

NOTAT 1

1. Innledning til kvantemekanikken

Notat 1, som du nå leser, henger sammen med kapittel 1 i Hemmers bok. Her prøver vi å nærme oss kvantemekanikken ved bl.a å se på noen av de historiske høydepunktene i utviklingen av denne teorien. Motivasjonen for denne måten å nærme seg teorien på er ikke først og fremst historisk interesse, men at det rett og slett er instruktivt.

Kvantemekanikk er — sagt på en litt for enkel måte — teorien for den submikroskopiske verden. Dette er en verden som ikke umiddelbart er tilgjengelig for observasjoner i samme grad som den makroskopiske (klassiske) fysikken. Oppdagelsen av de fleste kvantefysiske fenomen, og den teoretiske forklaringen på dem, kom derfor så sent som i forrige århundre.

Ved innledningen av den kvantefysiske æra — i år 1900 — var klassisk fysikk en langt på vei fullendt teoribygning:

- Newtons mekanikk hadde vært etablert i mer enn to hundre år.
- Lysets bølgenatur var kjent fra begynnelsen av 1800-tallet fra bøynings- og diffraksjons-eksperimenter utført av blant andre Young og Fresnel.
- Forbindelsen mellom elektriske og magnetiske fenomen var klarlagt omkring midten av 1800-tallet, særlig ved arbeidene til Faraday og Maxwell, som kulminerte med oppstillingen av Maxwells ligninger i 1865. Maxwells forutsigelse av elektromagnetiske bølger, og senere oppdagelsen av disse av Hertz i 1887, førte til erkjennelsen av at også lys er elektromagnetiske bølger.
- Termodynamikk og statistisk mekanikk ble også utviklet i løpet av 1800-tallet.

Disse teoriene ble på slutten av 1800-tallet av mange betraktet som en bortimot fullstendig beskrivelse av den fysiske verden. Det som sto igjen, ble oppfattet som småproblemer. Noen få år senere var det klart at man hadde tatt grundig feil:

- Newtons ligninger viste seg å være et spesialtilfelle (en tilnærmelse for små hastigheter) av Einsteins spesielle relativitetsteori.
- Newtons gravitasjonsteori ble utvidet til (erstattet av) Einsteins generelle relativitetsteori.
- Oppdagelsen av at atomet består av en veldig liten og kompakt kjerne omgitt av elektroner, og visse egenskaper ved vekselvirkningen mellom atomer og annen materie og stråling, førte til utviklingen av kvantefysikken og den kvantemekaniske teorien.

Disse teoriene og den utviklingen som fulgte utover på 1900-tallet har revolusjonert vårt fysiske verdensbilde, og har ført til en rekke store nyvinninger i forståelsen av atomfysikk, kjernefysikk, partikkelfysikk, astrofysikk og kosmologi, men også av kjemi, biofysikk og biologi, og ikke minst faste stoffers fysikk med alle de anvendelsene som betyr så mye for moderne teknologi.

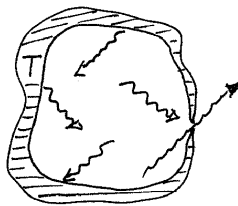
Som nevnt i innledningskapitlet i Hemmers bok, inneholder kvanteteorien mange elementer som representerer en revolusjon i forhold til klassisk mekanikk og klassisk tankegang. Den fikk derfor en trang fødsel, som vi kan si strakte seg over perioden 1900 – 1925, da det kom et gjennombrudd. Etter dette gjennombruddet tok det bare et par-tre år før man hadde en fullt utviklet kvantemekanisk

teori. Noe av grunnen til den trange fødselen, og også til at det ennå i dag er vanskelig for nybegynnere i faget å bli fortrolig med denne fysiske teorien, er at den ikke strider bare mot klassisk fysikk, men også er **kontra-intuitiv**; den stemmer ikke med det vi forventer ut fra den fysiske intuisjonen vi har opparbeidet gjennom våre dagligdagse erfaringer med makroskopiske fenomen.

Hemmer beskriver i innledningskapitlet noen av milepælene i arbeidet som førte fram til gjennombruddet i 1925. Blant disse kan vi nevne spesielt:

1.1 Plancks strålingslov (1900)

Oppdagelsen av Plancks strålingslov er beskrevet i avsnitt 1.2 hos Hemmer. Som forklart der vil åpningen inn til et hulrom i et legeme ved temperatur T stråle som en fullstendig svart overflate ved denne temperaturen:



Planck fant en empirisk formel for den **spektrale emittansen** (utstrålt energistrøm pr flate- og frekvensenhet), basert på eksperimentelle resultater som nettopp var funnet,

$$I(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (\text{T1.1})$$

Ved likevekt må det være en forbindelse mellom denne spektrale emittansen fra veggene i hulrommet (som vi antar er svarte) og den **spektrale energitettheten** inne i hulrommet (energi pr volum- og frekvensenhet), $u(\nu, T)$. Det kan vises at $I(\nu, T) = u(\nu, T) \cdot c/4$, slik at

$$u(\nu, T) = \frac{4}{c} I(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (\text{T1.2})$$

Disse to formlene er ekvivalente måter å uttrykke Plancks strålingslov på.

Det bemerkelsesverdige ved Plancks empiriske formel var at frekvensfordelingen av strålingen ved høyst forskjellige temperaturer kunne uttrykkes ved én og samme formel, med bare én parameter, h , ved siden av lyshastigheten c , temperaturen T og Boltzmanns konstant k_B . Planck skjønnte at dette tydet på en underliggende lovmessighet, og i løpet av et par måneder lyktes det ham å *utlede* formelen, vha en *fysisk modell*.

I Plancks modell utveksles det hele tiden strålingsenergi mellom hulrommet og oscillerende ladninger i veggene. En oscillerende ladning kan ifølge Maxwells teori for elektromagnetiske bølger både stråle ut energi og absorbere den. For å forklare den kontinuerlige frekvensfordelingen må en anta at veggen inneholder oscillatorer med alle mulige frekvenser. For å utlede formelen måtte Planck gjøre en antakelse som egentlig var i strid med alt som var kjent fra klassisk fysikk:

Han måtte anta at energien til hver av oscillatorene var **kvantisert**, dvs kunne ha verdiene $nh\nu$, der ν var frekvensen til vedkommende oscillator, n et heltall og h en proporsjonalitetskonstant. I denne antakelsen lå det også at energiutvekslingen mellom oscillatoren og strålingsfeltet dermed ville skje i **kvanta** av $h\nu$.

Ved å sammenligne med de empiriske kurvene bestemte Planck konstanten h til $h \approx 6.6 \times 10^{-34}$ Js. Den underliggende lovmessigheten var altså en form for *kvantisering*, som er stikk i strid med et sentralt prinsipp fra klassisk fysikk. Klassikeren Planck beskrev denne antakelsen om kvantisering av energien som “en handling i desperasjon”.

Oppgave 1: Vis at den totale emittansen (utstrålt energi pr tids- og flateenhet) fra en svart overflate ved temperatur T ,

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

er proporsjonal med T^4 , dvs $j(T) = \sigma T^4$, og bestem proporsjonalitetskonstanten σ (som kalles Stefan–Boltzmanns konstant), når det oppgis at

$$\int_0^\infty x^3 (e^x - 1)^{-1} dx = \pi^4/15.$$

[Hint: Innfør $x = h\nu/k_B T$ som ny integrasjonsvariabel. Svar: $\sigma = 5.670 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$. Se tabellen over fysiske konstanter bakerst i dette notatet.]

1.2 Einstein forklarer den fotoelektriske effekten (1905)

Les først avsnitt 1.3 side 12–13 i Hemmer.

I forhold til Plancks antakelse tok Einstein her et nytt skritt som i mange år etterpå ble sett på som *for* radikalt: Han antok at kvantiseringen hadde noe å gjøre med *selve lyset*, altså at lys og annen elektromagnetisk stråling består av **diskrete kvant** (lyskvant, senere døpt **fotoner** i 1926, av G.N. Lewis) med energi $h\nu$. Skepsisen illustreres av Plancks uttalelse i 1913, referert i fotnoten nederst side 13 i Hemmer. Denne skepsisen varte ved, også etter at Millikan i perioden 1914–16 hadde funnet en nøyaktig eksperimentell bekreftelse av ligningen for fotoelektronenes kinetiske energi,

$$E_{\text{kin}} = h\nu - W,$$

(der W er frigjøringsarbeidet, dvs den energien som skal til for å frigjøre elektronet fra metallet) og hadde brukt dette til en nokså nøyaktig (og uavhengig) bestemmelse av Plancks konstant,

$$h = 6.57 \times 10^{-34} \text{ Js}.$$

Denne skiller seg fra dagens verdi

$$h = 6.626\,068\,96(33) \times 10^{-34} \text{ Js} \approx 4.136 \times 10^{-15} \text{ eVs},$$

med bare en snau prosent. Millikan oppfattet dette som en bekreftelse av Plancks hypotese, som vi ser av følgende sitat fra en av hans artikler om disse resultatene:

“The photoelectric effect...furnishes proof which is quite independent of the facts of blackbody radiation of the correctness of the fundamental assumption of the quantum theory, namely, the assumption of a discontinuous or explosive emission of the energy absorbed by the electronic constituents of atoms from...waves. It materializes, so to speak, the quantity h discovered by Planck through the study of blackbody radiation and gives us a confidence inspired by no other type of phenomenon that the primary physical conception underlying Planck’s work corresponds to reality.”

Men Einsteins idé var vanskeligere å akseptere. I Millikans artikkel fra 1916 heter det: “Einstein’s photoelectric equation...cannot in my judgment be looked upon at present as resting upon any sort of a satisfactory theoretical foundation”, even though “it actually represents very accurately the behavior” of the photoelectric effect.

Einstein lot seg imidlertid ikke stoppe. Etter at han hadde fullført sin generelle relativitetsteori, utvidet han i 1917 sin lyskvanthypotese:¹

Et lyskvant med energi $E = h\nu$ antas å ha en impuls

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (\text{T1.3})$$

Bakgrunnen for denne antakelsen er:

(i) For det første følger det fra Maxwells ligninger at en elektromagnetisk bølgegruppe har en feltenergi E_{felt} og et impulsinnhold $\mathbf{p}_{\text{felt}}$ som oppfyller relasjonen $E_{\text{felt}} = c|\mathbf{p}_{\text{felt}}|$. At elektromagnetisk stråling også inneholder en impuls $|\mathbf{p}| = E/c$ ble bekreftet eksperimentelt av E.F. Nichols og G.F. Hull i 1903. Dersom bølgegruppen skal kunne oppfattes som en samling av lyskvanter (fotoner), må da fotonene også bære med seg impuls i tillegg til energien.

(ii) For det andre følger det fra relativistisk partikkel-kinematikk,

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \implies \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v}, \quad E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}, \quad (\text{T1.4})$$

at $E/p \rightarrow c$ når $m \rightarrow 0$.

Dette var om mulig en enda mer dristig antakelse (enn antakelsen om energien $h\nu$ for lyskvantene) — en hypotese som tilsynelatende ikke hadde noe som helst grunnlag i eksperimenter, og som ble møtt med enda større skepsis. Årsaken til skepsisen var at teorien om disse lyskvantene (fotonene) med partikkel-lignende egenskaper var på kollisjonskurs med alt som til da var kjent om lysets bølgenatur. Hvordan skulle lys på én gang kunne være både en bølge og en strøm av partikler? Det naturlige svaret på dette spørsmålet var å forkaste foton-hypotesen til Einstein, hvilket de aller fleste gjorde i flere år framover. Denne lettvinde utveien ble brått stengt i 1923, ved oppdagelsen av Compton-effekten.

Oppgave 2: Fra Einsteins fotonhypotese og Plancks strålingslov (T1.2) følger det at antall fotoner pr volum- og frekvensenhet i en bakerovn ved temperatur T er $n(\nu, T) = u(\nu, T)/h\nu$. Vis at antall fotoner pr volumenhet, $n(T) = \int_0^\infty n(\nu, T) d\nu$, er

$$n(T) = 2.029 \cdot 10^7 \text{ T}^3 \text{ m}^{-3} \text{ K}^{-3},$$

og at gjennomsnittsenergien for disse fotonene er

$$\bar{E} = \frac{u(T)}{n(T)} = 2.701 k_B T,$$

¹Som diskutert av Abraham Pais i “Subtle is the Lord”, hadde nok Einstein lenge *tenkt* at lyskvanter måtte ha impuls, men han ventet lenge med å si det direkte. Den første som uttrykte det direkte, ser ut til å ha vært Johannes Stark, i 1909.

når det oppgis at $\int_0^\infty x^2(e^x - 1)^{-1} dx = 2.4041$.

Oppgave 3: Vis at et foton med bølgelengde λ har energi

$$E_\gamma = 1.24 \cdot 10^{-6} \frac{\text{eV}\cdot\text{m}}{\lambda}. \quad (\text{T1.5})$$

[Hint: Bakerst i dette Notatet finner du Plancks konstant både i enhetene eVs og Js=Nms. I denne oppgaven vil du finne at det er praktisk å bruke $h = 4.136 \cdot 10^{-15}$ eVs. Moral: Vær bevisst på hvilke enheter du bruker i numeriske beregninger.]

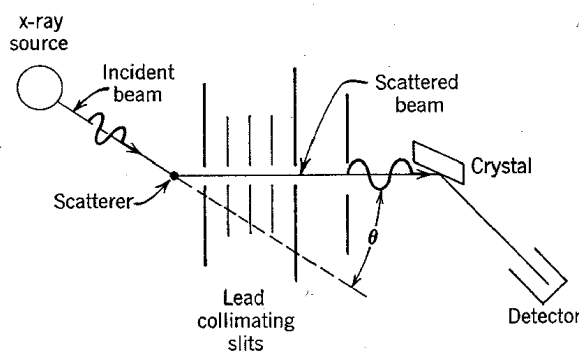
Frigjøringsarbeidet W (dvs bindingsenergien for de løsest bundne elektronene) for cesium (Cs) og gull (Au) er hhvis 1.9 eV og 4.8 eV. Avgjør om fotoelektrisk effekt er mulig med synlig lys ($0.4 \mu\text{m} < \lambda < 0.7 \mu\text{m}$) for disse to stoffene. [Vis at fotonenergiene for synlig lys ligger i området $1.77 \text{ eV} \lesssim h\nu \lesssim 3.1 \text{ eV}$.]

Oppgave 4: En 25-watts lyspære emitterer ca 10% av effekten i det synlige bølgelengdeområdet. Gjør et omtrentlig overslag over antallet fotoner som sendes ut fra pæra pr sekund i dette λ -området. Med nattsyn kan øyet registrere en lyskilde som er så svak at bare ca 5 fotoner passerer pupillen pr sekund. Anta en pupilleåpning på ca 0.5 cm^2 . Hvor langt borte kan pæra sees?

[Hint: Siden det er snakk om et overslag, kan du bruke en foton-energi som svarer til en bølgelengde midt i det synlige spektrat, $\lambda = 0.55 \mu\text{m}$. Svar: Ca 2300 km.]

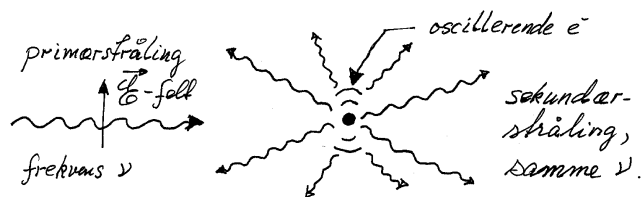
Oppgave 5: Gjør siste del av oppgave 3 side 20 i Hemmer.

1.3 Comptons eksperiment (1923)

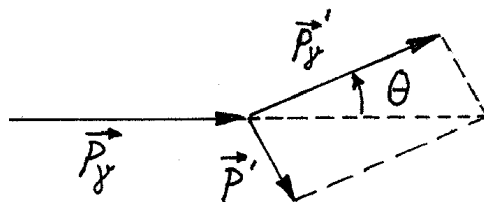


Figuren viser en prinsippskisse av Comptons eksperiment. Monokromatiske røntgenstråler ble spredt på et lite stykke grafitt. Den spredte strålingen ble observert ved en vinkel θ som kunne varieres. Bølgelengden av denne sekundærstrålingen kunne observeres, vha såkalt Bragg-spredning på en kalsitt-krystall. Resultatet var en sensasjon: Compton fant nemlig sekundærstråling med en bølgelengde λ' som var større enn primærbølgelengden λ , og differansen $\lambda' - \lambda$ (**Compton-forskyvningen**) avhang av spredningsvinkelen θ .

Dette fenomenet kunne ikke forstås ut fra klassisk elektromagnetisk teori: Dersom primærstrålingen betraktes som en elektromagnetisk bølge med bølgelengde λ og frekvens $\nu = c/\lambda$, vil det oscillerende elektriske feltet i bølgen få elektronene i grafittstykket til å svinge med samme frekvens ν . Ifølge Maxwells teori vil slike oscillerende elektroner (akkurat som elektronene i en radioantenne) sende ut elektromagnetiske bølger med samme frekvens og dermed også med *samme bølgelengde* som primærstrålingen.



Vi skal her merke oss at målingen av sekundærbølglengden (ved å spre denne på kalsitt-krystallen) faktisk benytter seg av strålingens bølgenatur. Men resultatet av selve Compton-spredningen kunne Compton bare forklare ved å ta Einsteins fotonhypotese på alvor: La oss betrakte prosessen som en kollisjon mellom ett enkelt partikkel-lignende lyskvant (foton) med energi $E_\gamma = h\nu = hc/\lambda$ og impuls $\mathbf{p}_\gamma$ og ett enkelt elektron som er tilnærmet fritt, og som er i ro før støtet, med impuls $\mathbf{p} = 0$ og energi $E = m_e c^2$. I og med at sekundærfotonet forlater valplassen med en impuls $\mathbf{p}'_\gamma$ i retningen angitt ved vinkelen θ , må det nødvendigvis bli overført en impuls $\mathbf{p}' = \mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}'_\gamma$ til elektronet.



Elektronet stikker altså av ("rekylerer"), med impulsen $\mathbf{p}'$ og dermed med en økt energi $E' = \sqrt{m_e^2 c^4 + c^2 (\mathbf{p}')^2}$. Denne økningen av elektronets energi går selvsagt på bekostning av foton-energien, som følgelig må være mindre for sekundærfotonet enn for primærfotonet. Dette svarer til en økning av bølglengden, slik Compton fant.

Denne økningen kan beregnes kvantitativt, ved å ta utgangspunkt i de relativistiske bevarelseslovene for energi og impuls, som antydnet ovenfor:

$$\begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} + m_e c^2 &= \frac{hc}{\lambda'} + E' & [(E')^2 &= (c\mathbf{p}')^2 + m_e^2 c^4] \\ \mathbf{p}_\gamma + \mathbf{0} &= \mathbf{p}'_\gamma + \mathbf{p}'. \end{aligned}$$

Vha disse formlene er det *i prinsippet* trivielt å vise at ²

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta), \quad (\text{T1.6})$$

som er kjent som **Compton-relasjonen**. Vi legger merke til at **Compton-forskyvningen**,

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \equiv \lambda_C (1 - \cos \theta), \quad (\text{T1.7})$$

²For at dette ikke skal virke for mystisk kan vi vise hvordan Compton-relasjonen utledes. Vi løser først ligningene ovenfor mhp E' og $\mathbf{p}'$, og regner ut $(E'/c)^2 - (\mathbf{p}')^2$, som er lik $(m_e c)^2$:

$$\frac{E'^2}{c^2} - (\mathbf{p}')^2 = \left[m_e c + h \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) \right]^2 - (\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}'_\gamma)^2 = m_e^2 c^2.$$

Ved å skrive ut kvadratene (der bl.a. $\mathbf{p}_\gamma \cdot \mathbf{p}'_\gamma = p_\gamma p'_\gamma \cos \theta$) og bruke at $p_\gamma = h/\lambda$ og $p'_\gamma = h/\lambda'$ vil du da finne at

$$2m_e h c \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) + \frac{2h^2}{\lambda \lambda'} (\cos \theta - 1) = 0.$$

Compton-relasjonen følger ved å multiplisere denne ligningen med $\lambda \lambda' / (2m_e h c)$.

er uavhengig av primærbølgelengden, men avhenger av θ .³ Compton fant at hans eksperimentelle resultater stemte med denne formelen, og han konkluderte i sin artikkel med at:

“The present theory depends essentially upon the assumption that each electron which is effective in the scattering scatters a complete quantum. It involves also the hypothesis that the quanta of radiation are received from definite directions and are scattered in definite directions. The experimental support of the theory indicates very convincingly that a radiation quantum carries with it directed momentum, as well as energy.”

Dette ga en dramatisk bekreftelse av Einsteins hypotese:

Lys, og annen elektromagnetisk stråling, har ikke bare bølgeegenskaper (uttrykt ved bølgeparametrene λ og $\nu = c/\lambda$), men har også partikkel-egenskaper, dvs opptrer som fotoner med energi $h\nu$ og impuls $h\nu/c = h/\lambda$.

(T1.8)

Det som var forvirrende i 1923, og som fortsatt kan være en utfordring, er at det ikke er snakk om et *enten/eller* når det gjelder bølge- kontra partikkelegenskaper, men et *både/og*. Dette illustreres veldig godt av Comptons eksperiment, hvor vi ser at selve spredningsprosessen kan forklares vha partikkel-egenskapene, mens målingen av sekundær-bølgelengden som nevnt kan gjøres vha spredning i en krystall. I denne spredningsprosessen virker den periodiske strukturen i krystallen som et tredimensjonalt gitter. Det karakteristiske for denne spredningsprosessen er at en får spredningsmaksima i bestemte retninger, som avhenger av *bølgelengden* til strålingen. Ved å finne ut hvilke retninger som gir spredningsmaksima kan en altså indirekte måle bølgelengden.

Oppgave 6: Skriv ned Compton-relasjonen for spredning av et foton på et proton. Hvordan vil du definere Compton-bølgelengden for et proton?

Med Comptons eksperiment, og forklaringen av dette, kunne en endelig konkludere med at stråling virkelig har en dobbelt-natur, en såkalt **bølge-partikkel-dualisme**, som en sier. Bølgenaturen til lys og annen elektromagnetisk stråling er en sentral del av klassisk elektromagnetisme. Eksistensen av fotoner, og alt som har med *partikkelnaturen* å gjøre, kan derimot bare beskrives ved hjelp av kvantefeltteori og kvanteoptikk, som hører hjemme i mer avanserte kurs enn dette.

Det første skrittet på veien mot oppdagelsen av at også (andre) *partikler* har en slik dobbelt-natur (bølge-partikkel-dualisme) ble tatt da Niels Bohr innførte sin atom-modell:

1.4 Bohr-modellen (1913)

Vi skal etter hvert se at Niels Bohrs atommodell fra 1913 ikke er noen fullgod kvantefysisk teori, og at den faller helt gjennom i lys av kvantemekanikken som ble utviklet midt på 20-tallet. Det er likevel instruktivt å se litt nærmere på denne modellen. Den inneholdt nemlig et par fundamentalt nye ideer som er blitt stående som sentrale aspekter ved kvanteteorien.

Først litt om

A. Bakgrunnen: Tre viktige elementer i den historiske bakgrunnen for Bohrs modell var

(i) *Balmers formel for linjene i hydrogenspektret*. Mens spektralfordelingen fra bl.a et svart legeme er kontinuerlig (jf Plancks strålingslov), var det kjent fra tidlig på 1800-tallet at strålingen

³Størrelsen $h/(m_e c) \equiv \lambda_C$ er karakteristisk for Compton-spredning på elektroner, og er kjent som **Compton-bølgelengden** (for elektroner). Den numeriske størrelsen er

$$\lambda_C \equiv \frac{h}{m_e c} = 2.426\,310\,238(16) \times 10^{-12} \text{ m.}$$

fra enkeltatomer i gassform består av et sett av bestemte bølgelengder, altså et **diskret linjespektrum**. Hvert atom har sitt eget linjespektrum, som skiller seg fra spektrene til andre grunnstoffer. Spektroskopi kan derfor brukes til å utføre kjemisk analyse.

Disse spektrene forteller i virkeligheten noe om atomenes oppbygning, og er ett av sporene som leder fram til kvanteteorien. Dette ble imidlertid ikke forstått før Niels Bohr kom inn i bildet. Et viktig poeng her er at linjene lar seg systematisere. Det enkleste systemet har en for hydrogen, som er det enkleste atomet. Dette ble oppdaget av Balmer i 1885, som fant at *noen* av spektrallinjene i (den synlige delen av) hydrogenspektret kan uttrykkes slik:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, 6.$$

Her er R_{∞} den såkalte **Rydberg-konstanten**, som per 2010 er fastlagt eksperimentelt til⁴

$$R_{\infty} = 10.973\,731\,568\,539(55) \times 10^6 \text{ m}^{-1}.$$

I 1908 fant Paschen en serie i det infrarøde området,

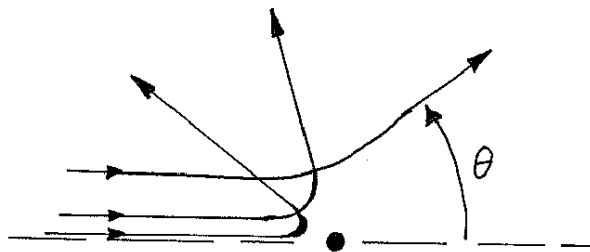
$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 4, 5, 6, \dots$$

I dag vet vi at dette kan generaliseres til følgende formel for linjene i hydrogenspektret:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad m = n + 1, n + 2, n + 3, \dots \quad (\text{T1.9})$$

En slik enkel empirisk formel med bare én parameter (R_{∞}) vitner om en underliggende lovmessighet.

(ii) *Rutherfords atommodell (1911)*: Ved å bombardere et tynt metallfolium med α -partikler (helium-kjerner) fant man ved Rutherfords laboratorium i Manchester i årene 1908–11 at noen av α -partiklene fikk en kraftig avbøyning. Rutherfords beregninger viste at en slik stor avbøyning krever et mye sterkere kraftfelt enn det en ville ha dersom den positive ladningen i metallatomene (og i α -partikkelen) var fordelt over hele atom-volumet (slik en antok i Thomsons atom-modell). Rutherford lanserte derfor i 1911 en ny atom-modell, med hele den positive ladningen og mesteparten av atomets masse konsentrert i en liten og veldig tett kjerne, og med elektroner svevende omkring. Han antok med andre ord at atomet for det meste består av tomrom.⁵ Med en slik liten atomkjerne og med en tilsvarende liten α -partikkel (helium-kjerne) vil den frastøtende kraften mellom prosjektil og målpertikkel bli veldig stor når de to partiklene kommer tilstrekkelig nær hverandre, noe som forklarer hvorfor avbøyningen i enkelte kollisjoner kan bli veldig stor (når energien er tilstrekkelig stor).



⁴Rydberg-konstanten R_{∞} var pr 2010 den fysiske konstanten som er mest nøyaktig fastlagt.

⁵I dag vet vi at en atomkjerne generelt består av Z protoner og $N = A - Z$ nøytroner, der Z er atomnummeret, A massetallet og N nøytrontallet. Nøytronene ble “foreslått” av Rutherford (for å forklare at kjerner har en ladning som svarer til Z protoner og en masse som svarer til ca A protoner) og oppdaget av James Chadwick i 1932. Kjerneradiene varierer fra 1 til 10 femtometer ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$) og kan angis ved en empirisk formel $R_n = k \cdot A^{1/3}$, der A er massetallet og den empiriske konstanten k ligger et sted i hogget 1–1.2 fm, avhengig av hvordan en definerer slike “radier”. Dette betyr enkelt sagt at kjerne radien er en faktor 100 000 ganger mindre enn atom-“radien”.

(iii) *Plancks kvantiseringsbetingelse for energioverføring mellom materie og stråling*: Energien stråles ut eller absorberes i kvanta $h\nu = \Delta E$, der $\nu = c/\lambda$ er strålingens frekvens og ΔE er energitapet for materien.

B. Bohrs modell. Bohr bygde modellen sin på følgende ideer:

$$1. \text{ Ideen om stasjonære tilstander:} \quad (\text{T1.10})$$

Elektronene i atomet antas å kunne eksistere i et diskret sett av bevegelsestilstander, hver tilstand med én bestemt energi. I denne antakelsen ligger for det første et *kvantiseringsprinsipp*: Energien kan bare ha diskrete verdier. For det andre innebærer antakelsen også et brudd med klassisk fysikk på et annet punkt: Elektronet, som hele tiden befinner seg i det sterke elektriske feltet fra det tilnærmet punktformede protonet, må ut fra et klassisk synspunkt være i akselerert bevegelse. Ifølge Maxwells ligninger skulle det da miste energi pga elektromagnetisk *utstråling*, akkurat som elektronene i en sender-antenne. Bohr antok at denne klassiske “utstrålings-loven” var opphevet for disse atomære tilstandene, slik at elektronene kunne beholde energien (stasjonære tilstander).

$$2. \text{ Ideen om kvantesprang:} \quad (\text{T1.11})$$

Atomenes diskrete spektrallinjer kunne nå tolkes som resultatet av brå overganger mellom diskrete (stasjonære) energitilstander. I tråd med Plancks antakelse, (iii) ovenfor, antok Bohr at energien som ble til overs ved kvantespranget ble sendt ut i form av et elektromagnetisk kvant (lyskvant) med energi $h\nu = \Delta E$, der ΔE er forskjellen mellom atomenergiene før og etter. Ut fra formelen ovenfor for spektrallinjene for hydrogen ser vi at

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = E_m - E_n = hcR_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad m = n + 1, n + 2, n + 3, \dots$$

Bohrs antakelse svarte derfor til diskrete eksperimentelle energitilstander for hydrogen, som på en additiv konstant nær måtte være

$$E_n = -hcR_\infty \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

der konstanten hcR_∞ numerisk er ca 13.6 eV.

De to ideene ovenfor, om **stasjonære tilstander** og **kvantesprang**, har vist seg å overleve, og er sentrale aspekter i kvantemekanikk. For å komme videre, dvs finne en forklaring på *hvorfor* atom-energiene er diskrete, og forutsi størrelsene av disse energiene, innførte Bohr et par antakelser til, som *ikke* holder vann:

3. *Elektronene beveger seg i sirkelbaner gitt av klassisk mekanikk.* Bohr betraktet hydrogenatomet, hvor elektronets potensielle energi i feltet fra protonet er

$$V(r) = -e \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} \equiv -\frac{k}{r}, \quad \text{med} \quad k \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}.$$

Kraften på elektronet blir da

$$\mathbf{F} = -\nabla V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{\mathbf{e}}_r$$

der minustegnet betyr at kraften er rettet motsatt av enhetsvektoren $\hat{\mathbf{e}}_r$, dvs innover mot protonet. For sirkelbevegelse har en da fra Newtons 2. lov en sentripetal-akselerasjon

$$a = \frac{v^2}{r} = \frac{|\mathbf{F}|}{m_e} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r^2} \equiv \frac{k}{m_e r^2}.$$

Det er da lett å regne ut at hastigheten v , dreieimpulsen $L = mvr$ og energiene K og E blir proporsjonale med henholdsvis $r^{-1/2}$, $r^{1/2}$ og r^{-1} :⁶

$$v(r) = \sqrt{\frac{k}{m_e r}} \propto r^{-1/2},$$

$$L = m_e v r = \sqrt{k m_e r} \propto r^{1/2},$$

$$K(r) = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{2} \frac{k}{r} \propto 1/r,$$

$$E(r) = K(r) + V(r) \left(= \frac{1}{2} V(r) = -K(r) \right) = -\frac{1}{2} \frac{k}{r} \propto 1/r.$$

Denne klassiske beregningen tillater alle verdier (> 0) for baneradien r og (< 0) for energien E . For å få til energikvantisering måtte Bohr derfor til med enda en antakelse, som var *ny og revolusjonerende*. Ved litt prøving og feiling fant han ut at han trengte å anta følgende:

4. *Elektronets dreieimpuls kan bare være et heltallig multiplum av $h/2\pi \equiv \hbar$, dvs*⁷

$$L = mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots$$

En slik kvantisering av dreieimpulsen svarer ifølge relasjonene ovenfor til kvantiserte verdier for radien og energien:

$$L = \sqrt{k m_e r} = n\hbar \implies r = r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{k m_e} = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} \implies$$

$$E_n = -\frac{k}{2r_n} = -\frac{k^2 m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^2 m_e c^2 \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

I formelen for energiene har

$$m_e c^2 = 510\,998.910(13) \text{ eV} \approx 0.511 \text{ MeV} \quad (\text{elektronets hvile(-masse)-energi})$$

dimensjon energi. Da skjønner vi at størrelsen i parentes må være en dimensjonsløs konstant. Denne spiller en sentral rolle i kvantefysikk, og har fått navnet **finstrukturkonstanten**:

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137.035\,999\,679(94)} \quad \left(\begin{array}{c} \text{finstruktur-} \\ \text{konstanten} \end{array} \right). \quad (\text{T1.12})$$

Ved å sette inn finner vi at den laveste energien ifølge Bohrs modell blir

$$E_1 \approx -13.6 \text{ eV},$$

som svarer akkurat til den laveste eksperimentelle energien (for “grunntilstanden”).

Også den minste radien er en sentral størrelse i atomfysikk, og har derfor fått navnet **Bohr-radien**:

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} = 0.529\,177\,208\,59(36) \times 10^{-10} \text{ m} \quad (\text{Bohr-radien}). \quad (\text{T1.13})$$

⁶Merk at med en annen definisjon av konstanten k gjelder disse beregningene også for en satellitt i sirkelbane rundt jorda.

⁷I moderne kvantemekanikk opptrer størrelsen $h/2\pi \equiv \hbar$ (“h-strek”) mye oftere enn selve Plancks konstant h .

Det sensasjonelle ved Bohrs modell var at han klarte å “forklare” størrelsen og $1/n^2$ -avhengigheten til de eksperimentelle hydrogenenergiene, uten å innføre en eneste ny parameter — Plancks konstant gjorde jobben også når det gjaldt å forklare elektronets bevegelsestilstand — den samme konstanten som Planck og Einstein hadde funnet spilte en viktig rolle for *lys*! Da Einstein hørte om dette utbrøt han: “Da er dette en av de største oppdagelser.” (Senere har vi lært oss at Plancks konstant alltid spiller en rolle i kvantefysikk, enten det gjelder partikler eller stråling.)

Nå må vi skynde oss å tilføye at antakelsene 3 og 4 i Bohrs teori har vist seg å være uriktige. Riktignok viser det seg at dreieimpulsen i atomer er kvantisert, og faktisk spiller $\hbar$ en viktig rolle i denne kvantiseringen, men grunntilstanden i hydrogen har dreieimpuls lik null (ikke $\hbar$). Og enda viktigere er det at forestillingen om banebevegelse for de atomære elektronene må oppgis! For å forklare de stasjonære tilstandene i hydrogen og andre atomer bruker vi i dag en teori der partiklene viser *bølgenatur*!

Den klassiske tankegangen (som vi alle er så opphengt i), der partikkelen har en veldefinert bane $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$, må oppgis når det gjelder fenomener på atomært og subatomært nivå.

I de nærmeste årene etter 1913 ble det klart at Bohrs teori — selv om den forsåvidt ga en “forklaring” av energinivåene for hydrogen — hadde liten “predictive power”; den var ikke i stand til å forklare spektrallinjene for tyngre atomer. Det avgjørende skrittet på veien mot en ny teori, kvantemekanikken, ble tatt ved

1.5 de Broglies hypotese (1923)

Straks etter at *bølge-partikkel-dualismen* for lys var spikret fast gjennom Comptons eksperiment, kom franskmannen Louis de Broglie med et revolusjonært forslag: Hva om vi tenker oss en tilsvarende bølge-partikkel-dualisme også for partikler, uttrykt ved de samme relasjonene mellom bølge- og partikkel-parametre som Einstein hadde foreslått for lys?:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \nu = \frac{E}{h} \quad (\text{de Broglies hypotese}). \quad (\text{T1.14})$$

de Broglie foreslo altså at en partikkel med impuls p og energi E kunne ha en slags bølgenatur, som skulle svare til en bølgelengde λ og en frekvens ν .

Denne hypotesen ble av de fleste betraktet som en vill idé, tilsynelatende helt uten forankring i eksperimentelle realiteter. Men de Broglie fant en viss støtte i følgende faktum: Dersom en antar at hver av Bohrs sirkelbaner skal svare til et helt antall bølgelengder:

$$2\pi r = n\lambda = nh/p, \quad n = 1, 2, \dots,$$

så følger det at

$$(L=)pr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar,$$

som jo nettopp var Bohrs kvantiseringsbetingelse. Einstein var en av de få som reagerte positivt i starten.

Men som vi skal se: De Broglies hypotese var likevel startskuddet for en rekke oppdagelser som må betegnes som en *vitenskapelig revolusjon*. I løpet av en hektisk periode på 2–3 år (1924–27) ble hypotesen bekreftet til overmål, gjennom utviklingen av kvantemekanikken som fysisk teori og

eksperimentelle bekreftelser av denne; omveltningen (paradigmeskiftet) av det fysiske verdensbildet som ble startet av Planck, Einstein og Bohr var da fullført.

De første *direkte* eksperimentelle bekreftelsene på de Broglies hypotese ble funnet i 1926–27 av Davisson og Germer og av Thomson (se fotnote side 15 i Hemmer). D & G spredte elektroner på en nikkel-krystall, og fant at intensiteten av spredte elektroner varierte sterkt med vinkelen, analogt med det en ser ved spredning av røntgenstråling på et slikt tredimensjonalt gitter. Dette kunne forklares ved å tilordne elektronene en bølgelengde etter de Broglies oppskrift.

Før den tid skjedde det imidlertid et avgjørende gjennombrudd på den teoretiske siden. Østerrikeren Erwin Schrödinger satte seg som mål å finne en bølgeligning for “de Broglie-bølger”, og kom mot slutten av 1925 fram til en ligning som viste seg å reproducere Bohrs resultater for energinivåene i hydrogenatomet. Dette ga en bekreftelse på de Broglies hypotese: Partikler har også bølgenatur.

Schrödingers bølgeligning har mye større betydning (“predictive power”) enn de Broglies hypotese, og spiller en rolle i kvantemekanikken som godt kan sammenlignes med den rollen Newtons andre lov spiller i mekanikken.

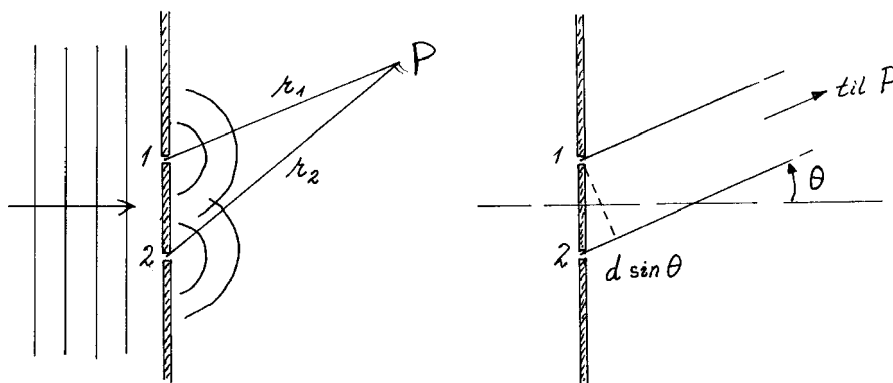
Før vi introduserer Schrödingerligningen skal vi imidlertid se nærmere på et eksperiment som illustrerer partiklers bølgenatur, nemlig et dobbeltspalte-eksperiment med elektroner. Dette eksperimentet ble utført så sent som i 1961, men er mye enklere å tolke enn Davisson og Germers eksperiment.

1.6 Partiklers bølgenatur

Bølgenaturen — både til lys og partikler — kan illustreres veldig tydelig ved hjelp av såkalte dobbeltspalte-forsøk. Vi skal se nærmere på noen slike forsøk, fordi de på en svært direkte måte utfordrer oss på våre klassiske (“makroskopiske”) forestillinger, og viser tydelig noe av forskjellen mellom klassisk fysikk og kvantefysikk.

1.6.a Et dobbeltspalteforsøk med vannbølger

(som *ikke* bør være noen utfordring).



En vannbølge med bølgelengde λ faller inn mot en “demning” med to åpninger 1 og 2, med bredde $b (\ll \lambda)$ og i avstand d .

Med 1 eller 2 åpen finner vi i punktet P (langt unna de to åpningene) en **bølgehøyde**

$$h_i = A(\theta) \cos(kr_i - \omega t), \quad (i = 1, 2),$$

der $A(\theta)$ er en langsomtvarierende funksjon av θ , og som dessuten avtar med avstanden som $1/\sqrt{r}$. **Intensiteten** (energifluksen) blir da proporsjonal med $1/r$:

$$I_i \propto \overline{h_i^2}^t \propto 1/r,$$

slik det *må* være for de halvsirkelformede bølgene som brer seg ut fra åpning 1 eller 2. Merk at intensiteten er proporsjonal med kvadratet av bølgehøyden eller **bølgefunksjonen** (midlet over tiden). Denne bølgefunksjonen er en løsning av **bølgeligningen** for overflatebølger i vann.

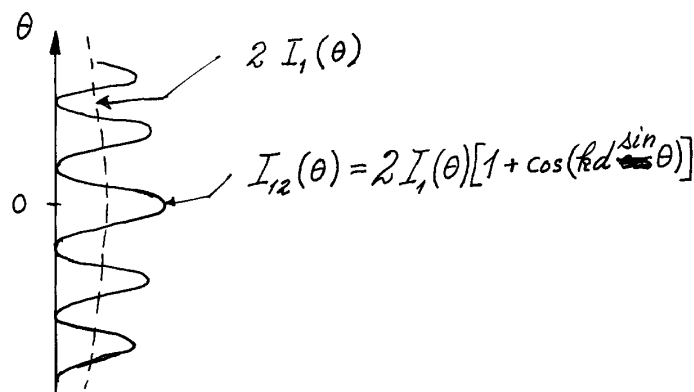
Bølgeligningen for overflatebølger i vann er tilnærmet **lineær** for små bølgehøyder. Dersom vi lar både 1 og 2 være åpne, vil derfor den resulterende bølgehøyden i punktet P være tilnærmet gitt ved summen av h_1 og h_2 (jfr **superposisjonsprinsippet**):

$$h_{12} \approx h_1 + h_2 = A(\theta)[\cos(kr_1 - \omega t) + \cos(kr_2 - \omega t)].$$

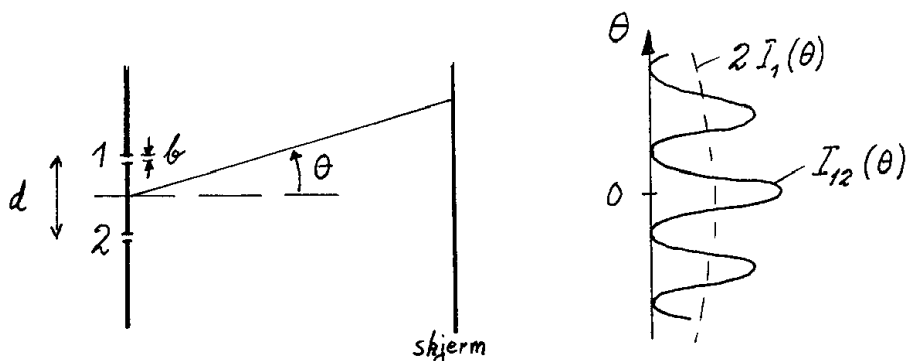
Som kjent får vi her et interferensmønster, med konstruktiv interferens ($h_{12} = 2h_1$ og $I_{12} = 4I_1$) når gangforskjellen for de to delbølgene er et helt antall bølgelengder,

$$r_2 - r_1 = d \sin \theta = n\lambda,$$

og destruktiv interferens ($h_{12} = 0$ og $I_{12} = 0$) når $d \sin \theta = (n + \frac{1}{2})\lambda$.



1.6.b Et dobbeltspalteforsøk med monokromatisk lys (Young, 1802)



Med $b \ll \lambda$ og 1 eller 2 åpen fås også her en intensitetsfordeling $I_i(\theta)$ (på skjermen til høyre) som varierer langsomt med θ . Med begge åpne fås samme type interferensmønster I_{12} som for vannbølgene. Ut fra dette konkluderte Young i 1802 at lys måtte være et bølgefænomen. Dette var det avgjørende anslaget mot Newtons korpuskelteori for lys, som hadde rådd grunnen i ca 100 år.

Merk at Young ikke kunne avgjøre *hva* slags bølge dette er. Det var først gjennom Maxwells arbeid 60 år senere at en forsto at interferens- og bøyningseffektene som bl.a Young og Fresnel hadde observert, kunne forklares ved å betrakte lys som elektromagnetiske bølger, og at bølgefunksjonene som da interfererer er klassiske elektromagnetiske felter.

Lenge etter Young (et godt stykke ut i forrige århundre) lærte en at denne typen eksperiment også kan brukes til å demonstrere lysets ikke-klassiske **partikkelnatur**: Dersom en gradvis reduserer intensiteten til det innfallende lyset, blir intensitetsbildet $I_{12}(\theta)$ like gradvis svakere, men det beholder samme form så lenge vi kan se det. Til slutt blir det usynlig for det blotte øye, men det kan fortsatt registreres, f.eks vha en fotografisk plate (og lang eksponeringstid). (Denne teknikken brukes i astronomi når en skal registrere svært lyssvake objekter.) Ett eneste foton er da tilstrekkelig til å sverte et punkt på filmen. Intensiteten kan nå gjøres så lav at en tydelig merker at det kommer ett og ett foton, som absorberes snart i det ene, snart i det andre punktet, på en nokså tilfeldig måte. Lysets partikkelnatur kommer på denne måten tydelig fram.

At det enkelte fotonet absorberes i et punkt, stemmer jo slett ikke med den klassiske intensitetsfordelingen $I_{12}(\theta)$, og er på en måte i motstrid med den klassiske bølgeteorien. Dette er som vi skjønner en uunngåelig følge av lysets partikkelnatur, som tydeligvis er et kvantefysisk (i motsetning til klassisk) fenomen.

Bølgeteorien er altså ikke i stand til å beskrive hva som skjer med ett foton (eller to eller tre..). Etter hvert som et økende antall fotoner er registrert, vil imidlertid *fordelingen* nærme seg det klassiske interferensmønsteret. Av dette kan vi trekke følgende konklusjon:

Den klassiske bølgeteoriens interferensmønster er gyldig i den forstand at $I_{12}(\theta)$ essensielt gir **sannsynlighetsfordelingen** for hvor fotonene vil havne. Sannsynligheten for å registrere det enkelte fotonet ved vinkelen θ er da

$$P(\theta) \propto I_{12}(\theta).$$

(T1.15)

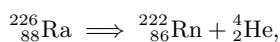
Med denne **sannsynlighetstolkningen** av bølgeteorien blir det ingen motsetning mellom bølge- og partikkel-egenskapene til lyset. Begge egenskaper er til stede på én gang. Bølge-egenskapen er avgjørende for interferensen (både her og ved spredning mot f.eks et gitter eller en krystall, osv). Partikkel-egenskapen kommer fram ved deteksjonen, og også ved f.eks Compton-spredning.

Med denne sannsynlighetsteorien er vi som sagt ikke i stand til å forutsi skjebnen til det enkelte fotonet. Og det finnes heller ikke noen annen teori som er i stand til å gjøre dette. Fotonene, som i utgangspunktet er like, får på denne måten en tilfeldig og uforutsigbar skjebne bak spaltene. Dette elementet av tilfeldighet eller uforutsigbarhet er et helt sentralt trekk ved kvantefysikken, som de fleste av oss har vanskeligheter med å godta ut fra våre klassiske (og deterministiske) forestillinger.

8

Dette har satt grå hår i hodet på mang en fysiker, og har opp gjennom årene vært kilde til mye debatt. Einstein, f.eks, som var en av fedrene til kvantefysikken, kunne aldri helt forsone seg med dette elementet av tilfeldighet. Han siteres ofte for følgende uttalelse: “God does not throw dice” (naturen spiller ikke med terninger). Det har vært gjort forsøk på å lage teorier som kunne fjerne

⁸Dette trekket ved kvantefysikken kommer også fram dersom vi betrakter en samling α -radioaktive atomkjerner, f.eks av radium-isotopen $^{226}_{88}\text{Ra}$. Disse ustabile kjernene, som desintegrerer ved å sende ut en α -partikkel (heliumkjerne),



er i utgangspunktet helt identiske. Likevel desintegrerer de ikke samtidig. Vi kan måle den gjennomsnittlige levetiden, som er 1620 år, og finne en fordelingsfunksjon for levetiden, men vi har ingen mulighet for å forutsi hvor lenge hver enkelt kjerne vil leve. Merk også at etter at f.eks halvparten av kjernene har desintegrert, ved et visst tidspunkt, så er den gjennomsnittlige levetiden for de gjenværende kjernene (regnet fra dette tidspunktet) fortsatt 1620 år. Det er altså ingen forskjell på den halvparten som desintegrerte først og de gjenværende kjernene.

tilfeldigheten (hidden variables). Men så langt ser det ut til at dette er et trekk ved kvantefysikken som ikke kan elimineres. (Stikkord her er Bells ulikheter, kombinert med eksperimenter, som til sammen ser ut til å vise at “tilfeldigheten” er et trekk ved kvantefysikken som vi bare må leve med.)

1.6.c Et dobbeltspalteforsøk med elektroner

Dobbeltspalte-eksperimenter med elektroner spilte absolutt ingen rolle i den historiske utviklingen av kvantemekanikken, men tas med her fordi den fysiske tolkningen er så enkel.⁹ Mens en for synlig lys klarer seg med en spaltebredde av størrelsesorden $1\text{ }\mu\text{m}$, kreves det for partikler mye trangere spalter (og mindre avstand d), fordi partiklenes de-Broglie-bølgelengde lett blir veldig liten. For ikke-relativistiske elektroner finner en ved innsetting i de Broglies formel at

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_{kin}}} = \frac{h}{m_e c} \sqrt{\frac{m_e c^2}{2E_{kin}}} = \lambda_C \sqrt{\frac{511000\text{ eV}}{2E_{kin}}},$$

altså

$$\lambda = \frac{h}{p} = 12.264\text{ Å} \sqrt{\frac{1\text{ eV}}{E_{kin}}} \quad \left(\begin{array}{l} \text{de-Broglie-bølgelengden} \\ \text{for ikke-rel. elektroner} \end{array} \right). \quad (\text{T1.16})$$

Selv med en kinetisk energi på bare 1 eV blir altså λ så liten som ca 12 Å. Så langsomme elektroner er vanskelige å håndtere eksperimentelt. I praksis må en derfor bruke høyere energi og dermed enda mindre bølgelengder. Det første dobbeltspalteforsøket som jeg har sett referert ble derfor gjort så sent som i 1961 (C. Jönsson).

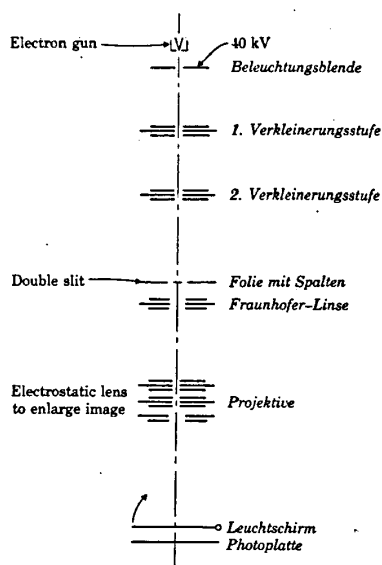


Figure 24-10. C. Jönsson's experimental arrangement for obtaining double slit interference pattern of electrons. [C. Jönsson, Z. Phys., 161 (1961)]

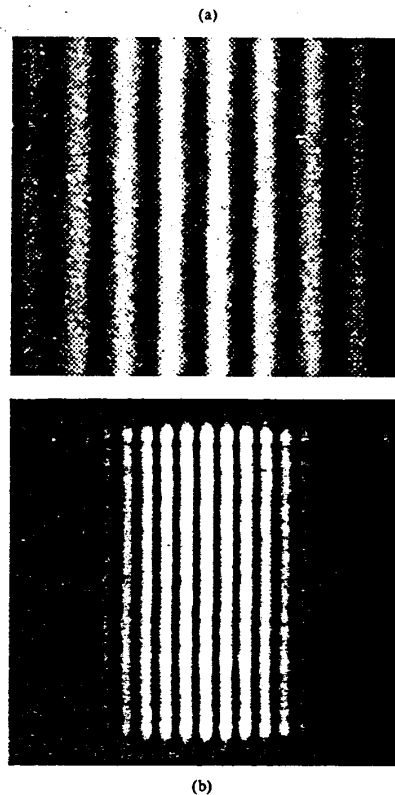


Figure 24-11. (a) A double slit interference pattern of electrons. Each grain in the photographic negative is produced by a single electron. For comparison, (b) is the double slit interference pattern of light shown in Figure 22-17. In this photo, each grain in the negative is produced by a single photon. [Photo (a) by Professor C. Jönsson, University of Tübingen]

⁹Bølgens naturen til elektroner ble demonstrert i eksperimenter som ble utført i 1926–27 av Davisson & Germer og av G.P. Thomson. Som nevnt side 15 i Hemmer oppdaget en i begge tilfeller interferenseffekter ved spredning på krystallinske stoffer. Dette er analogt med den interferenseffekten en observerer ved spredning av lys mot et gitter.

Resultatet er akkurat som for lys: Med én spalte åpen fås en bred intensitetsfordeling $I_1(\theta)$. Med begge spalter åpne observeres et interferensmønster, og dette mønsteret er det samme enten elektronene kommer i strie strømmer eller bare ett og ett. (Se figuren ovenfor.) For visse verdier av θ kommer det altså ingen elektroner (dvs færre enn med bare én spalte åpen), og for andre verdier av θ kommer det opp mot fire ganger så mange elektroner som med bare én spalte åpen.

Den eneste gangbare tolkningen viser seg å være at vi også her har å gjøre med et bølgefænomen. Ved å måle avstanden mellom interferens-stripene, kan en regne seg fram til en bølgelengde λ . Det viser seg at denne stemmer med de Broglies formel (se ovenfor).

Spørsmålet blir da: Hva slags *bølgefunksjon* er det som har denne bølgelengden? Her er vi i samme situasjonen som Young og Fresnel tidlig på 1800-tallet. Disse visste ikke at lys kan assosieres med elektromagnetiske bølger, og måtte derfor *finne opp* en (abstrakt) bølgefunksjon, som de superponerte og deretter kvadrerte for å finne intensiteten $I_{12}(\theta)$.

Akkurat det samme tvinges vi nå til å gjøre for elektronene: Med elektronene som kommer inn mot spaltene assosierer vi en abstrakt bølgefunksjon, den harmoniske planbølge^{10, 11}

$$\Psi = C \exp[2\pi i(\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}/\lambda - \nu t)] = C \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] = C \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar].$$

Bak de to spaltene vil vi da få to (like abstrakte) sylinderbølger,

$$\Psi_i = A(\theta) e^{i(kr_i - \omega t)}, \quad i = 1, 2.$$

Ved å superponere disse og ta absoluttkvadratet,

$$|\Psi_{12}|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2,$$

får vi en funksjon som reproducerer formen på det observerte interferensmønsteret.

Igjen er det slik at hvert elektron observeres i et punkt (sverter et punkt på filmen). Interferensmønsteret kommer fram først etter at vi har registrert et stort antall elektroner. (Se illustrasjonen side 18 i Hemmer.) Vi kan derfor slå fast at den merkelige bølgefunksjonen vår ikke forutsier hvor det enkelte elektronet vil havne. Men den fører fram til den korrekte sannsynlighetsfordelingen $P(\theta) \propto |\Psi_{12}|^2$, analogt med situasjonen for lys.

Den *dårlige* nyheten er altså at vi tvinges til å godta en teori som begrenser seg til **sannsynlighetsutsagn**. Den *gode* nyheten er at lyskvanter og partikler viser en oppførsel som ihvertfall i denne sammenhengen er nokså lik. Men her må det tilføyes at det er vesentlige forskjeller mellom de to når vi går nærmere inn på den kvantemekaniske beskrivelsen. For elektromagnetisk stråling fant Maxwell at den abstrakte bølgefunksjonen til Young og Fresnel kunne erstattes med det elektriske feltet, som i prinsippet er en målbar størrelse (for makroskopiske felter). For partikler viser det seg at Ψ ikke *kan* være målbar.

Vi må derfor venne oss til å tenke på bølgefunksjonen Ψ som et *abstrakt begrep*, som eksisterer bare i vår *teoretiske beskrivelse*, og som ikke er en del av den fysiske virkeligheten.

(T1.17)

¹⁰Vi skal komme tilbake til hvorfor vi denne gangen velger en kompleks bølgefunksjon, istedenfor en cosinus eller en sinus.

¹¹Uttrykt ved bølgetallet k og vinkelfrekvensen ω , kan de Broglies hypotese, $\lambda = h/p$ og $\nu = E/h$, skrives på den enkle formen

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} \equiv \frac{p}{\hbar}, \quad \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar},$$

der

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \quad (\text{“h-strek”}).$$

Forplantningsretningen $\hat{\mathbf{k}}$ er bevegelsesretningen for de innkommende elektronene: $\mathbf{p} = p\hat{\mathbf{k}} = \hbar k \hat{\mathbf{k}} \equiv \hbar \mathbf{k}$.

Er da elektronet en bølge eller en partikkel? Svaret er at det har bølgenatur, bl.a i den forstand som er beskrevet ovenfor. Men det har også partikkelnatur, som manifesterer seg bl.a når vi prøver å lokalisere det (vha filmen, eller på annen måte). Som for fotoner finner vi altså for elektroner (og andre partikler) bølge-partikkel-dualisme.

Går det enkelte elektronet gjennom én av spaltene eller gjennom begge? Her blir vi kanskje svar skyldig. Det som er helt sikkert er at begge spaltene må være åpne for at vi skal observere interferensmønsteret. Like sikkert er det at ingen har observert “halve” elektroner. (Det samme gjelder forøvrig for fotoner.) Prøver en å *observere* hvilken spalte elektronet går gjennom, så er dette mulig. En vil da *enten* observere elektronet ved spalte 1 *eller* ved spalte 2, aldri på begge steder samtidig. *Men*, en slik registrering forstyrrer elektronet så mye at interferensmønsteret blir borte: Vi har med andre ord et helt annet eksperiment. For et eksperiment *der interferensmønsteret observeres* kan vi derfor ikke svare på spørsmålet ovenfor. Dette er ett av mange eksempler på at spørsmål som det er helt naturlig å stille ifølge klassisk og “makroskopisk” tankegang, ikke lar seg besvare for den submikroskopiske og kvantefysiske verden. Det er også et eksempel på at en observasjon på et kvantefysisk system nesten alltid forstyrrer (endrer) **tilstanden** til systemet.

Oppgave 7:

a. Regn ut de Broglie-bølgelengden λ for elektroner med en kinetisk energi på 200 eV. [Svar: ca 0.9 Å.]

b. Anta at elektroner i et fjernsynsrør har kinetisk energi 20 keV, altså en faktor 100 større enn i pkt. **a**. Hva blir (det ikke-relativistiske resultatet for) bølgelengden i dette tilfellet? [Svar: En faktor 10 mindre enn i pkt. **a**.]

c. Bruk den relativistiske formelen $p = \sqrt{E^2/c^2 - m_e^2 c^2}$ (der $E = E_{kin} + m_e c^2$) til å vise at forholdet mellom den relativistiske (dvs korrekte) verdien for impulsen p og den ikke-relativistiske verdien ($p = \sqrt{2m_e E_{kin}}$) er $\sqrt{1 + E_{kin}/2m_e c^2}$. Hvor stor er da den relative feilen i bølgelengden i pkt. **b**? [Svar: Den korrekte verdien for bølgelengden er ca 1 prosent mindre enn verdien i pkt. **b**.]

1.7 Bølgeligninger. Motivasjon av Schrödingerligningen

Vi har nevnt at bølger i vann beskrives av en bølgeligning. Radiobølger, lysbølger og elektromagnetiske bølger generelt beskrives av den klassiske bølgeligningen, som følger fra Maxwells ligninger. Det er da naturlig å spørre seg (slik Schrödinger gjorde i 1925): Hva slags bølgeligning er det som har de Broglies abstrakte bølger som løsninger?

1.7.a Fri partikkel, skarpt definert impuls $\mathbf{p} = \hat{e}_x p_x + \hat{e}_y p_y + \hat{e}_z p_z$ og $E = \mathbf{p}^2/2m$

For en fri partikkel med veldefinert impuls $\mathbf{p}$ og kinetisk energi $E = \mathbf{p}^2/2m$ — f.eks elektronene som faller inn mot skjermen med de to spaltene — skal vi se at det er lett å finne en slik bølgeligning. Vi så at de Broglies hypotese,

$$\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar \quad \text{og} \quad \omega = E/\hbar, \quad (\text{de Broglies hypotese}) \quad (\text{T1.18})$$

svarer til en planbølge på formen

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \propto e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar} = e^{i(p_x x + p_y y + p_z z - Et)/\hbar}.$$

Som Schrödinger kan vi spørre oss: Hva er den enkleste differensialligningen som oppfylles av denne planbølgen Ψ ? For å finne svaret skal vi først innføre noen matematiske operatører som spiller en helt sentral rolle i kvantemekanisk teori, nemlig

$$\hat{p}_x \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad \text{og} \quad \hat{p}_z \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (\text{T1.19})$$

Oppgave 8:

A) Når en operator virker på en funksjon, fås vanligvis en *ny* funksjon. Hva blir f.eks resultatene om du lar operatoren $\partial/\partial x$ virke på funksjonene $\exp(-x^2)$, $\sin kx$ og $\cos kx$?

B) Det *kan* også hende at en operator anvendt på en funksjon gir som resultat samme funksjon multiplisert med en konstant. Funksjonen kalles da en egenfunksjon til vedkommende operator, og konstanten kalles en egenverdi til operatoren. Vis f.eks at $\exp(ikx) = \cos kx + i \sin kx$ er en egenfunksjon til operatoren $\hat{p}_x = (\hbar/i)\partial/\partial x$, og finn egenverdien.

C) Vis at funksjonen $e^{-x^2/2}$ er en egenfunksjon til operatoren $\hat{h} = -\frac{1}{2}d^2/dx^2 + \frac{1}{2}x^2$ og bestem egenverdien.

Ved å la operatoren $\hat{p}_x$ virke på funksjonen Ψ ser vi at

$$\hat{p}_x \Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{i(p_x x + p_y y + p_z z - Et)/\hbar} = \frac{\hbar}{i} \frac{i p_x}{\hbar} \Psi = p_x \Psi. \quad (\text{T1.20})$$

Denne ligningen er en såkalt **egenverdiligning**, på formen

$$\text{Operator} \cdot \Psi = \text{egenverdi} \cdot \Psi, \quad (\text{T1.21})$$

og innebærer at funksjonen Ψ er en **egenfunksjon** til operatoren $\hat{p}_x$ med **egenverdi** lik impuls-komponenten p_x . Tilsvarende finner vi at

$$\hat{p}_y \Psi = p_y \Psi, \quad \hat{p}_z \Psi = p_z \Psi \quad \text{og} \quad \hat{\mathbf{p}} \Psi = \mathbf{p} \Psi,$$

der ¹²

$$\hat{\mathbf{p}} \equiv \hat{\mathbf{e}}_x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{e}}_y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{e}}_z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \equiv \frac{\hbar}{i} \nabla \quad \text{og} \quad \mathbf{p} = \hat{\mathbf{e}}_x p_x + \hat{\mathbf{e}}_y p_y + \hat{\mathbf{e}}_z p_z. \quad (\text{T1.22})$$

Disse egenverdiligningene er et viktig delresultat, som vi får mye bruk for i dette kurset:

Den abstrakte planbølgen Ψ , som “beskriver” en partikkel (eller partikler) med skarpt definert impuls $\mathbf{p}$, med komponenter p_x, p_y, p_z , er en egenfunksjon til operatorene $\hat{\mathbf{p}}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$, og egenverdiene er nettopp $\mathbf{p}, p_x, p_y, p_z$.

(T1.23)

Vi kaller disse operatorene for **impuls-operatorer**. I samme slengen kan vi introdusere også en **energi-operator**,

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2,$$

¹²Her er $\hat{\mathbf{e}}_x$ osv enhetsvektorer, mens “hatten” over $\mathbf{p}$ og ellers betyr at $\hat{\mathbf{p}}$ er en operator.

som spiller om mulig en enda mer sentral rolle i kvantemekanikk. Da $\hat{p}_x^2 \Psi = \hat{p}_x(p_x \Psi) = p_x^2 \Psi$, har vi åpenbart

$$\hat{H}\Psi = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \Psi = E\Psi.$$

Ψ er altså en egenfunksjon til operatoren $\hat{H}$ med (den kinetiske) energien som egenverdi. Vi skal etter hvert bli godt kjent med energioperatoren, som generelt kalles **Hamilton-operatoren**. (Derfor betegnelsen $\hat{H}$.)

Neste punkt på programmet er å merke seg at Ψ [proporsjonal med $\exp(-iEt/\hbar)$] også er en egenfunksjon til operatoren $\partial/\partial t$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{iE}{\hbar} \Psi.$$

Tar vi med en ekstra faktor $i\hbar$, ser vi at

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E \Psi.$$

Ved å sammenholde med relasjonen $\hat{H}\Psi = E\Psi$ kan vi altså konstatere (slik Schrödinger gjorde) at de Broglies planbølge Ψ oppfyller følgende partielle differensialligning:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi.} \quad \left(\begin{array}{l} \text{Schrödingerligningen} \\ \text{for en fri partikkel} \end{array} \right) \quad (\text{T1.24})$$

Dette er **Schrödingerligningen** for en fri partikkel, den enkleste differensialligningen som oppfylles av de Broglies planbølger. Og denne enkleste ligningen har vist seg å være den som *fungerer* (under ikke-relativistiske forhold). Et viktig poeng ved “utledningen” ovenfor er å merke seg måten den imaginære enheten i dukket opp på. Vi ser at faktoren i er en uunngåelig følge av at den ikke-relativistiske energi-impuls-relasjonen $E = \mathbf{p}^2/2m$ er lineær i E og kvadratisk i $\mathbf{p}$. Det er dette som tvinger fram en kompleks bølgeligning og komplekse bølgefunksjoner. Og det betyr at hverken realdelen eller imaginærdelen av den komplekse funksjonen Ψ oppfyller bølgeligningen hver for seg.

Det er lett å generalisere til et tilfelle der partikkelen beveger seg i et konstant potensial V , slik at¹³

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V \quad (V = \text{konstant}).$$

I tråd med de Broglie setter vi igjen $\Psi = \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar]$ og finner at Ψ nå er en egenfunksjon til Hamilton-operatoren $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V$,

$$\hat{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi = E\Psi,$$

mens

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi,$$

som før. Planbølgen Ψ oppfyller altså i dette tilfellet en Schrödingerligning på formen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi.$$

Vi merker oss at “oppskriften” for å komme fram til Hamilton-operatoren

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

er som følger: Uttrykk den klassiske energien ($K+V$) ved koordinater og impulser. Erstatt impulsen p_x ved $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ osv. Dette kan vi kalle “Schrödingers oppskrift”.

¹³I kvantemekanikk bruker vi som regel betegnelsen potensial om potensiell energi.

1.7.b Partikkel påvirket av kraft $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$

Her sto Schrödinger overfor en utfordring. I et kraftfelt vil en partikkel med veldefinert energi E ha en variabel impuls

$$|\mathbf{p}(\mathbf{r})| = \sqrt{2m[E - V(\mathbf{r})]},$$

ifølge klassisk mekanikk. Oppskriften til de Broglie blir da ubrukbar; definisjonen av en bølgelengde krever en harmonisk bølge, som bare er relevant i kraftfritt rom. Schrödingers forslag til løsning var: La oss prøve med en bølgeligning med samme form som ovenfor,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \Psi \equiv \hat{H}\Psi \quad (\text{Schrödingerligningen}),$$

(T1.25)

der $V(\mathbf{r})$ nå avhenger av $\mathbf{r}$. Schrödinger gikk straks i gang med å teste denne enkle *hypotesen*, for ettertiden kjent som **(den tidsavhengige) Schrödingerligningen**, på den sentrale problemstillingen i atomfysikk:

Hva er det som hindrer atomene i å “klappe helt sammen”, pga tiltrekningen mellom positive og negative ladninger?

Hva er det f.eks som hindrer elektronet i H-atomet i å “falle” inn mot kjernen (protonet), under kontinuerlig emisjon av elektromagnetisk stråling, slik en ville vente ut fra klassisk mekanikk og elektrodynamikk?

I løpet av kort tid viste det seg at Schrödingerligningen sammen med noen enkle kvantemekaniske “regler” ga svaret på dette og andre spørsmål knyttet til kvantefysiske fenomener. Dermed var **kvantemekanikk** etablert som fysisk teori. I kapittel 2 skal vi se nærmere på hvordan denne teorien kan formuleres. Men først litt mer om det historiske.

I 1925 var det klart at Bohrs idé om **stasjonære tilstander** med **kvantiserte energier** for f.eks H-atomer kunne betraktes som et *eksperimentelt faktum*. I hver slik stasjonær tilstand er energien til H-atomet veldefinert, gitt ved en av verdiene

$$E_n = -\frac{1}{2}\alpha^2 \frac{m_e c^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{T1.26})$$

Tilstanden med den laveste energien, $E_1 = -13.6$ eV, kalles **grunntilstanden**. Et H-atom kan befinne seg i grunntilstanden til evig tid, dersom det ikke forstyrres. Men atomer kan også **eksiteres**, f.eks til første eksiterte nivå, $E_2 = E_1/4 \approx -3.4$ eV, ved bestråling av fotoner med passende energi $h\nu = E_2 - E_1$, eller via termisk eksitasjon (varm hydrogengass). Eksiterte atomer vil før eller senere hoppe tilbake til lavereliggende nivåer, under emisjon av fotoner som tar vare på den frigjorte energien. Balmers spektrallinjer, f.eks, skyldes overganger mellom nivåene E_n og nivået E_2 (som gir fotoner innenfor det synlige bølgelengdeområdet). Slike overganger skjer brått, i tråd med Bohrs idé om **kvantesprang**.

Det var også klart i 1925 at de øvrige aspektene ved Bohrs modell *ikke* holdt vann. Særlig gjaldt dette forsøket på å beskrive elektronenes bevegelse vha sirkelbaner (og senere ellipsebener), som ikke fungerte for fler-elektron-atomer. Det var derfor naturlig for Schrödinger å undersøke om bølgeligningen hans kunne ha noe for seg for atomer.

Schrödinger konsentrerte seg om hydrogenatomet (det enkleste atomet), som litt forenklet består av et elektron med masse m_e som beveger seg i det elektrostatisk feltet fra det “tilnærmet uendelig tunge” protonet. Dette feltet svarer til et elektrostatisk potensial $U(r) = e/(4\pi\epsilon_0 r)$. Den

potensielle energien til elektronet (kalt potensialet i kvantemekanikk) er da¹⁴

$$V(r) = -eU(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (\text{Coulomb-potensialet}).$$

Schrödinger lette først etter løsninger av egenverdligningen

$$\boxed{\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})} \quad \left(\begin{array}{c} \text{Schrödingers tidsuav-} \\ \text{hengige ligning} \end{array} \right), \quad (\text{T1.27})$$

for ettertiden kjent som **Schrödingers tidsuavhengige ligning**. For hver slik energi-egenfunksjon $\psi(\mathbf{r})$ som en er i stand til å finne, er det lett å se at funksjonen

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$$

oppfyller den tidsavhengige Schrödingerligningen. [Oppgave: Kontrollér dette.] Å finne disse egenfunksjonene ($\psi(\mathbf{r})$) er et rent matematisk problem, som Schrödinger taklet nokså raskt, og som vi skal takle ikke fullt så raskt senere i dette kurset.

Det viser seg at ligningen ovenfor har egenfunksjoner for alle egenverdier $E > 0$. For $E < 0$, derimot, som svarer til bundne tilstander for elektronet og protonet, fant Schrödinger at ligningen har egenfunksjonsløsninger bare for et **diskret sett av energieigenverdier**, og dette settet viste seg å være nettopp de “eksperimentelle” energiene gitt ovenfor!

For å gi en liten idé om den **kvantemekaniske beskrivelsen** av hydrogenatomet må vi si litt om egenfunksjonene som hører sammen med hver av disse energi-egenverdiene. For den laveste energien, $E_1 = -13.6$ eV, fant Schrödinger én egenfunksjon til energioperatoren $\hat{H}$, på formen

$$\psi_1(r) = C_1 e^{-r/a_0} \quad \text{med} \quad a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2 m_e} = \text{Bohr-radien}, \quad (\text{T1.28})$$

og dermed en “bølgeløsning” av den tidsavhengige Schrödingerligningen på formen

$$\Psi_1(r, t) = C_1 e^{-r/a_0} e^{-iE_1 t/\hbar}. \quad (\text{T1.29})$$

Her er r avstanden fra origo (protonet) til elektronet. Denne “bølgefunksjonen” er altså en kulesymmetrisk (r -avhengig) funksjon med maksimum inne ved protonet, multiplisert med det komplekse tallet $\exp(-iE_1 t/\hbar)$, som løper rundt den komplekse enhets-sirkelen for økende t . Vi merker oss at Hamilton-operatoren $\hat{H}$ ikke har noen egenfunksjon med lavere egenverdi enn energien E_1 . (E_1 er den laveste egenverdien.) For den nest laveste energien, $E_2 \approx -3.4$ eV, fant Schrödinger fire uavhengige egenfunksjoner, hvorav tre avhenger av vinklene (θ, ϕ) , i tillegg til r , mens den fjerde avhenger bare av r , dvs er kulesymmetrisk.

Schrödinger kunne altså konstatere at bølgeligningen hans hadde et spesielt sett med løsninger, på formen $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$. Disse er (hele tiden) egenfunksjoner til den mystiske energioperatoren $\hat{H}$, og det var jo veldig lovende at egenverdiene er akkurat de diskrete energiene som en finner eksperimentelt for de stasjonære tilstandene. Dette er enkle matematiske fakta, som i første omgang kanskje vil virke noe uvante, men som er lette å forholde seg til når en er blitt litt mer drevn i faget.

Den virkelige utfordringen ligger i å bli fortrolig med den *fysiske tolkningen* av alt dette. Vi skjønner at den merkelige, komplekse “bølge”-løsningen Ψ_1 må ha noe å gjøre med den stasjonære

¹⁴Vi velger altså “nullpunktet” for potensialet slik at $V = 0$ for $r = \infty$. Dette betyr at bundne tilstander svarer til negativ potensiell energi, og negativ totalenergi.

grunntilstanden for hydrogenatomet, men hva har denne merkelige *funksjonen* å gjøre med den *fysiske tilstanden*?

Dette var slett ikke klart for Schrödinger heller. Etter en tid (i 1926) kom det et konstruktivt forslag fra Max Born. Han foreslo at absoluttverdikvadratet $|\Psi_1(r, t)|^2$ gir **sannsynlighetsfordelingen** for elektronets posisjon. (Jamfør den tilsvarende tolkningen i vår diskusjon av dobbeltspalte-eksperimentet.) Siden fasefaktoren $\exp(-iE_1t/\hbar)$ er et komplekst tall på enhetssirkelen, er absoluttverdien av dette tallet lik 1. (Når a er et reelt tall, har vi generelt at $|\exp(ia)|^2 = \exp(-ia)\exp(ia) = 1$.) Fasefaktoren er altså uten betydning for sannsynlighetstettheten, som dermed blir **tidsuavhengig**,

$$|\Psi_1(r, t)|^2 = |C_1|^2 e^{-2r/a_0}.$$

Og dette er jo bra når vi har å gjøre med en fysisk tilstand som er stasjonær (uforanderlig).

Inspirert av dette skal vi fra nå av kalle løsninger av Schrödingerligningen på formen

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (\text{T1.30})$$

for **stasjonære løsninger**.

Hva betyr det at $|\Psi_1|^2$ er sannsynlighetstettheten for elektronets posisjon? Svaret er, i analogi med definisjonen av f.eks massetetthet, at sannsynlighetstettheten multiplisert med et volumelement d^3r ,

$$|\Psi_1(r, t)|^2 d^3r,$$

gir sannsynligheten for å finne elektronet i dette volumelementet. Sannsynligheten for å finne elektronet et eller annet sted er selvsagt lik 1. Derfor må bølgefunksjonen oppfylle **normeringsbetingelsen**

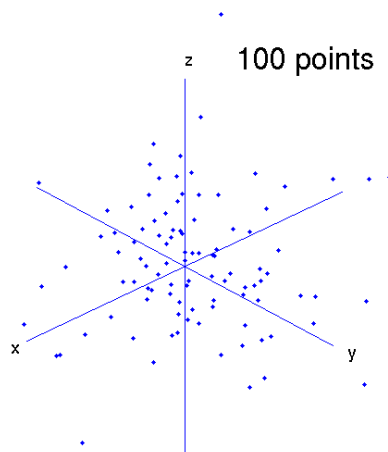
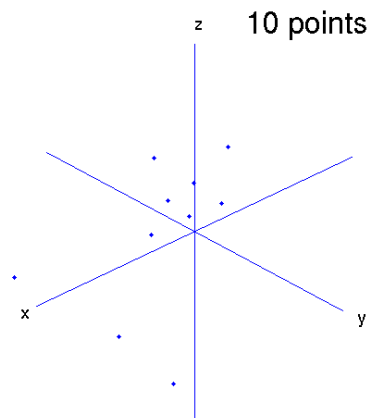
$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (\text{normeringsbetingelsen}), \quad (\text{T1.31})$$

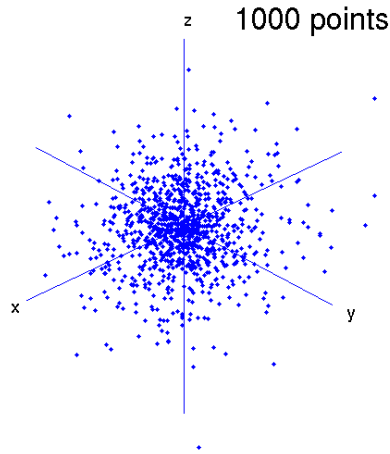
der integralet går over hele rommet. Denne betingelsen kan oppfylles med et passende valg av normeringskonstanten C_1 .

For å få litt bedre tak på dette kan vi tenke oss at vi preparerer et stort antall H-atomer i tilstanden Ψ_1 (grunntilstanden), og for hvert av dem gjør en måling av posisjonen til elektronet. Analogt med dobbeltspalte-eksperimentet kan vi da ikke forutsi resultatet av en enkeltmåling. Men *fordelingen* av de målte posisjonene vil for et stort antall målinger stemme godt med den teoretiske sannsynlighetsfordelingen

$$|\Psi_1(r, t)|^2 = |C_1|^2 e^{-2r/a_0}.$$

Figurene nedenfor illustrerer simulerte resultater av tre slike måleserier, med henholdsvis 10, 100 og 1000 “målte” posisjoner. Disse resultatene er laget ved hjelp av et matlab-program som gjør bruk av bl.a en tilfeldig-tall-generator. Legg merke til at resultatene (de målte posisjonene) ligger tette i sentrum (nær protonet), hvor jo sannsynlighetstettheten $|\Psi_1|^2$ er størst.





Selv om både Schrödinger og Einstein opponerte sterkt, har Borns merkelige tolkning av bølgefunksjonen vist seg å holde vann. Med sannsynlighetstettheten ovenfor er det f.eks en enkel sak å beregne slike ting som forventningsverdien av r ,

$$\langle r \rangle \equiv \int r |\Psi_1|^2 d^3r = \dots = \frac{3}{2}a_0. \quad (\text{T1.32})$$

Det er også lett å vise at

$$\langle 1/r \rangle \equiv \int \frac{1}{r} |\Psi_1|^2 d^3r = \frac{1}{a_0}. \quad (\text{T1.33})$$

Dette betyr at den midlere potensielle energien for elektronet i grunntilstanden er

$$\langle V \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle 1/r \rangle = \dots = 2E_1 = -27.2 \text{ eV}. \quad (\text{T1.34})$$

[Oppgave: vis dette.]

Blir vi spurt hvor *stort* et isolert H-atom er, skjønner vi nå at det er vanskelig å gi et klart svar, for det er jo en viss sannsynlighet for å finne elektronet i *stor* avstand fra protonet. Svaret vårt må bli å opplyse om slike ting som at $\langle r \rangle = 3a_0/2$ og $\langle 1/r \rangle^{-1} = a_0$. Ut fra dette er det ikke urimelig å si at Bohr-radien $a_0 = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$ er et slags *mål for størrelsen* av et H-atom.

For de eksiterte tilstandene (for $n = 2, 3, 4, \dots$) viser det seg at utstrekningen er større; en finner at $\langle 1/r \rangle^{-1} = n^2 a_0$. Så grunntilstanden har altså lavest energi og minst utstrekning. Dermed kan vi slå fast at den kvantemekaniske forklaringen på at hydrogenatomet ikke “klapper sammen” er som følger: Det finnes ikke stasjonære løsninger av den tidsavhengige Schrödingerligningen for H-atomet med energier lavere enn $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ (og med mindre utstrekning enn den vi finner for løsningen Ψ_1).

Noen kommentarer

(i) Ut fra erfaringer med bevegelsen til makroskopiske objekter er det naturlig å tenke seg at det må gå an å beskrive elektronets bevegelse i nærheten av protonet vha en klassisk bane, $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$, slik også Bohr prøvde. Men kvantemekanikken sier at dette er umulig. For fenomener på atomær eller subatomær skala kommer klassisk mekanikk til kort. Det eneste vi har å holde oss til er bølgefunksjonen for den aktuelle fysiske tilstanden, som gir oss en sannsynlighetsfordeling for posisjonen.¹⁵ Posisjonen kan i prinsippet måles. Og siden (absoluttkvadratet av) bølgefunksjonen gir en sannsynlighetsfordeling, skjønner vi at kvantemekanisk teori ikke er i stand til å forutsi resultatet av en enkelt måling. Teorien har altså hva vi kan kalle en **statistisk karakter**. Det teorien kan forutsi er fordelingen av et stort antall målte posisjoner.

(ii) Betegnelsen bølgefunksjon kan få en til å tro at Ψ beskriver en *fysisk bølge*, men slik er det altså ikke. Som nevnt side 16 er “bølgen” Ψ en abstrakt affære, som ikke må oppfattes som en del av det fysiske systemet. Denne abstrakte bølgen eksisterer bare i vår *teoretiske beskrivelse* av dette systemet. Dette gjenspeiler seg bl.a ved at *fasen* til den komplekse bølgefunksjonen ikke kan relateres til noe som er målbart. (I motsetning til fasen til f.eks en havbølge.)

(iii) For å illustrere det siste kan vi regne ut fasehastigheten til en de Broglie-bølge som forplanter seg i x -retningen,

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

der $E = p^2/2m + V$, med $V = \text{konstant}$. Fra bølgeteorien vet vi at fasehastigheten til en slik bølge er $v_f = \omega/k$. Antar vi $V = 0$, fås da en fasehastighet

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2}v,$$

der $v = p/m$ er den klassiske hastigheten til en partikkel med masse m og impuls p . Antar vi $V \neq 0$, blir resultatet enda mer mystisk:

$$v_f = \frac{E}{p} = \frac{p^2/2m + V}{p} = \frac{1}{2}v + V/p.$$

Moralen er at fasehastigheten, og mer generelt fasen til en hvilken som helst kvantemekanisk bølgefunksjon, ikke svarer til en fysisk målbar størrelse og ikke kan tillegges noen fysisk betydning.

(iv) Den plane de Broglie-bølgen ovenfor har uendelig utstrekning, og er derfor ikke normerbar til 1 (eller **kvadratisk integrerbar**, som vi også sier). Men dette kan vi reparere ved å lage oss en **bølgegruppe**. Siden den tidsavhengige Schrödingerligningen er både **lineær** og **homogen**, gjelder **superposisjonsprinsippet**:

En sum av to løsninger av Schrödingerligningen er også en løsning.

$$\left(\begin{array}{c} \text{superposisjons-} \\ \text{prinsippet} \end{array} \right). \quad (\text{T1.35})$$

Dette gjelder også om vi erstatter summen med et integral:

$$\Psi(x, t) = \int \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (k = p/\hbar, \omega = \hbar k^2/2m). \quad (\text{T1.36})$$

¹⁵I kapittel 2 skal vi se at bølgefunksjonen også inneholder informasjon ut over dette. Og vi skal lære at bølgefunksjonen inneholder all den informasjonen som det er mulig å ha om et fysisk system, f.eks H-atomet i grunntilstanden.

Her er $\phi(k)$ en glatt og pen fordeling av bølgetall omkring en sentral verdi k_0 . (Dette svarer ifølge de Broglie til impulser fordelt omkring en sentral verdi $p_0 = \hbar k_0$.) Fra bølge teorien vet vi da at gruppehastigheten til bølgegruppen $\Psi(x, t)$ blir

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} \equiv v_0. \quad (\text{T1.37})$$

På denne måten går det an å lage seg en bølgegruppe som er normerbar, slik at

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

(Vi forenkler her til én dimensjon.) Vi har altså her en sannsynlighetsfordeling som beveger seg med en fornuftig hastighet (v_0), og det måtte vi selvsagt også kreve av en slik bølgegruppe. Denne abstrakte bølgegruppen skal jo representere et ensemble av partikler som vi kan tenke oss er “skutt ut” av en partikkelkanon med impulser fordelt omkring verdien p_0 .

(v) Tilbake til H-atomet i grunntilstanden. Selv om tilstanden er stasjonær, og sannsynlighetstettheten ikke “rører på seg”, må vi ikke la oss friste til å tro at elektronet er i ro. Den kinetiske energien er nemlig forskjellig fra null: Vi vet at energien er veldefinert lik $E_1 = -13.6$ eV, mens forventningsverdien av den *potensielle* energien er $\langle V \rangle = -27.2$ eV. Siden $\langle K + V \rangle = \langle E \rangle = E$, må da forventningsverdien av den *kinetiske* energien være

$$\langle K \rangle = E - \langle V \rangle = 13.6 \text{ eV}.$$

En slik kinetisk energi svarer faktisk til en hastighet av størrelsesorden $\alpha c = c/137$. [Oppgave: Vis dette.]

Oppgave 9: Noen kontrollspørsmål og små oppgaver:

1. Hvilken fysisk observabel (dvs: observerbar evt målbar fysisk størrelse) svarer til operatoren $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$?
2. Hvilken operator $\widehat{K}$ svarer til den kinetiske energien $K = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = \mathbf{p}^2/2m$?
3. Vis at de Broglie-bølgen $\Psi_3 = \exp[i(px - p^2 t/2m)/\hbar]$ er en egenfunksjon til impulsoperatorene $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ og $\hat{p}_z$ og til kinetisk-energi-operatoren $\widehat{K}$, og bestem de respektive egenverdiene.
4. Samme sak for $\Psi_4 = \exp[i(-px - p^2 t/2m)/\hbar]$.
5. Hvilke fysiske impulser svarer de to de Broglie-bølgene ovenfor til?
6. Vis at $\cos kx$ ikke er en egenfunksjon til $\hat{p}_x$.
7. Vis at Ψ_3 oppfyller den tidsavhengige Schrödingerligningen (T1.24) for en fri partikkel.
8. Vis at realdelen av Ψ_3 *ikke* oppfyller (T1.24).
9. Ifølge superposisjonsprinsippet (T1.35) er $\Psi_9 = \Psi_3 + \Psi_4$ en løsning av (T1.24), og derfor en fysisk akseptabel bølgefunksjon for en fri partikkel. Er Ψ_9 en egenfunksjon til $\widehat{K}$? Er Ψ_9 en egenfunksjon til $\hat{p}_x$? Beskriver Ψ_9 en fysisk tilstand med veldefinert impuls?
10. Ved termisk likevekt vil atomene i en enatomig gass (ifølge det såkalte ekvipartisjonsprinsippet) ha en gjennomsnittlig energi på $\frac{1}{2} k_B T$ pr frihetsgrad, dvs $\frac{3}{2} k_B T$ pr atom. Når nøytroner bremses opp i en såkalt moderator i en kjernereaktor, ender de opp som

“termiske” nøytroner, i likevekt med omgivelsene, dvs med en gjennomsnittlig kinetisk energi $\frac{3}{2}k_B T$. Anta $T = 300$ K og finn den gjennomsnittlige kinetiske energien K til nøytronene i elektronvolt (eV). Regn også ut de Broglie-bølgelengden som svarer til denne kinetiske energien K . [Svar: $\lambda = 1.46$ Å.]

11. Vis at funksjonen $\psi = Ce^{ikx}$ er en egenfunksjon til impulsoperatoren $\hat{p}$ (se (T1.22)), og bestem egenverdien.

12. Skriv ned (og *memorer*) den tidsavhengige Schrödingerligningen (SL) og den tidsuavhengige Schrödingerligningen (TUSL) for en partikkel med masse m som beveger seg i et tredimensjonalt potensial $V(\mathbf{r})$.

13. Hva blir SL og TUSL når potensialet er endimensjonalt, $V = V(x)$? [Hint: det klassiske uttrykket for energien er da $E = p_x^2/2m + V(x)$.]

Fysiske konstanter¹⁶

Lyshastigheten i vakuum	c	$2.997\,924\,58 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Plancks konstant	h	$6.626\,068\,96(33) \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ $= 4.135\,667\,333 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$
Plancks konstant/ (2π) (“h-strek”)	$\hbar$	$1.054\,571\,628(53) \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ $= 6.582\,118\,99(16) \cdot 10^{-16} \text{ eV s}$
Enhetsladningen (protonladningen)	e	$1.602\,176\,487(40) \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Permittiviteten i vakuum	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2)$	$8.854\,187\,817 \dots \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
Permeabiliteten i vakuum	μ_0	$4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$ (eksakt)
Elektronmassen	m_e	$0.510\,998\,910(13) \text{ MeV}/c^2$ $= 9.109\,382\,15(45) \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Protonmassen	m_p	$938.272\,013(23) \text{ MeV}/c^2$ $= 1.672\,621\,637(83) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Nøytronmassen	m_n	$939.565\,346(23) \text{ MeV}/c^2$
Finstrukturkonstanten	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$	$1/137.035\,999\,679(94)$
Klassisk elektronradius	$r_e = e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2)$	$2.817\,940\,2894(58) \cdot 10^{-15} \text{ m}$
Elektronets Compton-bølgelengde	$\lambda_e = h/(m_e c)$	$2.426\,310\,2389(16) \cdot 10^{-12} \text{ m}$
Elektronets Compton-bølgelengde/ (2π)	$\lambda_e = \hbar/(m_e c) = r_e/\alpha$	$3.861\,592\,6459(53) \cdot 10^{-13} \text{ m}$
Bohr-radien	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$ $= r_e/\alpha^2$	$0.529\,177\,208\,59(36) \cdot 10^{-10} \text{ m}$
Rydberg-energien	$\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = \hbar^2/(2m_e a_0^2)$	$13.605\,691\,93(34) \text{ eV}$
Gravitasjonskonstanten	G_N	$6.674\,28(67) \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$
Avogadros tall	N_A	$6.022\,141\,79(30) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Boltzmanns konstant	k_B	$1.380\,6504(24) \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ $= 8.617\,343(15) \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$
Stefan–Boltzmanns konstant	$\sigma = 2\pi^5 k_B^4/(15h^3 c^2)$	$5.670\,400(40) \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$

¹⁶Usikkerheter i tabellverdiene angis slik: $1.2345(13)$ betyr 1.2345 ± 0.0013 .
1 eV = $1.602\,176\,487(40) \cdot 10^{-19} \text{ J}$. De tabulerte verdiene er fra 2010.

Det greske alfabetet

I kvantemekanikk (og annen fysikk) er det behov for flere symboler enn dem vi finner i det vanlige alfabetet. Derfor er det vanlig å bruke symboler bl.a fra det greske alfabetet. Nedenfor gis en oversikt over store og små greske bokstaver, hva de heter på norsk og hvordan vi uttaler dem.

stor bokstav	liten bokstav	navn	uttale
A	α	alfa	alfa
B	β	beta	beta
Γ	γ	gamma	gamma
Δ	δ	delta	delta
E	ϵ	epsilon	epsilon
Z	ζ	zeta	tseta
H	η	eta	eta
Θ	θ (el. ϑ)	theta	teta
I	ι	iota	iota
K	κ	kappa	kappa
Λ	λ	lambda	lambda
M	μ	my	my
N	ν	ny	ny
Ξ	ξ	xi	ksi
O	$\omicron$	omikron	omikron
Π	π	pi	pi
P	ρ	rho	ro
Σ	σ	sigma	sigma
T	τ	tau	tau
Υ	υ	ypsilon	ypsilon
Φ	ϕ (el. φ)	phi	fi
X	χ	khi	kji
Ψ	ψ	psi	psi
Ω	ω	omega	omega

Utarbeidet av Ingjald Øverbø.

Tilpasset til FY6019 Moderne fysikk av Jon Andreas Støvneng.