Klassisk teori: $u = u_E + u_B = \frac{1}{2}\varepsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0}B^2$,
dvs to kvadratiske bidrag til strålingsenergien pr svingemode, som hver bidrar med $\frac{1}{2}k_BT$ i følge ekvipartisjonsprinsippet

$$\Rightarrow \langle E\rangle = 2\cdot\frac{1}{2}k_BT = k_BT$$

$$\Rightarrow \frac{du}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\cdot k_BT,$$ Rayleigh-Jeans lov, som gir

$$u(T) = \int_0^\infty d\nu\,\frac{du}{d\nu} = \infty \qquad \text{(UV-katastrofen)}$$

Plancks kvantehypotese og statistisk mekanikk:

$$\langle E\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n\cdot p_n$$

$$E_n = nh\nu$$

$$p_n = e^{-\beta E_n}/Z \quad ; \quad \beta = \frac{1}{k_BT}$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$ = partisjonsfunksjonen (tilstandssummen)

$$\Rightarrow \langle E\rangle = \frac{1}{Z}\sum_n E_n e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z}\left(-\frac{d}{d\beta}\right)\sum_n e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{Z}\frac{dZ}{d\beta}$$

Innfør $x = \exp(-h\nu\beta)$. Da er

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1 + x + x^2 + \dots = \frac{1}{1-x}$$

$$\frac{dZ}{d\beta} = \frac{dZ}{dx}\frac{dx}{d\beta} = \frac{1}{(1-x)^2}\cdot(-h\nu)\cdot x$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle = -(1-x)\cdot\frac{(-h\nu)x}{(1-x)^2} = \frac{h\nu\, x}{1-x} = \frac{h\nu}{x^{-1}-1} = \frac{h\nu}{e^{h\nu\beta}-1}$$

$$\Rightarrow \frac{du}{d\nu} = \frac{8\pi h \nu^3 / c^3}{e^{h\nu/k_BT} - 1} \quad ; \quad \text{Plancks strålingslov}$$

Total energitetthet :

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

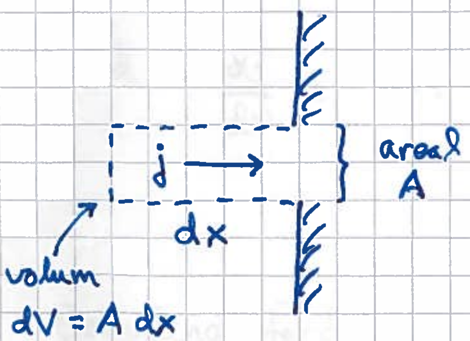
Substituer $y = h\nu/k_BT$; da er $\nu = \frac{k_BT}{h} y$ og $d\nu = \frac{k_BT}{h} dy$

$$\Rightarrow u(T) = \int_0^\infty \frac{k_BT}{h} dy \cdot \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \left(\frac{k_BT}{h}\right)^3 \cdot \frac{y^3}{e^y - 1}$$

Her er $\int_0^\infty \frac{y^3}{e^y - 1} dy = \frac{\pi^4}{15}$ (Rottmann) , slik at

$$u(T) = \alpha \cdot T^4 \quad \text{med} \quad \alpha = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^3}$$

Utstrålt effekt (gjennom lite hull i veggen) :

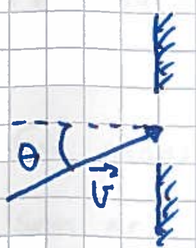


$$j = \frac{1}{2} \left\langle \frac{dU}{A \cdot dt} \right\rangle$$

halvparten av strålingen i dV går mot høyre

$$dU = u\, dV = u A\, dx$$

$$\Rightarrow j = \frac{1}{2} u \left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = \frac{1}{2} u \langle v_x \rangle$$



$|\vec{v}| = c$, $v_x = c \cdot \cos\theta$

$$\langle v_x \rangle = \frac{\iint v_x \, d\Omega}{\iint d\Omega} \quad ; \quad d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

$$0 \leq \theta \leq \pi/2$$

$$\Rightarrow \langle v_x \rangle = c \cdot \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \cos\theta}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta} = c \cdot \frac{2\pi \cdot 1/2}{2\pi \cdot 1} = \frac{c}{2}$$

$$\Rightarrow \quad j(T) = \frac{1}{2} u \cdot \frac{c}{2} = \frac{c}{4} \cdot u(T)$$

$$\Rightarrow \quad j(T) = \sigma T^4 \quad \text{med} \quad \sigma = \frac{c}{4}\alpha = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^2}$$

$$\approx 5.67 \cdot 10^{-8} \ W/m^2 K^4$$

som er Stefan-Boltzmanns strålingslov

Frekvensfordelingen til utstrålt energi:

$$j(T) = \int_0^\infty d\nu \frac{dj}{d\nu}$$

med $$\frac{dj}{d\nu} = \frac{c}{4} \cdot \frac{du}{d\nu} = \frac{2\pi h \nu^3 / c^2}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

Bølgelengdefordelingen:

$$j(T) = \int_0^\infty d\lambda \frac{dj}{d\lambda} \qquad \text{(Test 1)}$$

(Pass på: $\nu = c/\lambda \Rightarrow d\nu = -(c/\lambda^2)\, d\lambda$)

Gir maksimal $dj/d\lambda$ for $\lambda \cdot T = 2898 \ \mu m \cdot K$,
som er Wiens forskyvningslov

Fotoelektrisk effekt

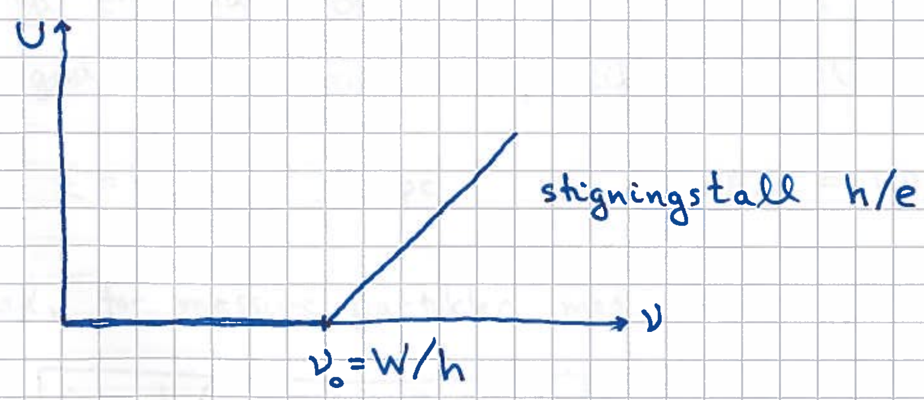
Einstein (1905; NP 1921):

- Lysets energi er kvantisert, $E = h\nu$, med h som innført av Planck.
- Elektroner i metallelektroden absorberer hele energien $h\nu$. Liten sannsynlighet for å absorbere mer enn en energipakke ("foton"; L.T. Troland 1916)

Nok til å forklare eksperimentene:

- Må ha $h\nu > W$ (= frigjøringsarbeidet) for å rive løs elektroner og få strøm i kretsen
- Elektronets kinetiske energi: $K = h\nu - W$
- Terskelfrekvens: $\nu_0 = W/h$
- Terskelspenning U gitt ved $eU = h\nu - W$

$$\Rightarrow \quad U = \frac{h}{e}(\nu - \nu_0)$$



Comptoneffekten [IØ 1]

Compton kunne forklare sine egne eksperimenter med "partikkelbildet" av EM stråling og Einsteins rel.teori :

foton

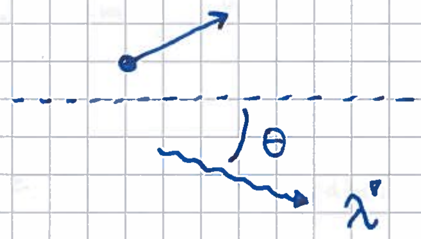
$\lambda = c/\nu$

$E = h\nu$

$p = E/c = h/\lambda$

elektron

$E_e = m_e c^2$



Energi- og impulsbevarelse gir

$$\lambda' = \lambda + \lambda_c (1 - \cos\theta) \quad \text{med} \quad \lambda_c = \frac{h}{m_e c} \approx 0.024\ \text{Å}$$

i tråd med eksperimentene.

Partikkelbølger

Louis de Broglie (1923, NP 1929) :

Hvis lys er både bølger og partikler, må det samme også gjelde for massive partikler (elektroner osv).

Lys: $E = h\nu$ og $E = pc$ $\Rightarrow$ $p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$

Dermed, for massive partikler med impuls p og energi E :

$$\boxed{\lambda = h/p \quad , \quad \nu = E/h}$$

Termisk de Broglie bølgelengde (for ikke-relativistisk ideell gass av atomer og molekyler) : $K_{trans} = p^2/2m = \frac{3}{2} k_B T$

$\Rightarrow \lambda = h/\sqrt{3 m k_B T}$

Bohrs atommodell

Bakgrunn for Niels Bohrs ideer (ca 1913):

- Balmer serien for H

  $\lambda_n = B n^2 / (n^2 - 4)$; $B \approx 364.5$ nm ; $n = 3, 4, 5, 6$ (Balmer, 1885)

  evt

  $$\frac{1}{\lambda_n} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad ; \quad R = \frac{4}{B} \approx 10^7 \text{ m}^{-1} \quad \text{(Rydberg, 1888)}$$

- Rutherford (1911): Atomenes positive ladning samlet i liten kjerne. (Exp: α-partikler (He^{2+}) sendt mot tynn folie av gull. Noen ble sterkt avbøyd. Ikke i tråd med J.J. Thomsons modell med uniform positiv ladningsfordeling.)

- Plancks kvantehypotese og Einsteins forklaring av fotoelektrisk effekt. Viste at strålingsenergi opptrer i enheter av $h\nu$.

Bohrs postulater:

- Stasjonære tilstander. Klassisk vil elektronet i H-atomet være i akselerert bevegelse og tape energi i form av utsendt EM stråling. Dette må være forhindret, på en eller annen måte.

- Kvantesprang. Absorpsjon og emisjon av foton gir overgang for elektronet mellom stasjonære tilstander. Balmerserien: Antyder energinivåer i H-atomet

  $E_n = -hcR/n^2 \approx -13.6 \text{ eV}/n^2$ $(n = 1, 2, 3, \ldots)$

  siden fotonet har energi $h\nu = hc/\lambda$.

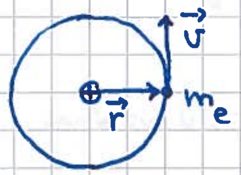
- Elektronet i klassiske sirkelbaner rundt kjernen. (Feil!)

N2, $F = m_e a$, med $F = e^2/4\pi\varepsilon_0 r^2$ og $a = v^2/r$ gir

$v^2 = e^2/4\pi\varepsilon_0 m_e r$, $K = \frac{1}{2} m_e v^2 = e^2/8\pi\varepsilon_0 r$, og total energi

$$E = K + V = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

- Elektronets dreieimpuls er kvantisert. (Riktig.)



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

Bohr foreslo $L = n\hbar$, med $n = 1, 2, 3, \ldots$ og $\hbar = h/2\pi$.

(Ikke helt riktig....!)

Dermed:

$$r^2 m_e^2 \; e^2/4\pi\varepsilon_0 m_e r = n^2\hbar^2$$

Dvs baner med bestemte radier,

$$r_n = n^2 \cdot 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2 = n^2 \cdot a_0$$

med <u>Bohr-radien</u> $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2 \approx 0.529$ Å

Energinivåene:

$$E_n = -e^2/8\pi\varepsilon_0 r_n = -(m_e e^4/32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2)/n^2 \approx -13.6\ \text{eV}/n^2$$

i tråd med Balmers formel! ($R = m_e e^4/8\varepsilon_0^2 h^3 c \approx 10^7\ \text{m}^{-1}$)

Vi ser at $|E_n| \ll m_e c^2$ (hvileenergien):

$$E_n = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2/n^2 \quad ; \quad \alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c \approx 1/137 \quad \text{(finstrukturkonstanten)}$$

- Bohr fikk nobelprisen i 1922 for sin "nesten riktige" modell.
- Men: Bohrmodellen fungerte ikke for andre atomer enn hydrogen!
- Inspirert av de Broglies ide om "partikkelbølger" fant Schrödinger "veien videre"!

SCHRÖDINGERLIGNINGEN

[PCH 1–3 ; DJG 1–2 ; IØ 1–3]

Erwin Schrödinger [1925; NP 1933, delt med Paul Dirac ; Werner Heisenberg fikk prisen i 1932] :

Hva slags bølgeligning kan fungere for de Broglies partikkelbølger ?

Fra mekanikken og elektromagnetismen rekapitulerer vi :

Bølgeligningen $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$ $\left(3D: \nabla^2 y = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}\right)$ beskriver mekaniske og EM bølger, der løsningene er på formen $y(x,t) = y(x \pm vt)$ (y = utsving på streng, avvik fra likevektstrykk i luft, el. felt $\vec{E}$, magn. felt $\vec{B}$ osv), f.eks. harmoniske bølger $y(x,t) = A\sin(kx - \omega t)$, der $k = 2\pi/\lambda$, $\omega = 2\pi/T = 2\pi\nu$, $v = \lambda/T = \lambda\nu = \omega/k$ (fasehastigheten) og $v_g = d\omega/dk$ (gruppehastigheten).

Vi ser på en fri partikkel i en dimensjon :

$$\vec{p} = m\vec{v} = mv\hat{x}$$

$$E = K = p^2/2m \qquad (V = 0)$$

Partikkelens bølgeegenskaper, i følge de Broglie :

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

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

Kan beskrives med reelle, harmoniske bølgefunksjoner

$$\Phi(x,t) = \cos(kx-\omega t) = \cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)$$

eller $\sin(px/\hbar - Et/\hbar)$. Vi ser umiddelbart at den klassiske bølgeligningen $\partial^2\Phi/\partial t^2 = v^2\partial^2\Phi/\partial x^2$ <u>ikke</u> fungerer, siden innsetting gir

$$-\left(\frac{E}{\hbar}\right)^2 \Phi = -v^2\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \Phi$$

som gir $E^2 = v^2p^2 = (p^2/m)^2$, som <u>ikke</u> stemmer, fordi $E = p^2/2m$.

Men hva med $\partial/\partial t$ kombinert med $\partial^2/\partial x^2$?

$$\frac{\partial}{\partial t}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right) = \frac{E}{\hbar}\sin\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right) = -\frac{p^2}{\hbar^2}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)$$

Dvs, ligningen

$$\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}$$

gir "nesten suksess", med E på venstre side og $p^2/2m$ på høyre side, men med den ikke ubetydelige hake at vi endte med $\sin(\ldots)$ på v. side og $\cos(\ldots)$ på h. side.

Men nå er vi på sporet! For den <u>komplekse</u> lineærkombinasjonen av cosinus og sinus,

$$\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar} = \cos\left(\frac{px-Et}{\hbar}\right) + i\sin\left(\frac{px-Et}{\hbar}\right)$$

gir seg selv tilbake, uavhengig av hvor mange ganger vi deriverer, enten det er mhp t eller x. Vi ser at

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = i\hbar\cdot\left(-\frac{iE}{\hbar}\right)\Psi = E\Psi \quad \text{og}$$

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

så vi satser på bølgeligningen

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

Dette er <u>Schrödingerligningen</u> (SL) for en fri partikkel med masse m, impuls $\vec{p} = p\hat{x}$ og energi $E = K = p^2/2m$. ($V = 0$ ble valgt)

Løsning av ligningen er en <u>kompleks plan bølge</u>

$$\exp\left[i(px - Et)/\hbar\right]$$

Et par kommentarer:

- SL er den <u>enkleste</u> diff. lign. som oppfylles av plane de Broglie-bølger for en ikke-relativistisk fri partikkel, med dispersjonsrelasjon $E = p^2/2m$. SL viser seg å <u>fungere i praksis</u>, også for $V = \text{konst.} \neq 0$, og til og med for $V \neq \text{konst.}$

- Må ha <u>komplekse</u> løsninger: Reell Ψ gir reell $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ og imaginær $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$, dvs ikke mulig!

- <u>Målbare</u> fysiske størrelser er <u>reelle</u>.

  Følgelig kan Ψ ikke være en direkte målbar størrelse.

Tolkning av bølgefunksjonen Ψ

Max Born [1926; NP 1954]:

$dP = |\Psi(x,t)|^2 dx$ = sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x+dx$ i en måling av dens posisjon ved tidspunktet t

$$\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = \frac{dP}{dx} = \text{sannsynlighetstettheten}$$

Normering: $\int dP = 1$; et eller annet sted må partikkelen være

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

Hvorfor en slik tolkning?

Vi ser på dobbeltspalteforsøket med lys (T. Young, 1801)

Plan EM-bølge inn mot plate med to åpne spalter