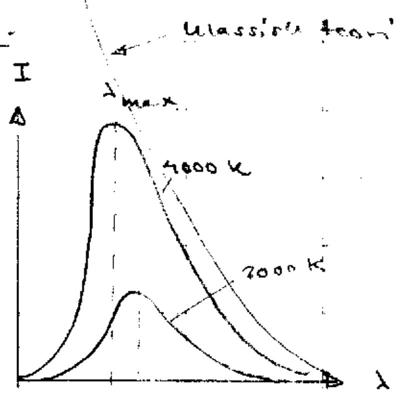
Föreläsning 5.

Introduktion till kvantfysiken.

Runt år 1900:

Svartkroppsstrålning

Välkänt spektrum. Omöjligt att förklara med kända fysikaliska lagar.



klassisk teori: atomerna behandlas som en samling oscillatorer som emitterar strålning vid alla våglängder. Stämmer bra vid långa våglängder, men ger "utravioletthatastrof".

För att få "rätt svar" gjorde Max Planck följande två antaganden:

1) Atomerna kan endast anta diskreta energier E_n givna av:

$$E_n = nhf \qquad n = \text{positivt heltal}$$

$$E_1 = hf, \quad E_2 = 2hf, \quad E_3 = 3hf \ldots$$

2) Atomerna emitterar eller absorberar energi i diskreta paket (fotoner)

$$\Rightarrow \quad I(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 \left(e^{hc/\lambda kT} - 1 \right)}$$

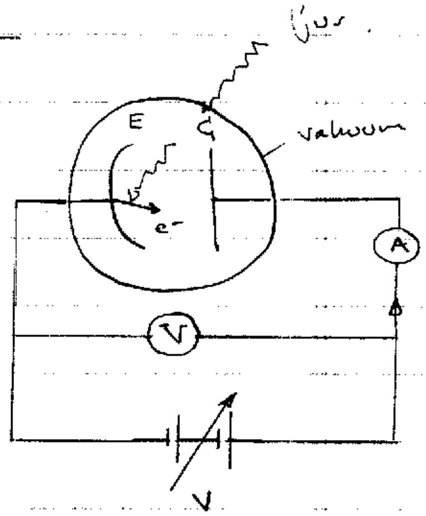
(Plancks strålningslag)

I början betraktades Plancks insats enbart som ett matematiskt trick, utan att någon (inte ens Planck själv) trodde att det fanns någon fysikalisk bakgrund till antagandet.

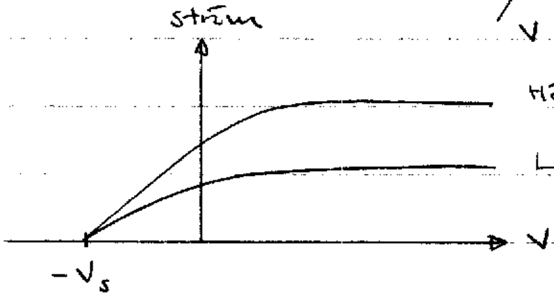
$\boxed{\text{Kvantiserade energinivåer}}$ viktigt steg.

Fotoelektriska effekten.

Ljus har partikelegenskaper.



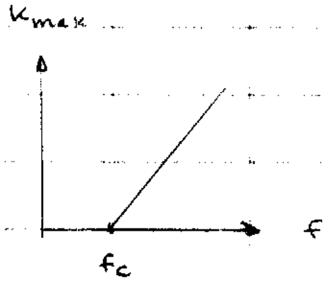
Experiment:



Maximal kin. energi hos elektronerna: $E_{max} = eV_s$

Klassisk fysik oförmögen att förklara

1) Ingen emission om ljusfrekv. < f_c. Högre intensitet hjälper ej
2) E_{max} oberoende av f
3) E_{max} ökar med ökande f



Einstein: Ljus är en ström av

Fotoner $E = hf$

Fotonen avger all sin energi till <u>en</u> elektron

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

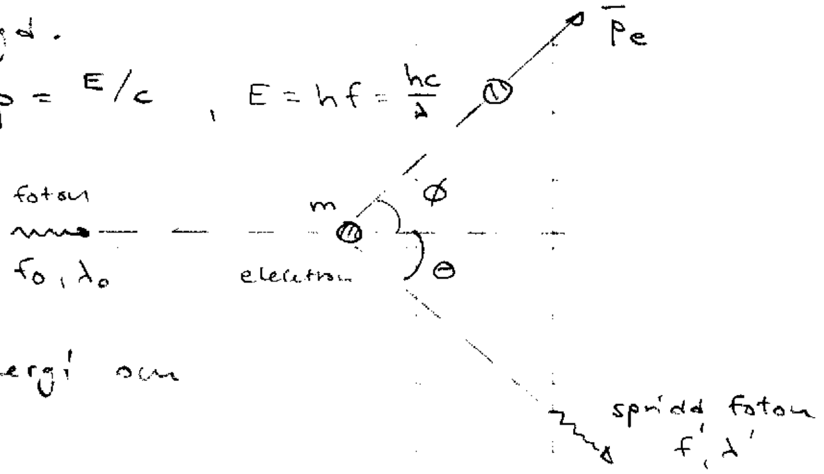
ϕ = utträdesarbetet.

Comtoneffekten – spridning av röntgenstrålning mot elektroner.

Fotonen har rörelsemängd.

Einsteins hypotes: $p = E/c$, $E = hf = \frac{hc}{\lambda}$

Experiment:



Bevarande av total energi och rörelsemängd

Energikonservering: $\frac{hc}{\lambda_0} = \frac{hc}{\lambda'} + K_e$

Lite relativitetsteori: $K = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - mc^2$ = kinetiska energin hos part med vilomassa m som rör sig med hast v

---

$\therefore \boxed{\frac{hc}{\lambda_0} = \frac{hc}{\lambda'} + \gamma mc^2 - mc^2}$ där $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$

Rörelsemängdskonservering.

x-led: $\frac{h}{\lambda_0} = \frac{h}{\lambda'} \cos\theta + \gamma mv \cdot \cos\phi$

y-led: $0 = \frac{h}{\lambda'} \sin\theta - \gamma mv \cdot \sin\phi$

Diverse algebra $\Rightarrow$ $\boxed{\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta)}$

$\frac{h}{mc} = \lambda_c = 0{,}0243$ Å

Perfekt överensstämmelse mellan teori och experiment

$\Rightarrow$ kvantteorin blev allmänt accepterad

<u>Bohrmodellen.</u>

I slutet av 1800-talet : mängder av spektroskopiska data

empiriska formler uppställda

ex vätes emissionsspektrum

$$\frac{1}{\lambda} = R\left|\frac{1}{n_f^2}-\frac{1}{n_i^2}\right|$$

n_f och n_i heltal

$R = 1{,}096\ldots \cdot 10^{-3}\ \text{Å}^{-1}$

Linjer med

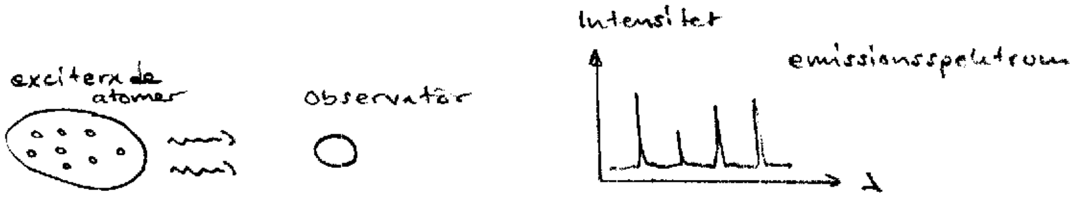
$n_f = 1$ och $n_i = 2,3,4,\ldots$ UV-ljus Lymanserien

$n_f = 2$ och $n_i = 3,4,5,\ldots$ synligt Balmerserien

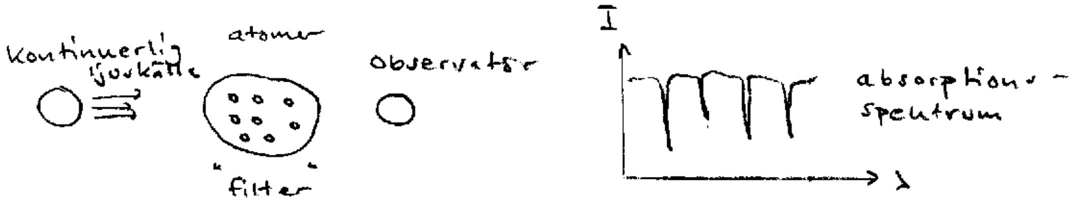
$n_f = 3$ och $n_i = 4,5,6,\ldots$ IR Paschenserien

Allmänt :

1)

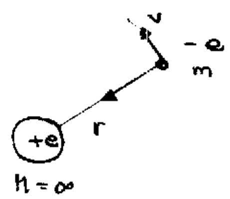


2)



Hur förklarar man de olika spektras utseende? Vi koncentrerar oss på den allra enklaste atomen ; väteatomen.

<u>klassisk behandling :</u>



cirkulär centralrörelse med acceleration $\frac{v^2}{r}$

Coulombkraft

$$F_c = \frac{e \cdot e}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r^2}$$

$$F_c = m\frac{v^2}{r}$$

dvs $$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = m\frac{v^2}{r} \quad ①$$

≈ 0 stillastående kärna

Hela systemets energi : $$E_{tot} = \frac{1}{2} M \cdot v_k^2 + \frac{1}{2} m v^2 + E_{pot}$$

Ekv. ① ger $$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\varepsilon_0 r}, \quad E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow E_{tot} = \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

Olika banradier ger olika värden på E_{tot} och inget verkar hindra kontinuerlig fördelning av banradier.

⇒ Ingen kvantisering av tillåtna energier.

Denna modell kan <u>inte</u>:

1) Beräkna r
2) Förklara varför elektronen kan snurra runt utan att el. magnetisk strålning emitteras.

<u>Bohrs postulat.</u>

a) elektronen kretsar runt kärnan i <u>stabila</u> banor <u>utan</u> att stråln. emitteras

b) då el. övergår från en stabil bana (energi E_i) till en annan stabil bana (energi E_f) absorberar eller emitterar den energi

$$|E_i - E_f| = h\nu_{if}$$

c) integralen av elektronernas rörelsemängd runt hela banan är en heltalsmultipel av h

$$\oint p \cdot ds = nh$$

c) leder till $\quad p \cdot 2\pi r = 2\pi m v r = nh$

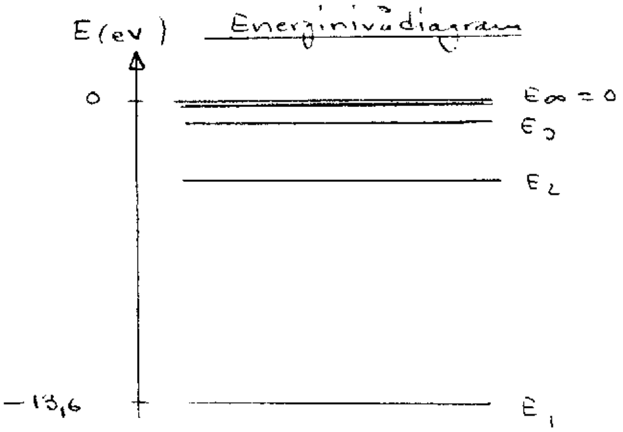
$$\Rightarrow m v r = n \underbrace{\frac{h}{2\pi}}_{n\hbar = L} \Rightarrow r = n \frac{h}{2\pi m v}$$

men $\quad \frac{1}{2} m v^2 = \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0 r} \quad \Rightarrow$

$$\Rightarrow \boxed{r_n = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi e^2 m}} = n^2 \cdot 0{,}529\,\text{Å} = n^2 \cdot a_0$$

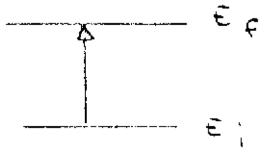
a_0: Bohrradien

$$E_{tot} = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 \cdot r_n} = -\frac{m e^4}{8\epsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} = \text{konst} \cdot \frac{1}{n^2} = -13{,}6\,\frac{1}{n^2}\ (\text{eV})$$



Energin är kvantiserad och för bundna tillstånd är energin negativ

n = <u>huvudkvanttalet</u>.



Energiskillnader:

$$E_i - E_f = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) = h\nu_{if} = \frac{hc}{\lambda_{if}}$$

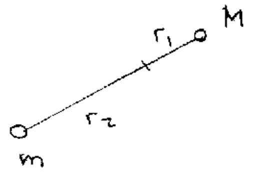
$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda_{if}} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) = R_\infty\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

R_∞ = Rydbergskonstanten (vid oändlig kärnmassa) =
$= 1.0974 \cdot 10^7\ m^{-1}$

egentligen $M = 1836\ m$

$M = 1.68 \cdot 10^{-27}$ kg
$m = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg

Tag hänsyn till detta genom att ersätta m med den reducerade massan μ i uttrycken



$$\left.\begin{aligned} M \cdot r_1 &= m \cdot r_2 \\ r_1 + r_2 &= r \\ \mu r^2 &= M r_1^2 + m r_2^2 \end{aligned}\right\}$$

$$\mu = \frac{m}{1 + \frac{m}{M}} = 0{,}9995\ m$$

$$R = R_\infty \frac{1}{1 + \frac{m}{M}}$$

<u>När kan Bohrmodellen användas?</u> Väteliknande system

ex. joniserad He-atom He^+

dubbeljoniserad Li-atom Li^{2+}

märk: $e^4 \sim (Ze)^2 \cdot e^2$

He: $Z = 2$, Li: $Z = 3$

jon.en: $13{,}6 \cdot 4$ $13{,}6 \cdot 9$

även alkaliatomer Na:

ensam elektron utanför slutna skal

$Z \sim Z_{eff}$

<u>Bohrmodellens brister</u>

1) klarar inte icke-väteliknande atomer ex. He

2) Övergångssannolikheter Tut Schrödinger ...