. $\frac{\partial}{\partial x}$

$$\bullet \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{i(px-Et)/\hbar} = p e^{i(px-Et)/\hbar}$$

$\Rightarrow$ den plane bølgen $\exp[i(px-Et)/\hbar]$, som beskriver en fri partikkel med impuls p , er egenfunkt. til oper. $(\hbar/i) \partial/\partial x$, med tilhørende egenverdi p

$\Rightarrow$ Vi kaller dette en impulsoperator : $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

$$\bullet -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(px-Et)/\hbar} = \frac{p^2}{2m} e^{i(px-Et)/\hbar}$$

$\Rightarrow$ samme planbølge er egenfunkt. til operatoren

$$\frac{1}{2m} \hat{p}^2 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

med egenverdi $p^2/2m = K =$ kinetisk energi

$\Rightarrow$ Vi kaller $\hat{K} = \hat{p}^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ en operator for kinetisk energi (når $\vec{p} = p \hat{x}$)

$$\bullet \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right) e^{i(px-Et)/\hbar} = \left(\frac{p^2}{2m} + V_0 \right) e^{i(px-Et)/\hbar} \quad (27)$$

$\Rightarrow$ samme planbølge er egenf. til oper. $\hat{K} + V_0$, med egenv.
 $p^2/2m + V_0 = K + V_0 = E =$ partikkelens (totale) energi

$\Rightarrow$ Vi kaller $\hat{K} + V_0$ en operator for total energi, for en fri partikkel i potensial $V_0 = \text{konst.}$

Dersom $V(x)$ ikke er konstant, er en slik planbølge ikke egenfunksjon til operatoren $\hat{K} + V(x)$; da vil andre typer funksjoner kunne være egenfunksjoner.

I klassisk mekanikk kalles energifunksjonen gjerne Hamiltonfunksjonen H . Derfor kaller vi i kvantemekanikken energioperatoren for Hamiltonoperatoren $\hat{H}$.

Dermed, for partikkel som beveger seg i 1D:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

og i 3D: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})$

Schrödingerligningen kan da skrives slik (se s. 22):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H} \Psi(x,t) \quad \text{i 1D}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r},t) = \hat{H} \Psi(\vec{r},t) \quad \text{i 3D}$$