NTNU
Kunnskap for en bedre verden

Forelesning i Fysikk 10.

Kvantefysikk 1

Hans J. Rivertz
Institutt for datateknologi og informatikk

19. februar 2020

Plan

Læremål

38.2 Foto-elektrisk effekt

38.3 Linjespektra og atomers energinivå

38.4 Rutherfords modell

38.4 Bohrs atommodell

39.1 De Broglie-bølger

39.2 Elektron-diffraksjon

39.3 Sannsynlighet og usikkerhet

39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen

41.1 Hydrogenatomet

41.2 Zeeman-effekten

41.3 Elektron-spinn

41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.

Neste forelesning

Læremål

Innhold

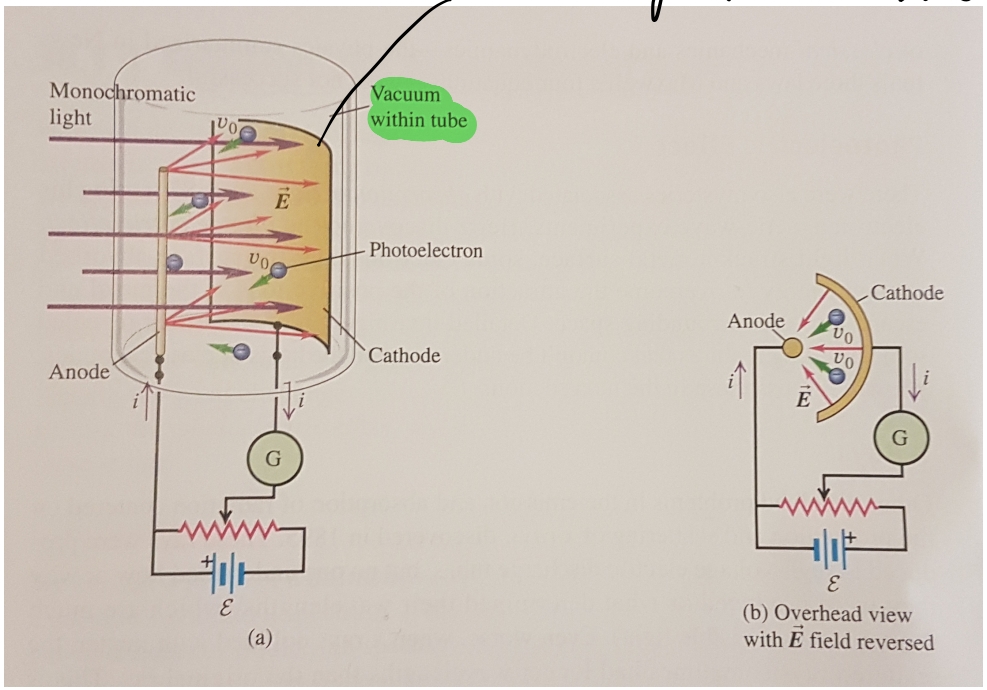
Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

38.2 Foto-elektrisk effekt

- Hertz oppdaget at når polert metall ble utsatt for ultrafiolett stråling oppsto gnister mellom elektroder ved lavere spenninger enn om de var i et mørkt rom.
- Det han hadde sett var at elektroner ble løsrevet av lyset.
- Philipp Lenard undersøkte hvordan lysets frekvens og intensitet påvirker strømmen og energien til elektronene. Neste side viser eksperimentet.

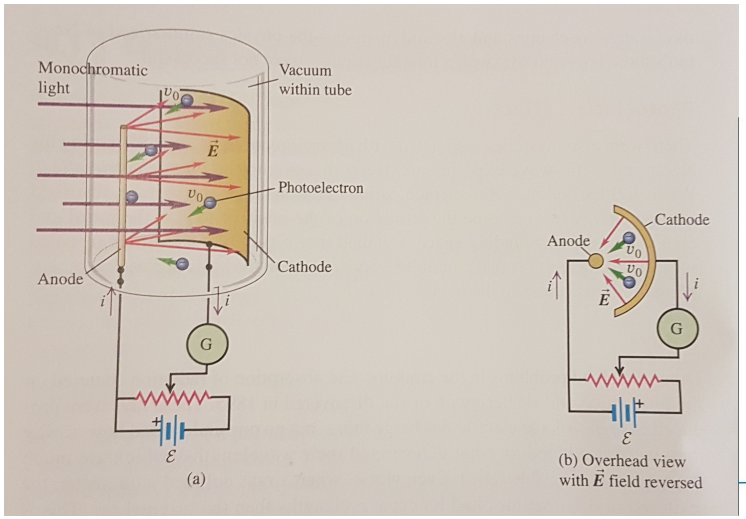
Philipp Lenards eksperiment

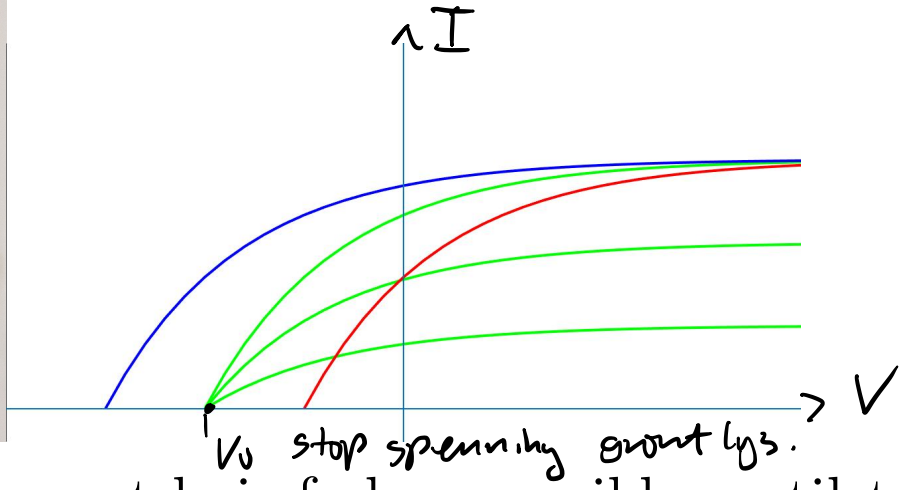
Polert plate av metall



Ekstern lenke: illustrasjon.

Philipp Lenards eksperiment





- Ingen elektroner blir løsrevet hvis frekvensen ikke er tilstrekkelig høy (Terskelfrekvens f_0)
- Økes spenningen vil strømmen øke til et maksimum.
- Strømmens maksimale styrke er proposjonal med intensiteten til lyset.
- Ingen strøm går om spenningen som settes opp mot strømrettingen er høyere en V_0. (Elektronene har en maksimal energi K_{maks}.)

Einsteins forklaring

- Max Planck fant at lys er kvatisert i fotoner

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js} = 4.136 \cdot 10^{-15}\mathrm{eV} \cdot \mathrm{s}$$

- Einstein påsto et foton river ut ett og bare ett elektron. Elektroner kan ikke samarbeide om å rive løs elektroner.
- Formel for fotoelektrisk effekt (Albert Einstein)

$$K_{max} = eV_0 = hf - \phi$$

- ϕ *phi* er minste arbeid som skal til for å rive løs et elektron.

materialkonstant.

Eksempel

Gull har løsrivelsesarbeid $\phi = 5.1\,\mathrm{eV}$ finn terskelfrekvensen. Det vil si når hf er lik løsrivings arbeidet.

$$f_0 = \phi/h = \frac{5.1\,\mathrm{eV}}{4.136 \cdot 10^{-15}\mathrm{eV \cdot s}} = \underline{1.2e + 15\,\mathrm{Hz}}$$

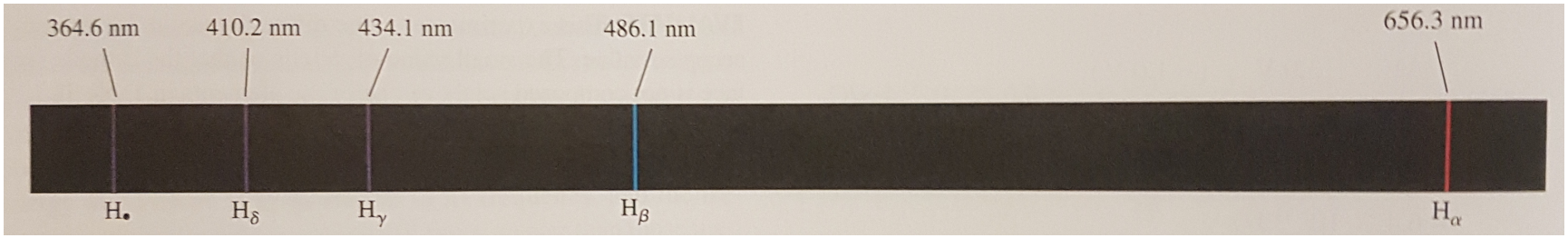
Finn så bølgelengden $\lambda_0 = \dfrac{c}{f_0} = \underline{240\,\mathrm{nm}}$.

UV lys.

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

38.3 Linjespektra og atomers energinivå



- Hydrogenspekteret (Johan Balmer)

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

  Rydbergs konstant $R = 1.097 \cdot 10^7\,\mathrm{m}^{-1}$
- Energinivåer

$$E_n = -\frac{hcR}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

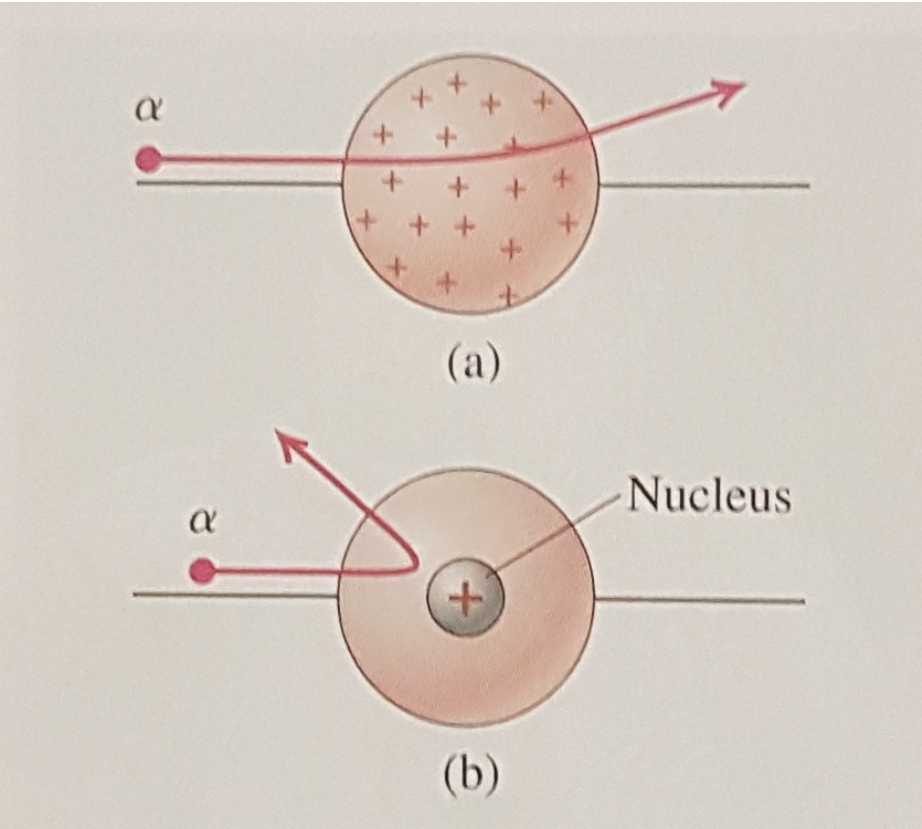
- Andre serier Lyman (UV), Pashen (IR), Bracket (IR), Pfund (IR).
- Laveste energinivå $n = 1$
- Eksiterte energinivåer $n > 1$

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

38.4 Rutherfords modell

Rutherford utførte et eksperiment der han bombarderte heliumkjerner mot gullfolie. Resultatet fikk han til å lage en atommodell der atomet har en liten men tung positiv kjerne og lette elektroner som går i bane om denne.



Thomsons modell med en positiv ladet ball med elektroner fordelt som "rosiner" i en bolle ble forkastet.

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

38.4 Bohrs atommodell

- Tanken om elektroner som går i bane rundt en kjerne ville i klassisk fysikk føre til at elektronene gikk i spiral inn i kjernen.
- Niels Bohr kom med løsningen:
  - Kun enkelte rotajonsbaner er lovlige.
  - Rotasjonsmengden L er kvantisert.

$$L = mvr = n\frac{h}{2\pi}$$

v=banefart, m=masse, r=baneradius.

- Bohr brukte Couloumbs lov og kvantisert L til å regne ut Rydbergs konstant

$$R = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}.$$

Slikt gir Nobelprisen i fysikk.

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

39.1 De Broglie-bølger

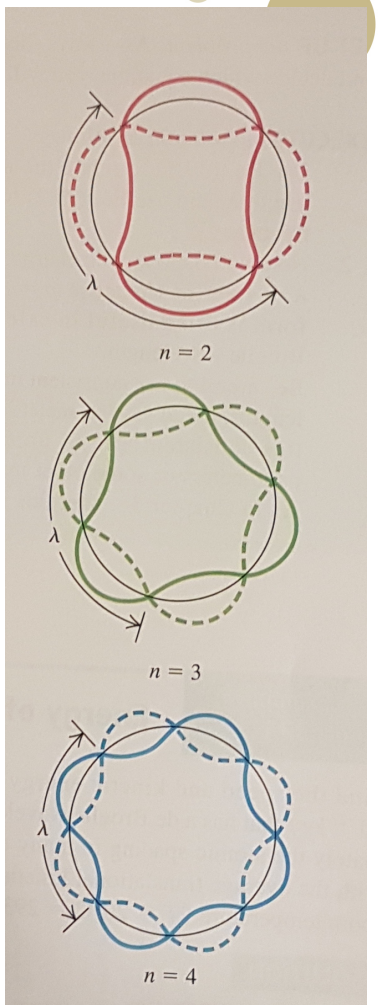
- Franskmannen Louise Viktor de Broglie foreslo at partikler har bølgeegenskaper.

$$\lambda = \frac{h}{mv}.$$

- Frekvensen er også gitt av partikkelens energi

$$E = hf$$

- Stående bølger som vist i figuren til høyre forklarer kvantiseringen til Bohr.

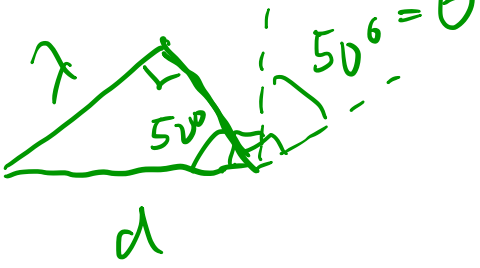


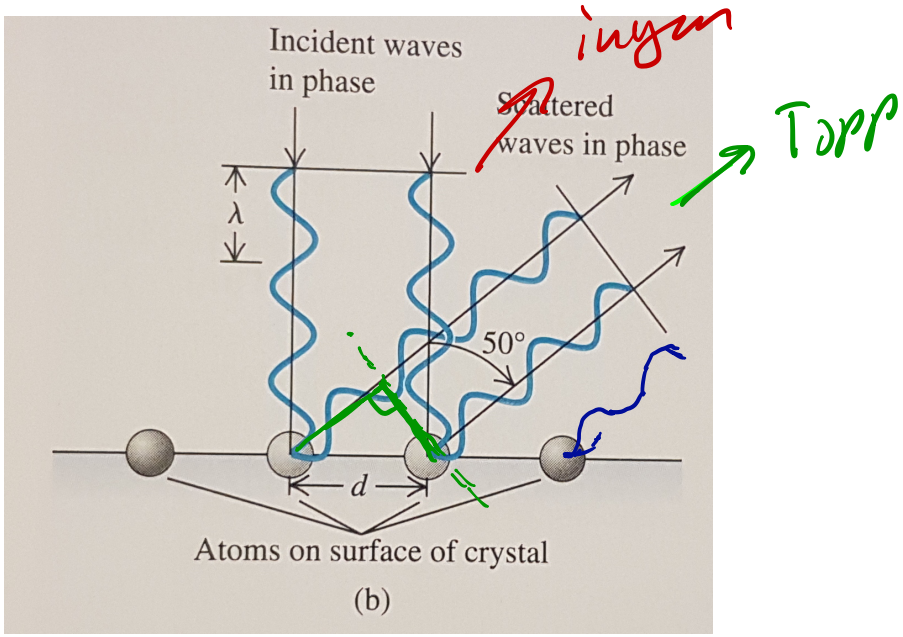
Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

39.2 Elektron-diffraksjon

- De Broglies hypotese ble testet (og verifisert) eksperimentelt nesten rett etter den ble fremsatt.
- For 90 år siden aksellererte og bombarderte Clinton Davidson og Lester Germer elektroner mot metallet nikkel.





$$\frac{\lambda}{d} = \sin\theta$$

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

39.3 Sannsynlighet og usikkerhet

Eksperimenter viser også at noen størrelser ikke kan være skarpe samtidig.

- Bevegelsesmengde $p_x = mv_x$ og posisjon x

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \hbar$$

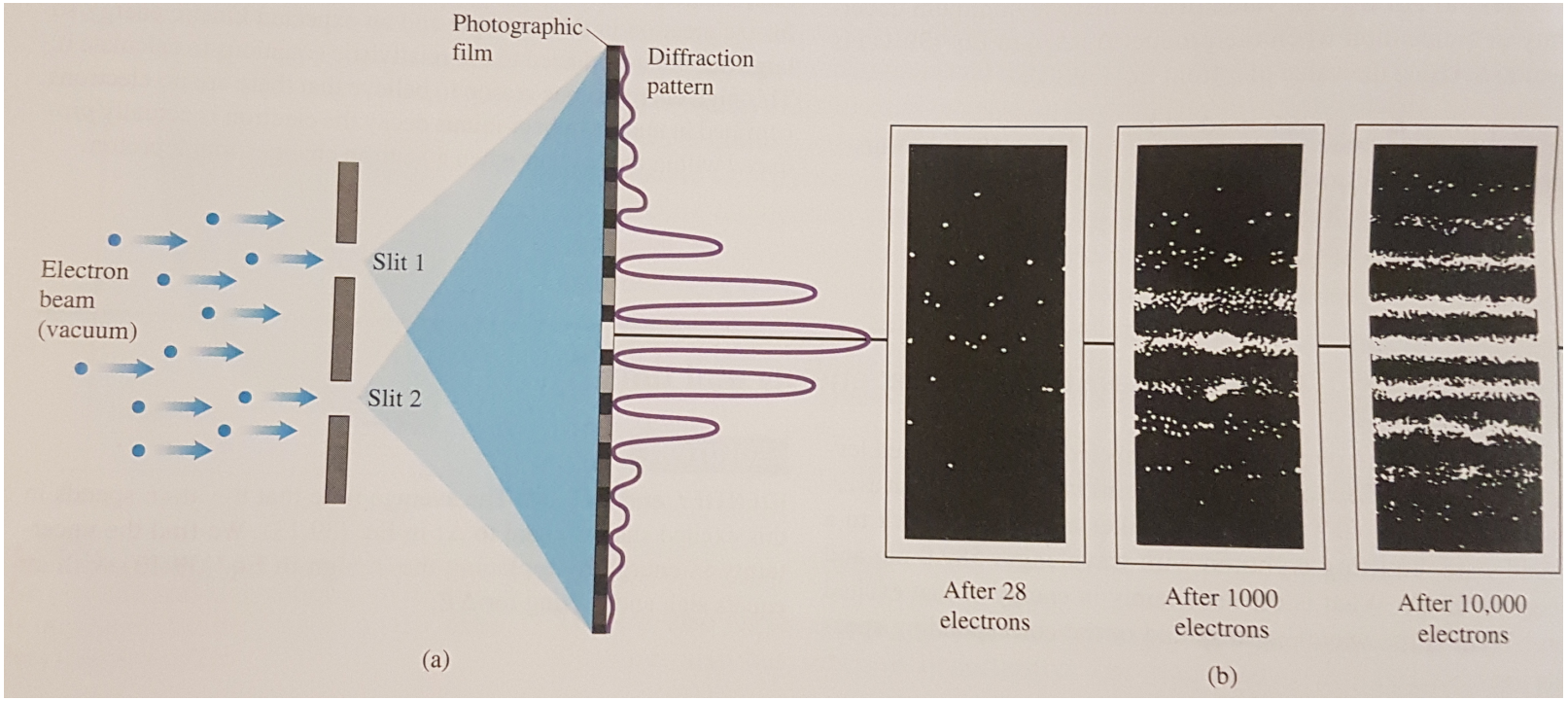
- Energi E og tid t

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen



Bølgefunksjoner

- Schrødinger foreslo en funskjon som ga sannsynligheten for hvor en partikkel skulle måles

$$\Psi(x, y, z, t)$$

- Sannsylighet tetthet for observasjon $= |\Psi(x, y, z, t)|^2$.
- Stasjonær bølgefunksjon for partikkel med energi E.

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}.$$

39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen

Ikke eksamensrelevant

Schrødinger ga følgende likning for å regne ut bølgefunksjonen til en partikkel med bestemt energi E og masse m i potensial $U(x, y, z)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right)$$
$$+U(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

Bølgefunksjon

Gitt partikkel som beveger seg i x-retning med farten v

- De Broglie bølgelengde λ, **bølgetall** k:

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

- De Broglie frekvens f og **vinkelfrekvens** $\omega = 2\pi f$:

$$f = E/h, \quad \omega = 2\pi f = E/\hbar$$

- **Bølgefunksjonen** Ψ (psi).

$$\Psi(t, x, y, z) = Ae^{i(\omega t - kx)} = Ae^{i\frac{E\,t - p\,x}{\hbar}}$$

  Fysisk tolkning: $|\Psi(t, x, y, z)^2|dV$ = 'sannsynligheten' for at partikkelen er i volumet dV ved punktet (x, y, z).

- **Energi- og impuls-operator**

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\,\Psi, \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi = p\,\Psi$$

Energi og bevaringslover

- Potensiell energi
$$U(x, y, z)$$
- Kinetisk energi
$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}.$$
- Bevaringslov for mekanisk energi
$$E = K + U \quad \text{er konstant.}$$

Schrödingers bølgeligning.

Ikke eksamensrelevant

- Operator for E: $\hat{E} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
- Operator for p: $\hat{p} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
- Operator for K: $\bar{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
- Operator for K for partikkel som beveger seg i annen retning.

$$\bar{K} = \frac{\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

- Energilikningen $K + U = E$ på operatorform gir Schrödingers bølgeligning:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(x,y,z)\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

41.1 Hydrogenatomet

For hydrogen atomet er $U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

Det er greiest å bruke koordinatene r, θ (theta), og ϕ (phi).

$$x = r\cos\phi\sin\theta, \quad y = r\sin\phi\sin\theta, \quad z = r\cos\theta.$$

Da er

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

Ser etter løsning på formen

$$\Psi(r,\phi,\theta) = R(r)\Phi(\phi)\Theta(\theta)e^{iEt/\hbar^2}.$$

Løsning av bølgeligningen

Det kan vises at slike løsninger kun kan ha energiene

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon)^2}\frac{m_e' e^4}{2n^2\hbar}, \text{ (samme som i bohr modellen)}$$

der $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$.
En annen størrelse er rotasjonsmoment $\mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v}$. Det er en vektor $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$. Størrelsen $L = |\mathbf{L}|$ er kvantisert

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \qquad l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$$

L_z er også kvantisert:

$$L_z = m_l\hbar, \qquad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$$

tallet m_l kalles det magnetisk kvantetallet. $\Phi(\phi)$ har enklest løsning:

$$\Phi(\phi) = (konstant) \cdot e^{im_l\phi}$$

Operator $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

41.2 Zeeman-effekten

Elektroner som går i bane et magnetfelt $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{k}}$ vil oppleve et kraft moment. (Kraft ganger arm) Det gir dem en ekstra potensiell energi

$$U = m_l \frac{e\hbar}{2m} B$$

(Orbital magnetisk vekselvirkingsenergi) Det gir en forfining av energinivåene. Størrelsen

$$\mu_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m}$$

kalles for **bohr-magnetonet**.

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

41.3 Elektron-spinn

Målinger av energinivåene viste en finere oppdeling. Det forklares ved et fjerde kvantetall. **Elektronspinn**

$$S_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$$

Innhold

Læremål
38.2 Foto-elektrisk effekt
38.3 Linjespektra og atomers energinivå
38.4 Rutherfords modell
38.4 Bohrs atommodell
39.1 De Broglie-bølger
39.2 Elektron-diffraksjon
39.3 Sannsynlighet og usikkerhet
39.5 Bølgefunksjoner og Schrödinger-likningen
41.1 Hydrogenatomet
41.2 Zeeman-effekten
41.3 Elektron-spinn
41.4 Atomer med fler enn et elektron / det periodiske system.
Neste forelesning

41.4 Atomer med fler enn et elektron

Energinivåene til et atom med Z protoner i kjernen og et elektron er

$$E_n = \frac{Z^2}{n^2}(13.6\,\mathrm{eV})$$

Videre kan et atom med Z protoner i kjernen og Z elektroner i bane løses som et problem der Et elektron går i bane i et potensial dannet av Z protoner og tilnærmet radiell symmetrisk elektronsky av $Z-1$ elektroner med tetthet bestemt av bølgefunksjonen. Hvert elektron vil ha 4 kvante tall

$$n \geq 1, \quad 0 \leq l \leq n-1, \quad , |m_l| < l, \quad m_s = \pm 1/2$$

Et sett av slike kvantetall kalles en kvantetilstand.

Utelukkelsesprinsippet

Elektroner kan ikke være i samme kvantetilstand. Vi har følgende tabell

n	l	m_l	Spektroskopisk notasjon	Antall tilstander	Skall
1	0	0	$1s$	2	K
2	0	0	$2s$	2	L
2	1	$-1, 0, 1$	$2p$	6	
3	0	0	$3s$	2	M
3	1	$-1, 0, 1$	$3p$	6	
3	2	$-2, -1, 0, 1, 2$	$3d$	10	
4	0	0	$4s$	2	N
4	1	$-1, 0, 1$	$4p$	6	
4	2	$-2, -1, 0, 1, 2$	$4d$	10	
4	3	$-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	$4f$	14	

Det periodiske system

Element	Symbol	Z	Elektron konfigurasjon
Hydrogen	H	1	$1s$
Helium	He	2	$1s^2$
Litium	Li	3	$1s^2 2s$
Beryllium	Be	4	$1s^2 2s^2$
Bor	B	5	$1s^2 2s^2 2p$
Karbon	C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
Nitrogen	N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$
Oksygen	O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
Fluor	F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Neon	Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Natrium	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$
Magnesium	Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Aluminium	Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$
Silisium	Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
Fosfor	P	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
Svovel	S	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Klor	Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Argon	Ar	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Kalium	K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$
Kalsium	Ca	20	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
Scandium	Sc	21	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d$
Titan	Ti	22	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$
Vanadium	V	23	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$
Krom	Cr	24	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$
Mangan	Mn	25	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^5$
Jern	Fe	26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$
Kobolt	Co	27	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$
Nikkel	Ni	28	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$
Kobber	Cu	29	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s 3d^{10}$
Sink	Zn	30	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$
Gallium	Ga	31	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p$

Neste forelesning

Neste gang vil vi se på

- Energi bånd
- Halvledere
- Dioder
- Transistorer