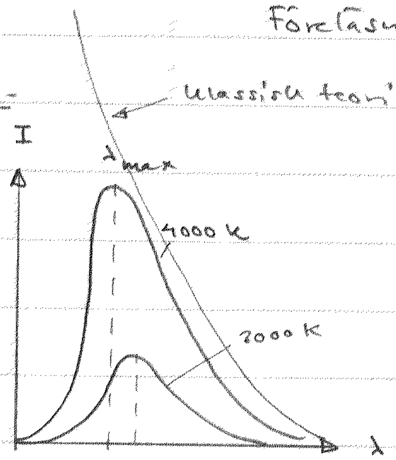
Introduktion till kvantfysiken.

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 "utravioletthkatastrof".

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)

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

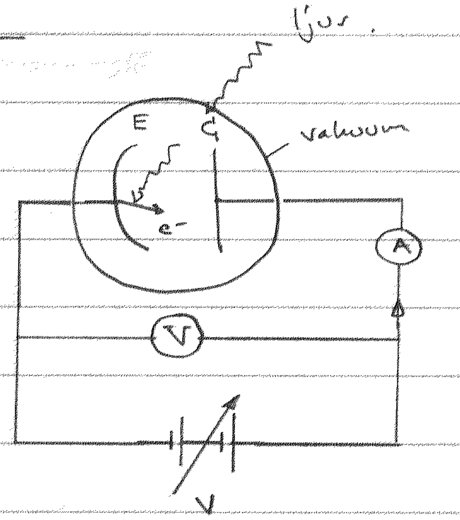
(Plancks strålningslag)

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.

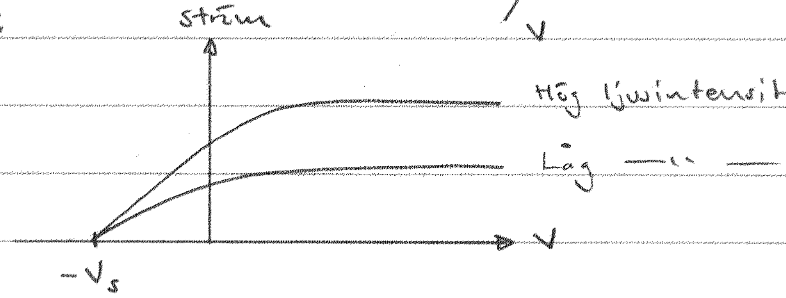
$\boxed{\text{Kvantiserade energinivåer}}$ viktigt steg.

Fotoelektriska effekten.

Ljus har partikelegenskaper.



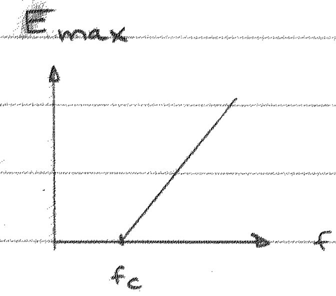
Experiment:



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 I
3) E_{max} ökar med ökande f



Einstein: ljus är en ström av

Fotoner $E = hf$

Fotonen avger all sin energi till en elektron

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

ϕ = utträdesarbetet.

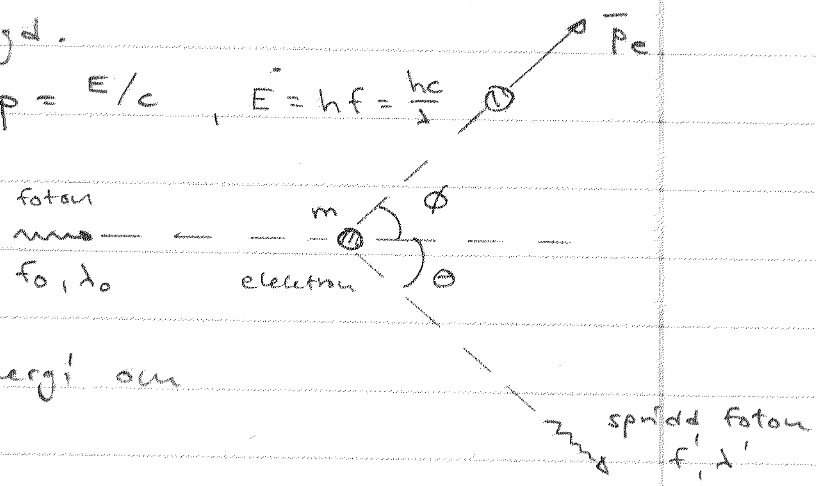
Här tas comptoneffekten upp som bakgrundsinformation.
I Fysik 2 studeras den mera i samband med relativitetsteorin.

<u>Comptoneffekten</u> – 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.

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

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 $\Rightarrow$ $\boxed{\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{mc}(1-\cos\theta)}$ $\frac{h}{mc} = \lambda_c = 0{,}0243\ \text{Å}$

Perfekt överensstämmelse mellan teori och experiment

$\Rightarrow$ kvantteorin blev allmänt accepterad

Bohrmodellen.

I slutet av 1800-talet : mängder av spektroskopiska data
empiriska formler uppställda
ex vätes emissionsspektrum

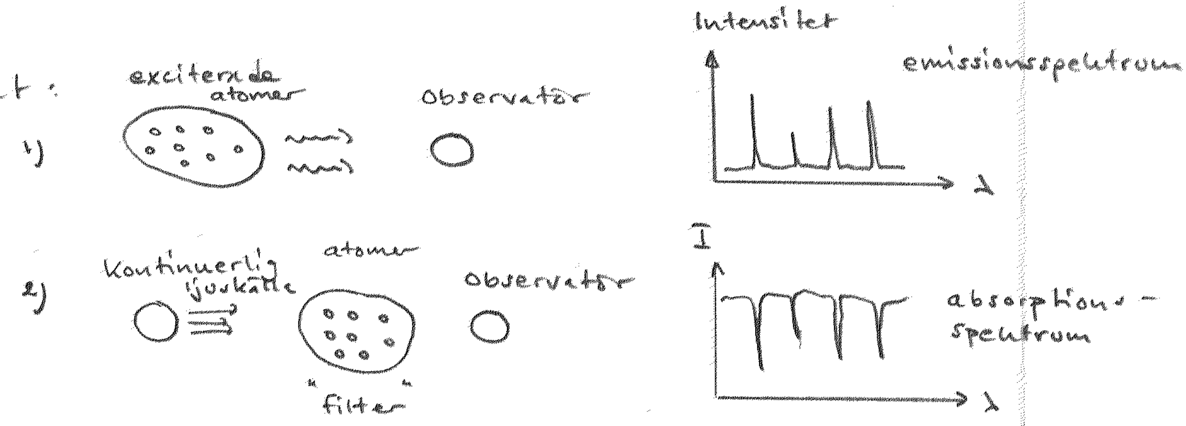
$$\frac{1}{\lambda} = R \left| \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right|$$

n_f och n_i heltal
$R = 1{,}096\ldots \cdot 10^{-3}$ Å^{-1}

Linjer med

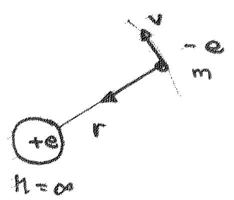
$n_f = 1$ och $n_i = 2, 3, 4, \ldots$ UV-ljus Lymanserien
$n_f = 2$ och $n_i = 3, 4, 5, \ldots$ synligt Balmerserien
$n_f = 3$ och $n_i = 4, 5, 6, \ldots$ IR Paschenserien

Allmänt :



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

klassisk behandling :



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

Coulombkraft $F_c = \frac{e \cdot e}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^2}$

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

dvs $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m\frac{v^2}{r}$ ①

Hela systemets energi : $E_{tot} = \underbrace{\frac{1}{2} M \cdot v_k^2}_{\approx 0 \text{ stillastående kärna}} + \frac{1}{2} m v^2 + E_{pot}$

Ekv. ① ger $\frac{1}{2} m v^2 = \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0 r}$, $E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

$$\Rightarrow E_{tot} = \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Olika banradier ger olika värden på E_{tot} och inget verkar hindra kontinuerlig fördelning av banradier.
$\Rightarrow$ Ingen kvantisering av tillåtna energier.

Denna modell kan <u>inte</u>:
1) Beräkna r
2) Förklara varför electronen kan snurra runt utan att el magnetisk strålning emitteras.

<u>Bohrs postulat.</u>

a) electronen 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_j) absorberar eller emitterar den energi

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

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

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

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

$$\Rightarrow \quad mvr = n\frac{h}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad r = n\frac{h}{2\pi mv}$$

$n\hbar = L$

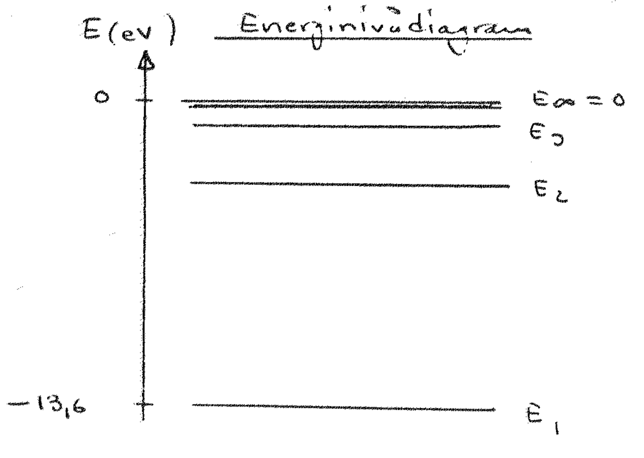
men $\quad \frac{1}{2}mv^2 = \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0 r}$

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

Bohrradien

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

<u>Energinivådiagram</u>



Energin är kvantiserad och för bundna tillstånd är energin negativ

n = <u>huvudkvanttalet</u>.

Kvantmekanik.

klassiska partiklar är lokaliserade (finns på ett välbestämt ställe) och observation stör dem inte.

Kvantmekaniska partiklar beskrivs av **MATERIEVÅGOR**

För fotoner gäller: $E = hf$, $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

λ = de Broglievåglängden

Dessa relationer gäller för alla partiklar (elektroner, fotbollar ...

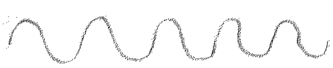
För en partikel som rör sig utan att känna av några yttre krafter en s.k. fri partikel är all mekanisk energi rörelseenergi

$$E = E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$$

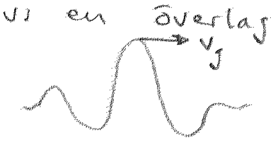
Om partikeln har en väldefinierad våglängd λ så kan vi beräkna dess fashastighet v_f enligt:

$$v_f = \lambda \cdot f = \frac{h}{p}\frac{E}{h} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2} v$$

men väldefinierad våglängd λ innebär oändlig utbredning



mer meningsfullt blir det om partikeln beskrivs av en s.k. grupp dvs en överlagring av flera våglängder



Man kan visa att denna grupp utbreder sig med en hastighet

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{p}{m} = v.$$

Heisenbergs osäkerhetsrelation ny "naturlag"

Det är omöjligt att samtidigt exakt bestämma både läge och rörelsemängd.

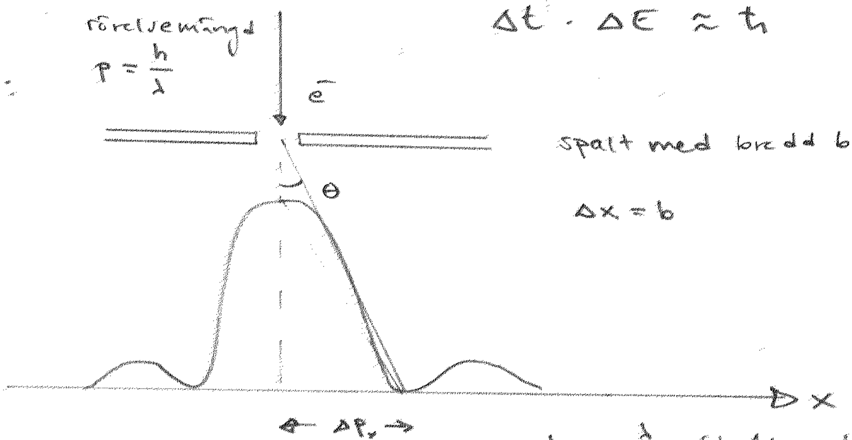
$$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$$

alt.

$$\Delta t \cdot \Delta E \approx \hbar$$

Illustration:

(ger allt utom 2π i $\hbar$.)



spalt med bredd b

$\Delta x = b$

$\sin\theta = \frac{\lambda}{b}$ vid 1:a min.

$$\Delta p_x = p \cdot \sin\theta = \frac{h}{\lambda} \cdot \sin\theta = \frac{h}{\lambda}\frac{\lambda}{b} = \frac{h}{b} = \frac{h}{\Delta x}$$

$$\Rightarrow \Delta p_x \cdot \Delta x \approx h$$

Vågfunktion och sannolikhetstäthet:

Partiklar beskrivs i kvantmekaniken av en materievåg $\Psi(\bar{r}, t)$

Intensiteten ges av $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$

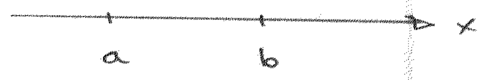
1 dim:

Sannolikheten att, vid tiden t, finna partikeln i interv. dx runt x ges av $|\Psi(x,t)|^2 \cdot dx$

Sannolikhetstätheten: $P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$

Sannolikheten att finna partikeln i $[a, b]$ vid tiden t =

$$= \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \, dx$$



Normeringsvillkor:

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

Om partikeln har välbestämd energi E, så gäller

$$\Psi(x,t) = e^{-i\omega t}\,\psi(x) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\,\psi(x)$$

$\psi(x)$ kallas <u>vågfunktion</u>.

<u>Hur bestämmer man Ψ el. ψ ?</u>

Svar: genom att lösa <u>Schrödingerekvationen</u>

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + E_p(x)\,\Psi = i\hbar\frac{d\Psi}{dt} \quad \left(\begin{array}{l}\text{tidsberoende} \\ \text{Schr. ekv.}\end{array}\right)$$

Med välbestämd energi E: $\Psi = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\,\psi(x)$

$\Rightarrow$ tidsoberoende Schr. ekv. $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + E_p(x)\,\psi = E\psi$

<u>3 dimensioner</u>:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\bar{r}) + E_p(\bar{r})\,\psi(\bar{r}) = E\,\psi(\bar{r})$$

Potentialens $E_p(\bar{r})$ symmetri bestämmer valet av koordinatsystem. Ibland cartesiska, ibland sfäriska.

Fri partikel: $E_p(x) = 0$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

$$\left.\begin{array}{l} E = E_{kin} = \dfrac{p^2}{2m} \\ p = \hbar k \end{array}\right\} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

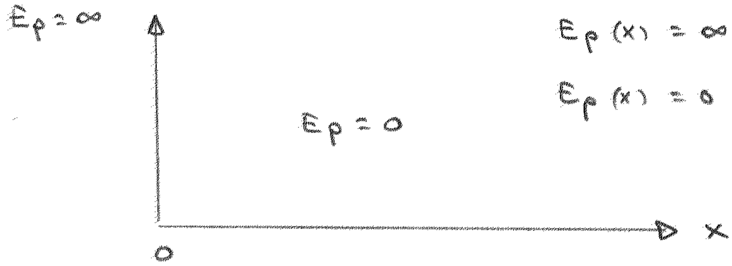
$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

lösningar:

$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} \quad \text{och} \quad \psi(x) = B \cdot e^{-ikx}$$

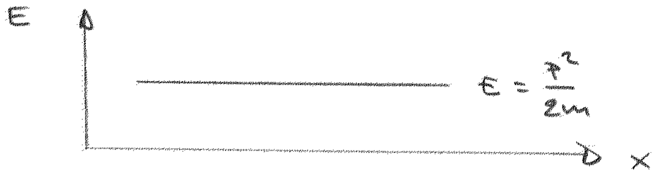
total osäkerhet i läge

Potentialvägg:



$E_p(x) = \infty \quad -\infty < x < 0$

$E_p(x) = 0 \quad 0 < x < \infty$



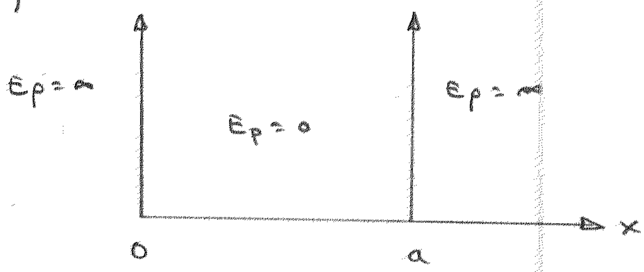
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx}$$

randvillkor $\psi(x=0) = 0 \Rightarrow A + B = 0 \Rightarrow B = -A$

$$\therefore \psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) =$$

$$= 2iA \cdot \sin kx = C \cdot \sin kx.$$

Potentiallåda (jätteviktigt)



Schrödingerekv.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad 0 < x < a \qquad \psi(x) = A\cdot e^{ikx} + Be^{-ikx}$$

randvillkor $\psi(x=0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi = C\cdot \sin kx$

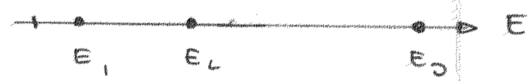
$\psi(x=a) = 0 \quad \Rightarrow \quad C\cdot \sin ka = 0$

$\Rightarrow \quad k = n\frac{\pi}{a} \qquad n = 1, 2, \ldots$

tillåtna k-värden.

konstant tillståndstäthet i k-rummet.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$



allt glesare mellan tillstånden ju större E är.

Bestämning av C!

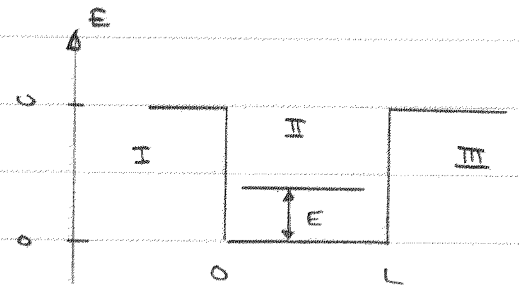
$$C^2\int_0^a \sin^2 kx\cdot dx = 1$$

$$\rightarrow \quad C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Olika potentialer (forts.)

Föreläsning 14:1

Partikel i låda vars väggar är ändligt höga.



Vi studerar bundna tillstånd dvs $E < U$.

I de klassiskt förbjudna områdena I och III har Schr. ekv. följande utseende

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m(U-E)}{\hbar^2}\psi$$

$U > E \quad \Rightarrow \quad \dfrac{d^2\psi}{dx^2} = C^2\psi \qquad C^2 = \dfrac{2m(U-E)}{\hbar^2}$

$$\psi = A e^{Cx} + B e^{-Cx}$$ A och B konst.

ψ ska vara kontinuerlig, och dessutom:

ψ måste vara ändlig överallt, $\Rightarrow$ $B = 0$ i område I

$A = 0$ i område III

Detta ger:

$\psi_{I} = A e^{Cx} \qquad x < 0$

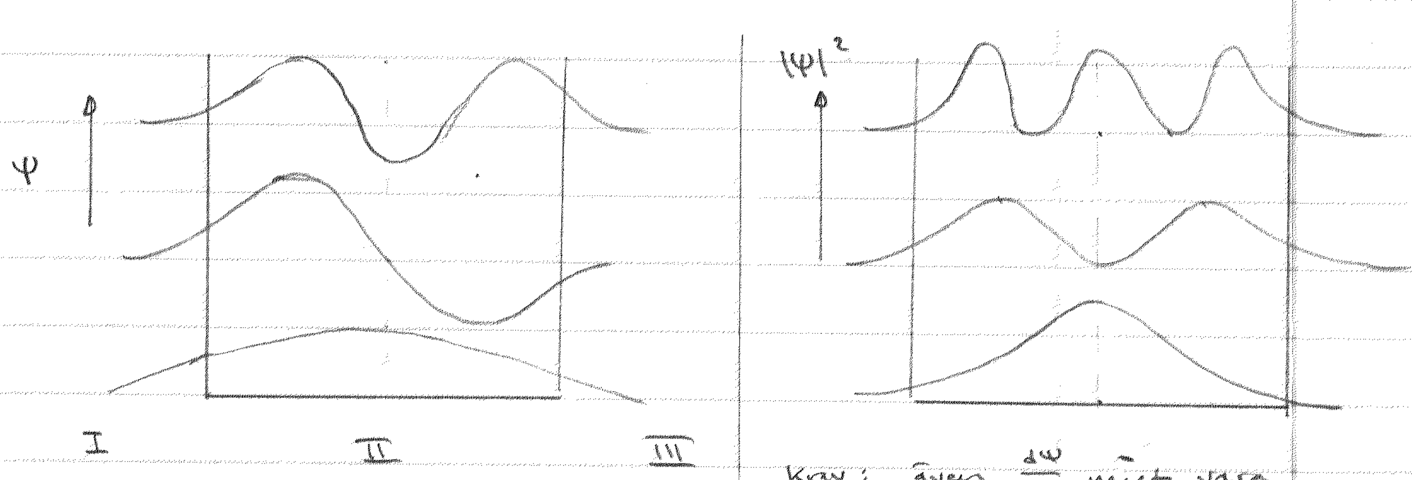
$\psi_{III} = B e^{-Cx} \qquad x > L$

Vågfunktionen avklingar exponentiellt utanför lådan.

$0 < x < L$:

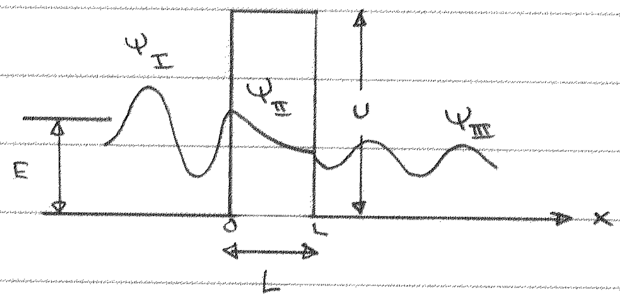
$$\psi_{II} = F \cdot \sin(kx) + G \cdot \cos(kx)$$

F och G är konstanter.



Krav: även $\dfrac{d\psi}{dx}$ måste vara kontinuerlig.

Tunneleffekten.



Klassiskt kan inga partiklar med $E < U$ penetrera barriären men i kvantmekaniken är alla områden tillgängliga för partikeln.

Krav $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$, $\frac{d\psi_I(0)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(0)}{dx}$

$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L)$, $\frac{d\psi_{II}(L)}{dx} = \frac{d\psi_{III}(L)}{dx}$

ψ måste vara ändlig överallt.

Vågfunktionen i såväl område I som II består av våg från vänster till höger samt en våg från höger till vänster
I område III består vågfunktionen endast av en våg från vänster till höger. (Inget finns som reflekterar vågen mot vänster om den väl kommit in i omr. III)

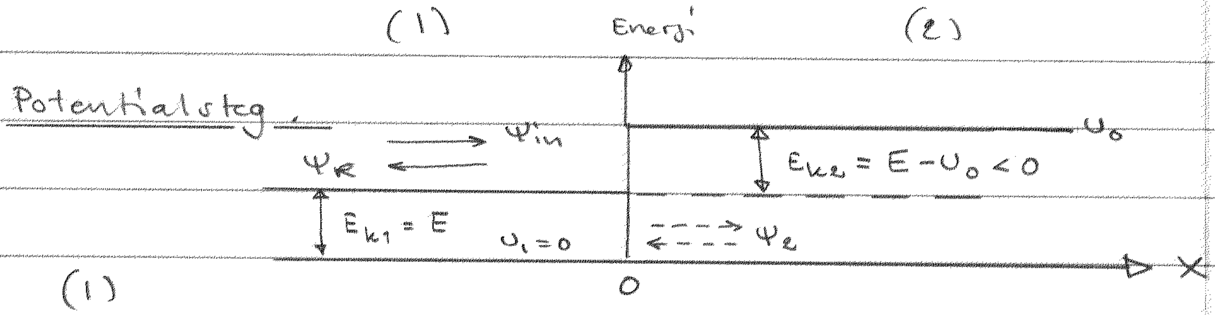
T = andel partiklar av de som sänds in mot barriären som tar sig igenom.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$K = \sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}}$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_1}{K} + \frac{K}{k_1}\right) \cdot \frac{1}{2}\left(e^{KL} - e^{-KL}\right)^2}$$

i fallet då $T \ll 1$ (hög och bred barriär) gäller $T \approx e^{-2KL}$



Infallande våg : $\Psi_{in} = A e^{jk_1 x}$

Refl. våg : $\Psi_R = B e^{-jk_1 x}$

omr. (2)

$$\Psi_2 = C \cdot e^{jk_2 x} + D e^{-jk_2 x}$$

$$E_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar}$$

$x \leq 0$: $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$x \geq 0$: $k_2 = \frac{\sqrt{2mE_{k2}}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$ ∴ k_2 imaginärt

skriv om $k_2 = j\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} = jk'$

$$\Rightarrow \Psi_2 = Ce^{j(jk')\cdot x} + De^{-j(jk')\cdot x} =$$

$$= Ce^{-k'\cdot x} + D\cdot e^{+k'\cdot x}.$$

$D = 0$ annars går $D \cdot e^{k' \cdot x}$ mot ∞ då $x \to \infty$

(1) : $\Psi_1 = A \cdot e^{jk_1 x} + B \cdot e^{-jk_1 x}$

(2) $\Psi_2 = C \cdot e^{-k' \cdot x}$

Ψ och $\frac{d\Psi}{dx}$ kontinuerliga vid $x=0$ (och överallt)

$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \Rightarrow A + B = C$

$\left(\frac{d\Psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\Psi_2}{dx}\right)_{x=0} \Rightarrow jk_1 A - jk_1 B = -k' C$

$\Rightarrow A - B = j\frac{k'}{k_1} C$

men $A + B = C$

$\Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{1 - j\frac{k'}{k_1}}{1 + j\frac{k'}{k_1}}$

Intensiteten hos partikelflödet : strömtäthet $J = -env$ $= -e|\Psi|^2 \cdot \frac{\hbar k}{m}$

$I = |\Psi|^2 \frac{\hbar k}{m} = \Psi^* \Psi \frac{\hbar k}{m}$

$R = \frac{I_R}{I_{IN}} = \frac{\Psi_R^* \Psi_R \frac{\hbar k_1}{m}}{\Psi_{IN}^* \Psi_{IN} \frac{\hbar k_1}{m}} = \frac{\Psi_R^* \Psi_R}{\Psi_{IN}^* \Psi_{IN}} = \frac{B^* e^{jk_1 x} \cdot B e^{-jk_1 x}}{A^* e^{-jk_1 x} \cdot A e^{jk_1 x}} =$

$= \frac{B^* B}{A^* A} = \left(\frac{B}{A}\right)^* \left(\frac{B}{A}\right) = \left(\frac{1 + j\frac{k'}{k_1}}{1 - j\frac{k'}{k_1}}\right)\left(\frac{1 - j\frac{k'}{k_1}}{1 + j\frac{k'}{k_1}}\right) = 1$

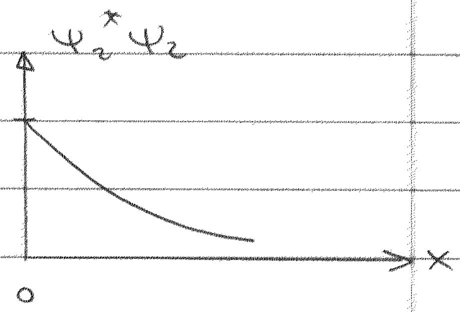
$\therefore$ hela elektronströmmen reflekteras. väntat.

I området $x \geq 0$ (kinet. energin negativ)

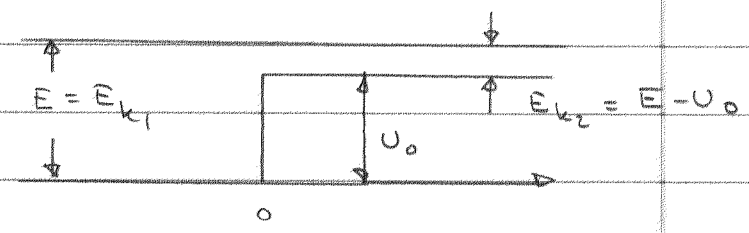
$$C = \frac{2A}{1 + j\frac{k'}{k_1}} \Rightarrow \Psi_2 = \frac{2A}{1 + j\frac{k'}{k_1}} e^{-k'x}$$

partikeldensitet $n_2 = \Psi_2^* \Psi_2 = \dfrac{4A^2}{\left(1 - j\frac{k'}{k_1}\right)\left(1 + j\frac{k'}{k_1}\right)} e^{-2k'x}$

$$= \frac{4A^2}{1 + \left(\frac{k'}{k_1}\right)^2} e^{-2k' \cdot x}$$



Nästa exempel:



$$\Psi_1 = A \cdot e^{jk_1 x} + B e^{-jk_1 x} \qquad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Psi_2 = C \cdot e^{jk_2 x} + \left(D \cdot e^{-jk_2 x} \right) \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

Ψ och $\dfrac{d\Psi}{dx}$ kontinuerliga ger

$$R = \frac{I_R}{I_{IN}} = \frac{B^2}{A^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

$$T = \frac{I_T}{I_{IN}} = \frac{C^2 k_2}{A^2 k_1} = \frac{4 k_1 \cdot k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

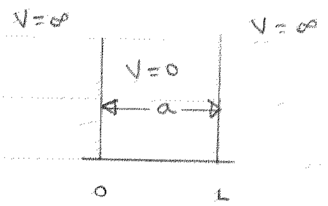
$R + T = 1$ VISA!

Kvantmekanisk beskrivning av väteatomen

Ψ innehåller all information om systemet
$\Psi^*\Psi$ ger sannolikhetstätheten
$\Psi^*\Psi \, dV$ ger sannolikheten att hitta partikeln inom dV

Schr. ekv i 1 dimension: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\,\Psi(x)$

ex.



$\Psi(x) = A\cdot\cos kx + B\cdot\sin kx$

randvillkor $\Rightarrow$ endast vissa k tillåtna

$E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma}$ kvantiserad energi

med $x=0$ i vänstra kanten

$\Rightarrow \Psi(x) = A\cdot\sin kx$ eftersom $\Psi(0)=0$

med $x=L$ i högra kanten

endast $k = n\cdot\frac{\pi}{L}$ tillåtna

antal tillstånd på given längd Δk:

$N = \frac{\Delta k}{\frac{\pi}{L}}$

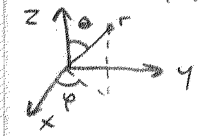
konstant tillståndstäthet i k-rummet

Väteatomen: $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ tredim. problem

Schrödingerekvationen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x,y,z) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi(x,y,z) = E\,\Psi(x,y,z)$$

Potentialen beror av r $\Rightarrow$ använd sfäriska koordinater r, θ, φ



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\right\}\Psi(r,\theta,\varphi) -$$

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi(r,\theta,\varphi) = E\,\Psi(r,\theta,\varphi)$$

Antag att vågfunktionen kan skrivas: $\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)$

Sätt in! Multiplicera med $-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{r^2\sin^2\theta}{R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)}$!

$$\Rightarrow \frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) - \frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) - \frac{2m}{\hbar^2}r^2\sin^2\theta\left[E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]$$

V.L beror endast av φ

H.L — " — r och θ

$\therefore$ V.L = konstant $= -m_l^2 \Rightarrow \Phi(\varphi) = \Phi_0 e^{jm_l\varphi}$

entydighet: $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi+2\pi) \Rightarrow m_l = 0, \pm1, \pm2, \ldots$

Normera Φ: $\int_0^{2\pi}\Phi^*\Phi\cdot d\varphi = 1 \Rightarrow \Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$\therefore$ $\boxed{\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{jm_l\varphi}}$ m_l är heltal ("magnetiska kvanttalet")

Även H.L = $-m_l^2$

Behandl. av H.L.: separera i r-del och θ-del!
(ger nytt H.L. och V.L.)
multiplicera med $1/\sin^2\theta$!

$$\Rightarrow \frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=$$

$$=-\frac{1}{\Theta\cdot\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}$$

samma sak igen: V.L = H.L = konstant

denna gång: sätt konstant = $l(l+1)$

H.L (Θ-delen): lösningarna slås upp i tabell
(associerade Legendrefunktioner)

lösbarhet endast om l är heltal
(l = banimpulsmomentkvanttalet)

$$\Theta(\theta)=P_l^{m_l}(\cos\theta)$$

dessutom måste $|m_l|\leq l$

ex. $l=2 \Rightarrow m_l=0,\pm1,\pm2$

V.L (r-delen): lösningar existerar endast om energin E är kvantiserad enligt:

$$E_n=-\frac{1}{n^2}\frac{m}{2\hbar^2}\left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right]^2=$$

$$=-13{,}6\,\frac{1}{n^2}\ (\mathrm{eV})$$

dessutom krävs

n heltal $\geq l+1$

$\Psi(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\,\Theta_{lm_l}(\theta)\,\phi_{m_l}(\varphi)$ se Physics handbook

Vi har alltså tre kvanttal n, l och m_l som är kopplade till varandra.

Elektroner som har samma värde på huvudkvanttalet n sägs tillhöra samma <u>skal</u>. $n =$ 1 2 3 4

skalbetckn. K L M N

För fixt n har vi följande tillåtna värden på l:

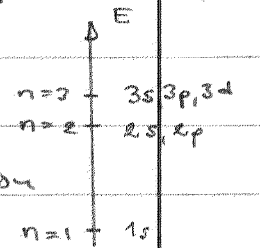
$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots, n-1$$

beteckning: s, p, d, f

När vi skriver beteckningen 1s eller 3d menar vi att $n=1$ $l=0$ resp. $n=3$ $l=2$

För fixt l: $m_l = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l$

Om vi löser den relativistiska Schrödingerekvationen dyker ytterligare ett kvanttal upp, vilket brukar kallas spinnkvanttalet. I den här kursen räcker det med att veta att spinnkvanttalet kan anta endast två värden $+\frac{1}{2}$ och $-\frac{1}{2}$. Man brukar tala om spinn upp $(+\frac{1}{2})$ och spinn ned $(-\frac{1}{2})$.



I väteatomen bestäms energin endast av n.
Flera olika tillstånd har samma energi: degeneration

Elektronens rörelsemängdsmoment L bestäms av

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \qquad \text{ex. } l=0 \Rightarrow L=0$$
$$l=1 \Rightarrow L=\sqrt{2}\,\hbar$$

Väteatomen i grundtillståndet:

$$\psi_{100} = \left[2\frac{1}{\sqrt{a^3}}e^{-r/a}\right]\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{j\cdot 0\cdot\varphi} = \underline{\underline{\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}}}$$

$a =$ Bohrradien ($\approx 0{,}53$ Å)

Allmänt:

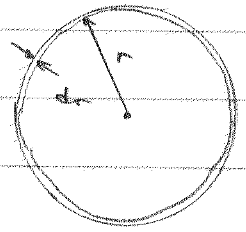
$$\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \Psi^*_{nlm_l}\,\Psi_{nlm_l}\,\overbrace{r^2\cdot\sin\theta\,dr\,d\varphi\,d\theta}^{\text{Volymselement } dV} = 1$$

elektronen finns någonstans i universum med sannolikhet = 1.

I den här kursen kommer vi att begränsa oss till studier av sfäriskt symmetriska vågfunktioner (dvs enbart r-beroende vågfunktioner) Ψ_{n00}

Då ges volymselementet vid radien r och med tjockleken dr av

$$dV = 4\pi r^2\cdot dr.$$



Normeringsvillkoret:

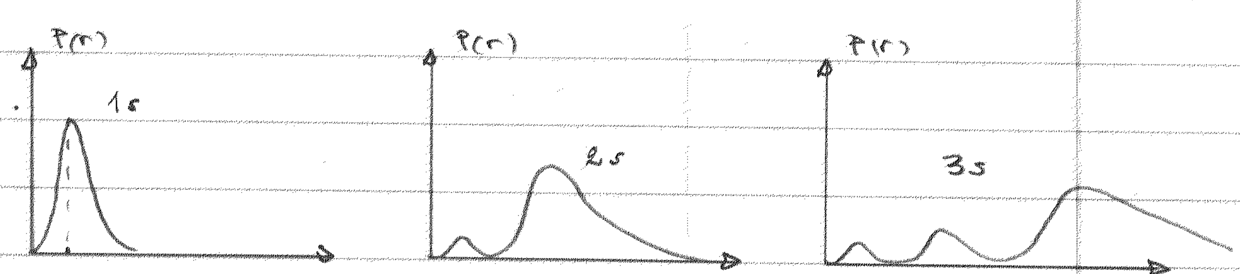
$$\int_0^\infty \Psi^*_{n00}\,\Psi_{n00}\cdot 4\pi r^2\cdot dr$$

Sannolikheten att finna elektronen i intervallet [a, b] ges av

$$\int_a^b \Psi^*\Psi\cdot 4\pi r^2\cdot dr$$

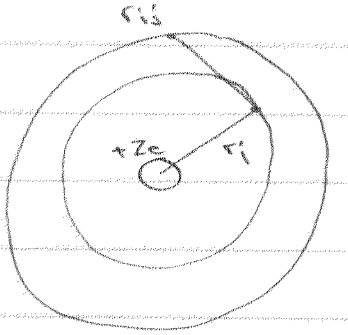
Sannolikheten per längdenhet P(r) ges av

$$P(r)\cdot dr = \Psi^*\Psi\cdot 4\pi r^2\cdot dr \Rightarrow P(r) = \Psi^*\Psi\cdot 4\pi r^2$$



antalet lokala maxima hos P(r) = värdet på n.

Flerelektronatomer   N st. elektroner.



$$E_p = -\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i} - \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} \right)$$

Lösn. av Schr. ekv formidabel uppgift
Approximationer nödvändiga.

Varför inte alla elektroner i lägsta tillståndet?

Pauliprincipen: Två elektroner (fermioner) i samma system kan inte ha samma uppsättning kvanttal

I en atom: olika $n\,l\,m_l\,s_z$

Periodiska systemets uppbyggnad:

	n	skalbeteckning
olika n ger olika skal	1	K
	2	L
	3	M
	4	N.

För givet n ger olika l underskal

n	1	2				3					
l	0	0	1			0	1	2			
m_l	0	0	−1	0	+1			−2	−1	0	1 2
s_z	↑↓	↑↓	↓↑	↓↓	↓↑			↑↓	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓
						8		10			
ant. el.	2	8				18.					

Fö 16, 7
& 17

(antal elektroner)

elektronkonfiguration: $n\,l$

n: 1, 2, ...

l = 0 bet. s
1 p
2 d
3 f

ex.

1) H : $1s^1$

2) He : $1s^2$ fullt K-skal

3) Li : $1s^2 2s^1$

4) Be $1s^2 2s^2$

B $2p^1$

C $2p^2$

N $2p^3$

O

F

10 Ne $2p^6$ Fulla K- och L-skal

11 Na $2p^6\,3s$

⋮ ⋮

18 Ar $2p^6\,3s^2\,3p^6$

19 K ?

Egentligen beror energin av både n och l om vi tar hänsyn till el. spinnet.

empirisk lag: lägsta värde på $n+l$ ger lägst energi
vid lika värde på $n+l$ välj lägsta n!

K : nästa el. 3d ? : $3+2=5$
nej ty 4s : $4+0=4$

∴ K : $1s^2 \ldots 3p^6 4s$.