Hoofdstuk 34: Kwantummechanica

1. Op welke 3 manieren kan er warmte getransporteerd worden?

Conductie: Energie wordt getransporteerd onder de vorm van warmte door de onderlinge interactie van moleculen en atomen, maar zonder dat de atomen/moleculen zelf getransporteerd worden. Dit resulteert in trillingen van de atomen.

Vb.: Staaf wordt aan het ene uiteinde opgewarmd omdat atomen gaan trillen, het andere uiteinde wordt ook warm omdat atomen daar ook gaan trillen tgv. de interactie tussen de atomen. Ook vrije elektronen dragen bij tot thermische geleiding, daarom zijn metalen ook goede thermische geleiders.

Convectie: Energie wordt getransporteerd in de vorm van warmte tgv. massatransport. Vb.: Warme lucht in een kamer, deze expandeert, de dichtheid wordt lager en door de opwaartse stuwkracht stijgt de warme lucht.

Straling: Energie wordt getransporteerd als warmte in de vorm van elektromagnetische golven welke zich voortplanten met de lichtsnelheid. Bij straling is geen medium nodig om warmte te transporteren.

Vb.: Straling van de zon.

Voor de drie mechanismen is de snelheid van afkoelen van een voorwerp evenredig met het temperatuursverschil tussen het voorwerp en de omgeving. Dit is de afkoelingswet van Newton.

2. Druk de warmtestroom uit in functie van een temperatuursgradiënt.

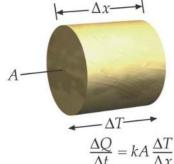
Thermische stroom of warmtestroom is de hoeveelheid warmte Q die per tijdseenheid getransporteerd wordt $I=\frac{\Delta Q}{\Delta t}$.

$$\begin{array}{ll} \frac{\Delta Q}{\Delta t} \sim \frac{\Delta T}{\Delta x} \rightarrow Temperatu^{\mathcal{U}} & \text{ënt} \\ \frac{\Delta Q}{\Delta t} \sim A \rightarrow Opperv^{\mathcal{U}} & \text{Theory} & \text{Theory} \\ I = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = kA\frac{\Delta T}{\Delta x} \rightarrow k \text{The Theory} & \text{he Theory} & \text{he} \end{array}$$

Meestal voert men nog expliciet een '-'teken in om aan te geven dat een positieve warmtestroom correspondeert met warmte die stroomt van gebieden van hoge T naar gebieden met een lage T

$$I = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = -kA \frac{\Delta T}{\Delta x} \, \text{TD} \, \text{TD} \Lambda T = T_2 - T_1 < 0 \, .$$

Indien de temperatuur niet lineair verandert doorheen de staaf, dan moeten we dit resultaat veralgemenen tot $I=\lim_{\Delta t\to 0}^{m}\frac{\Delta Q}{\Delta t}=-kA\lim_{\Delta x\to 0}^{m}\frac{\Delta T}{\Delta x}$ dus $I=\frac{dQ}{dt}=-kA\frac{dT}{dx}$. Voor de grootte van de stroom kunnen we schrijven $I=kA\frac{\Delta T}{\Delta x}\to\Delta T=I\frac{\Delta x}{kA}\equiv RI\, {\rm I}\, {\rm I}\,$

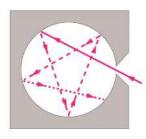


3. Geef een praktische voorbeeld van een thermische serie- en parallelschakeling.

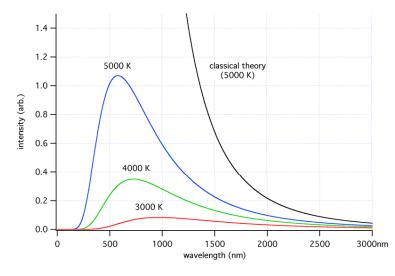
Serieschakeling: Verschillende voorwerpen die tegen elkaar staan in een rij. **Parallelschakeling:** Een huis is een reeks thermische parallelschakelingen.

4. Wat is een zwart lichaam?

Alle voorwerpen zenden EM-straling uit en absorberen straling. Een voorwerp in thermische evenwicht zendt per tijdseenheid evenveel straling uit als het absorbeert. De hoeveelheid energie die wordt uitgestraald per tijdseenheid is $P_r = e\sigma^A T^4$ (e = emissiviteit 0 < e < 1). Het gaat hier om het totale vermogen dat wordt uitgezonden i.e. de bijdrage van alle golflengten. Een lichaam dat alle elektromagnetische straling die invalt absorbeert noemt men ene zwart lichaam. In dit geval wordt geen straling gereflecteerd en ook geen straling doorgelaten, e = 1. Wanneer de perfecte absorber koud is ziet hij zwart. Men bewijst in de thermodynamica dat een lichaam dat alle straling absorbeert ook alle straling uitzendt, m.a.w. een perfecte absorber is een perfecte straler. Daarom noemt het zwart lichaam ook wel zwarte straler. In de praktijk realiseert men een zwarte straler door bv. een holte in een caviteit te maken, de straling die op de holte invalt heeft slechts een geringe kans om gereflecteerd te worden. Alle straling wordt geabsorbeerd door de wand van de holte.



De energieflux (of intensiteit), i.e. de hoeveelheid energie die per tijdseenheid en per oppervlakte wordt uitgezonden, wordt gegeven door $\frac{P_r}{A} = e\sigma T^4$. Bij kamertemperatuur zendt een zwart lichaam voornamelijk infrarode straling uit. De intensiteit van de straling uitgezonden door een zwart lichaam kan men theoretisch berekenen. Wanneer men de intensiteit van de uitgezonden straling experimenteel onderzoekt vindt men dit.



UV catastrofe is de curve zoals berekend d.m.v. de klassieke mechanica. Op het einde van de 19^{de} eeuw trachtte men de intensiteit van de zwarte straler theoretisch te verklaren. W. Wien (1896) had een benaderende uitdrukking gevonden die enkel geldig was voor kleine golflengtes. Rayleigh en Jeans (1905) hadden een benaderende uitdrukking gevonden voor lange golflengtes, i.e. de lage frequenties. Zij was echter niet in staat het gedrag bij hoge

frequenties te beschrijven. Men sprak van de ultraviolet catastrofe omdat het resultaat divergeerde voor korte golflengtes. Max Planck had een andere uitdrukking gevonden (1900) die wel perfect het spectrum van een zwart lichaam beschreef. Planck moest hiervoor onderstellen dat de EM straling enkel kon uitgezonden worden in discrete energiepakketten (kwanta) E = hf.

5. <u>Wat is het foto-elektrisch effect? Waar zit de tegenspraak met de klassieke interpretatie van licht als een golfverschijnsel? Welke oplossing formuleerde Einstein?</u>

Het foto-elektrisch effect treedt op wanneer een metaaloppervlak wordt blootgesteld aan EM straling met een frequentie > een karakteristieke frequentie. Dan wordt deze straling geabsorbeerd en wordt een elektrische stroom waargenomen doorheen het metaal. Wanneer de frequentie van de straling < een karakteristieke frequentie van het metaal was, dan wordt geen stroom waargenomen. Dit fenomeen is ook onafhankelijk van de intensiteit. Einstein kon het foto-elektrisch effect verklaren door te onderstellen dat EM-straling uit deeltjes (fotonen) bestond en dat de energie van zo'n foton gegeven werd door E = hf, waar f de frequentie van de EM-straling is. De fotonen uit de lichtbundel botsen met de elektronen van het metaaloppervlak. Opdrijven van de intensiteit verhoogd enkel het aantal fotonen (niet de frequentie of energie ervan). Er worden dan meer elektronen vrij gemaakt indien de frequentie groter is dan de karakteristieke waarde. Indien de frequentie te laag is dan worden geen fotonen vrij gemaakt en zal men nog steeds geen stroom meten. De energie van het foton gaat naar het elektron. Een gedeelte van de energie wordt gebruikt om het elektron los te maken uit het metaaloppervlak. Deze energie noemt men de werkfunctie φ van het metaaloppervlak. De rest van de energie hf wordt gebruikt als kinetische energie van het elektron. Men heeft behoud van en energie $K_{ma}^{\quad x}=\left(\frac{1}{2}mv^2\right)_{ma}^{\quad x}=hf-\phi.$

Frequency f, Hz

Het foto-elektrisch effect laat toe om de constante van Planck experimenteel te bepalen. Men meet voor verschillende frequenties de corresponderende maximale kinetische energie. Men fit dan aan deze punten een rechte. De helling van deze rechte wordt gegeven door h en het stuk afgesneden op de Y-as levert dan de werkfunctie φ .

6. Welk verband legde men tussen de impuls van een deeltje en zijn golflengte?

In 1923 verklaarde A.H. Compton de verstrooiing van x-stralen aan vrije elektronen door gebruik te maken van het fotonconcept. Hierbij werd gebruik gemaakt van het verband tussen de impuls van het foton en de golflengte van de corresponderende straling. Voor EM-golven hadden we het verband E=pc, met E=hf krijgen we dus $p=\frac{h}{\lambda}$.

7. <u>Formuleer het atoommodel van Bohr voor het waterstofatoom. Waarom is dit een semiklassieke theorie? Waarin zit het klassieke aspect en waarin het kwantummechanische?</u>

Met het atoombodel van Bohr voor het waterstofatoom konden de emissiespectra voor H verklaard worden. Wanneer een elektrische stroom door een gas onder lage druk wordt gestuurd, dan wordt licht uitgezonden. Het emissiespectrum van atomaire gassen zoals H en He bestaat uit discrete lijnen. Een verklaring voor de spectra werd gegeven door gebruik te maken van de kwantumhypothese. Het H-atoom bestaat uit een elektron dat rond de kern (met lading +e en massa m) draait in een circulaire baan. Het H-atoom is mechanisch stabiel, maar niet elektrisch omdat de lading (e¯) steeds een versnelling ondergaat vanwege de cirkelvormige baan en dus straling uitzendt. Het e¯ zal dus energie verliezen tgv. de straling en daarom steeds op een kleinere afstand van de kern gaan ronddraaien tot het e¯ uiteindelijk op de kern valt. Dit is echter niet wat men experimenteel vaststelt, atomen zijn stabiel. Daarom voerde Bohr 3 postulaten in.

- **Postulaat 1:** e kunnen enkel op welbepaalde orbitalen rond de kern draaien, de zogenaamde stationaire toestanden. Wanneer een e zich in een stationaire toestand bevindt zendt het geen straling uit.
- **Postulaat 2:** Het e⁻ zendt enkel straling uit wanneer het een overgang maakt tussen 2 stationaire toestanden (van een toestand met hoge energie naar een toestand met lagere energie). De frequentie van de straling wordt gegeven door $f = \frac{E_i E_f}{h}$ (E_i: vertrek; E_f: aankomst).

Postulaat 3: Het impulsmoment L moet voldoen aan $L=mvr=n\frac{h}{2\pi}=n\hbar$ (n = 1, 2, ...). Het impulsmoment is dan gekwantiseerd.

Tezamen met de 2^{de} wet van Newton $\frac{ke^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$ krijgen we

$$r=n^2\frac{\hbar^2}{mke^2}=n^2a_0\text{T} \text{Ta}_0=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}\approx 0.0529\text{Ta} \text{Ta} \text{Bohrradius})$$

De totale energie wordt dan m.b.v. $E = K + U = -\frac{1}{2} \frac{ke^2}{\pi}$

$$\to E_n = - \frac{E_0}{n^2} {\rm TD} \, {\rm TPE}_0 = \frac{m e^4}{2\hbar^2 (4\pi \epsilon_0)^2} = 13.6 {\rm TeV} \; .$$

We vinden dus voor de frequentie van de uitgezonden straling

$$f = \frac{E_1 - E_2}{h} = \frac{me^4}{4\pi (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right)$$

Omdat de energiewaarden van het elektron gekwantiseerd zijn, zijn ook de frequenties/golflengtes van de uitgezonden straling bij een overgang tussen twee stationaire toestanden gekwantiseerd. De grondtoestand voor het e in het H-atoom is bij E = -13.6 eV. Om dit e te verwijderen is dus 13.6 eV nodig, dit is de zg. ionisatie-energie. Het model van Bohr is een hybride theorie omdat het klassieke concepten (Newton, ...) samen gebruikt met kwantummechanische concepten.

8. Wat is de interpretatie van de golffunctie in de moderne kwantummechanica?

De fysische interpretatie van Ψ gaat via de modulus-kwadraat van de golffunctie. De kans P(x,t)dx om een deeltje terug te vinden in een interval dx op tijdstip t wordt gegeven door $P(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$. Vermits de golffunctie geassocieerd wordt met een kansverdeling moet deze genormaliseerd zijn $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$. Indien de potentiële energie niet expliciet van de tijd afhangt (U = U(x)), dan kunnen we een oplossing vinden dmv. de methode van het scheiden van veranderlijken.

$$\begin{split} & \Psi(x,t) = \Psi(x)f(t) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x)f(t) = i\hbar\Psi(x)\frac{\partial f(t)}{\partial t} \\ & \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi(x)}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x) = i\hbar\frac{1}{f}\frac{\partial f(t)}{\partial t} \\ & \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi(x)}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x) = ct^e \equiv E \\ & \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \Rightarrow \frac{1}{f}df = \frac{E}{i\hbar}dt \Rightarrow \ln f = \frac{E}{i\hbar}dt + C'^\Rightarrow f(t) = Ce^{-\frac{iE^t}{\hbar}} \\ & \Rightarrow \Psi(x,t) = \Psi(x)e^{-\frac{iE^t}{\hbar}} \end{split}$$

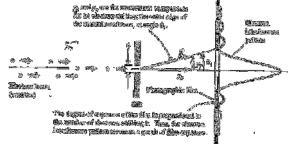
9. Formuleer de onzekerheidsrelatie van Heisenberg en geef de betekenis van alle optredende grootheden en van deze formule. Geef een interpretatie van deze relatie in termen van de diffractie van een e aan een apertuur.

Onzekerheidsrelatie van Heisenberg: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

Dit betekent dat men de positie en de impuls van een deeltje nooit tegelijk kan bepalen met een onbegrensde nauwkeurigheid. Indien men de positie exact kent, i.e. $\Delta x \to 0$ dan gaat $\Delta p \to \infty$ en omgekeerd.

Beschouw de doorgang van een elektronenbundel door een scherm met apertuur a die verderop opgevangen wordt door een tweede scherm. Het eerste diffractieminimum treedt op bij si 1 $\theta_1=\frac{\lambda}{a}$ $\Rightarrow \theta_1 \approx \frac{\lambda}{a}$. We zien dus dat de elektronen

aanleiding geven tot een diffractiepatroon wat

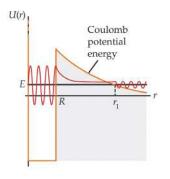


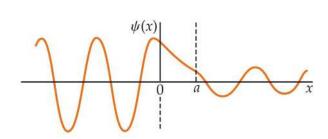
duidelijk het golfkarakter van het e aantoont. We kunnen dit verder analyseren in termen van de individuele e die inslaan op het scherm. Hoewel de e oorspronkelijk enkel een impulscomponent in de x-richting hadden zien we dat de e die inslaan dicht bij het eerste minimum noodzakelijker wijs ook een component in de y-richting moet hebben. Voor deze e hebben we $p_y = p \sin^n \theta_1 \approx p\theta_1 = p\frac{\lambda}{a}$. Er treedt dus een spreiding op in de richting van de e $\pm \theta_1$: $-\frac{\lambda}{a} \to +\frac{\lambda}{a} \Rightarrow p_y$: $-p\frac{\lambda}{a} \to +p\frac{\lambda}{a}$. De e kunnen immers boven of onder het midden van het diffractieminimum inslaan. We hebben wel voor de gemiddelde y-component van de impuls $\langle p_y \rangle = 0$. Maar er zit wel een spreiding (onzekerheid) op deze y-component die minstens $p\frac{\lambda}{a}$ is. $\Delta p_y \geq p\frac{\lambda}{a} \Leftrightarrow \Delta p_y a \geq p\lambda$ De spreiding op de positie y van het e is a, i.e. $\Delta y = a$. Dmv. de Broglie $p = \frac{h}{\lambda}$ krijgen we $\Delta p_y \Delta y \geq h$.

10. Wat verstaat men onder de 'tunneling' van een deeltje doorheen een potentiaalbarrière?

Beschouw een deeltje dat beweegt in de richting van de + x-as en een energie E heeft die net iets lager is dan de energiebarrière U_0 . Klassiek gezien zou het deeltje gewoon terugbotsen aangezien het onvoldoende energie heeft om over de energieberg te geraken.

Kwantummechanisch heeft het deeltje een zekere waarschijnlijkheid om door de barrière heen te bewegen, dit fenomeen noemt men tunneling. Deze kans wordt wel exponentieel kleiner met de dikte a van de barrière en het energieverschil U_0 -E. Dit fenomeen verklaart o.a. waarom een α -deeltje uit de atoomkern kan ontsnappen. De potentiële energie U(r) van het α -deeltje ziet er als volgt uit.



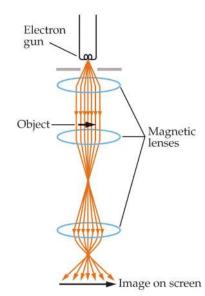


11. Wat is de golflengte van een elektron?

De golflengte hangt af van de snelheid van het elektron. Stel een e' wordt versneld tgv. een potentiaalverschil V. Het e' wint aan kinetische energie tgv. dit potentiaalverschil $\frac{1}{2}mv^2=eV$. De kinetische energie kunnen we ook schrijven dmv. de Broglie $\frac{1}{2}mv^2=\frac{p^2}{2m}=\frac{h^2}{2m\lambda^2}\Rightarrow \lambda=\frac{h}{\sqrt{2me}}$.

12. <u>Leg het principe v/e elektronenmicroscoop uit. Waarom kan je met zichtbaar licht geen</u> atomen onderscheiden en waarom wel met de elektronenmicroscoop?

Ipv. lenzen uit glas gebruikt men magneetvelden om de e bundel te focussen en evenwijdig te maken. De e worden gegenereerd dmv. een verhit wolfraam filament waarna ze versneld worden dmv. een elektrisch veld. Het potentiaalverschil dat wordt aangeldt ~100-300 keV. Het oplossend vermogen of de resolutie R van een microscoop is de kleinste afstand tussen 2 punten van het voorwerp die men nog kan onderscheiden in het beeld. Voor zichtbaar licht vindt men een resolutie van ~200 nm. De resolutie van een elektronenmicroscoop is veel groter dan die van een klassieke lichtmicroscoop omdat de golflengte van de elektronen veel korter is dan die van het licht. Men kan afstanden onderscheiden van ~0.1 nm.

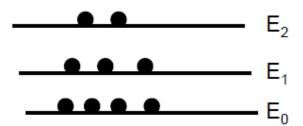


13. Wat is spontane en gestimuleerde emissie?

Bij evenwicht bevinden de meeste atomen zich in de grondtoestand, enkel het laagste energieniveau E_0 is bezet. Een inkomend foton kan geabsorbeerd worden waarbij een e' vanuit een lagere energietoestand naar een hogere energietoestand wordt geëxciteerd. Na een zekere tijd vallen de e' in de hogere niveaus terug op de lager gelegen E-niveaus. Hierbij wordt een foton uitgezonden, dit proces noemt men spontante emissie. Spontane emissie is een willekeurig proces. De fotonen die worden uitgezonden door verschillende atomen zijn niet gecorreleerd wat hun fase betreft, m.a.w. het licht is niet coherent. Het terugkeren van het e' van een hoger energieniveau naar een lager energieniveau hoeft niet in één keer te gebeuren maar kan via intermediaire toestanden plaatsvinden. Wanneer een atoom in een hogere energietoestand E_H is en wanneer een foton invalt met frequentie f, dan kan het elektron in de hogere energietoestand gestimuleerd worden om over te gaan naar een lagere energietoestand E_L waarbij $hf = E_H - E_L$. Dit proces noemt men gestimuleerde emissie en ligt aan de basis van de LASER werking. Het foton dat wordt uitgezonden bij gestimuleerde emissie heeft dezelfde richting en fase als het inkomende foton. Deze fotonen kunnen op hun beurt atomen stimuleren om fotonen uit te zenden. Op deze wijze kan men een bundel coherent licht bekomen.

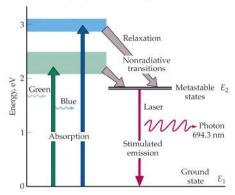
14. Wat verstaat men onder populatie-inversie? Voor wat staat de inversie?

De waarschijnlijkheid P dat een energie-niveau E bezet word voor een systeem in thermodynamische evenwicht is $P(E) \sim e^{-\frac{E}{kT}}$. Dit betekent dat hoger gelegen energieniveau een lagere bezettingswaarschijnlijkheid hebben dan de lager gelegen niveaus. Dit geldt in het bijzonder voor de energieniveaus van elektronen in atomen, moleculen, vaste stoffen, ... We moeten dus de populatie van niveau E_2 groter maken dan die van niveau E_1 . Men spreekt van populatie-inversie. Dit verkrijgt men door het zg. optisch pompen. Men pomp elektronen naar energieniveaus die hoger liggen dan E_2 (bv. E_3) dmv. een zeer intense lichtbron. Het licht van een flitslicht zendt fotonen uit die worden geabsorbeerd, m.a.w. elektronen van het lasermateriaal worden geëxciteerd.



15. Leg de werking van de Robijnlaser uit.

Robijn is Al_2O_3 met een kleine concentratie Cr^{3+} als onzuiverheid. Het ziet rood omdat Cr^{3+} sterke absorptiebanden heeft in het blauwe en groene gebied van zichtbaar licht. Belangrijk voor de laserwerking zijn de energieniveaus van Cr.



Een flitslicht genereert een gigantische hoeveelheid fotonen die op hun beurt elektronen van het Cr^{3+} ion exciteren van een energieniveau E_1 naar energieniveaus boven E_2 . Vanuit deze E-niveaus relaxeren de e snel naar het metastabiele E_2 niveau dmv. spontane emissie of niet-radiatieve processen (bv. trillingen). Vermits de e vrij lang in de toestand E_2 blijven treedt er populatie-inversie op t.o.v. de grondtoestand E_1 . Wanneer de Cr ionen in de toestand $\operatorname{E_2}$ vervallen dmv. spontane emissie naar E_1 zenden ze

fotonen uit met een golflengte λ = 694.3 nm en energie E = 1.79 eV. Deze fotonen kunnen dan andere e aanzetten tot emissie (gestimuleerde emissie). Maar deze fotonen kunnen ook e in het lager gelegen energieniveau E_1 exciteren door absorptie. Gestimuleerde emissie en absorptie zijn dus competitieve processen. De gestimuleerde emissie zal belangrijker zijn zolang er meer Cr ionen in de aangeslagen metastabiele toestand E_2 verkeren dan in de lager gelegen toestand E_1 . Één kant van het robijnkristal is 100% reflecterend gemaakt, de andere kant ~85% reflecterend. Wanneer dus een Cr ion vervalt dmv. spontane emissie dan zullen sommige van deze fotonen andere fotonen genereren dmv. gestimuleerde emissie. Sommige fotonen worden gereflecteerd aan de volledige reflecterende wand. Sommige botsen met de gedeeltelijke reflecterende wand, de meerderheid hiervan wordt terug gereflecteerd, maar sommige fotonen worden door gelaten. Al die gereflecteerde fotonen kunnen weer aanleiding geven tot gestimuleerde emissie. Op die manier worden een groot aantal fotonen gegenereerd die allen in fase zijn, dezelfde richting en dezelfde golflengte hebben (monochromatisch licht).

LASER = Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

Om de LASER te laten werken is gestimuleerde emissie van een metastabiel energieniveau E_2 naar een lager energieniveau E_1 noodzakelijk.

