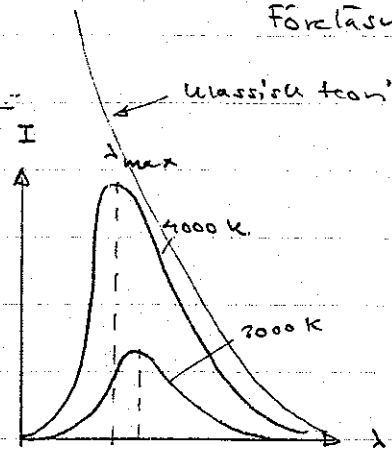


Introduktion till kvantfysiken

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 "ultraviolett katastrof"

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

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

$$E_n = n h f \quad n = \text{positivt heltal}$$

$$E_1 = h f, \quad E_2 = 2 h f, \quad E_3 = 3 h f, \dots$$

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

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

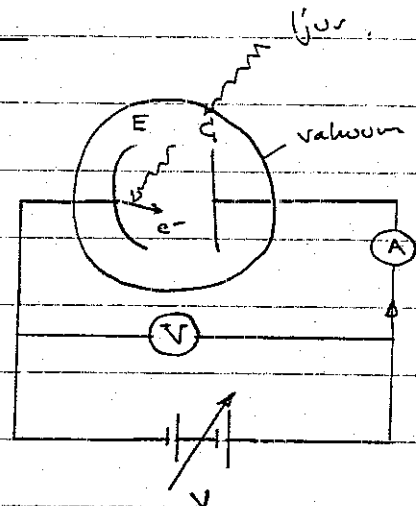
(Plancks strålningslag)

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.

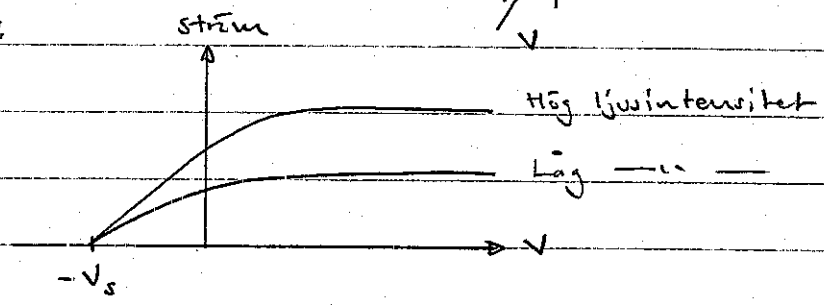
Kvantiserade energinivåer viktigt steg.

Fotoelektriska effekter.

Ljus har partikelegenskaper.



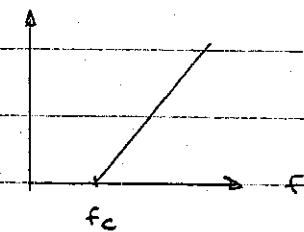
Experiment:



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

Klassiska fysik oförmågen 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 bakgrundinformation
I Fysik 2 studerar den mer i samband med relativitetsteori.

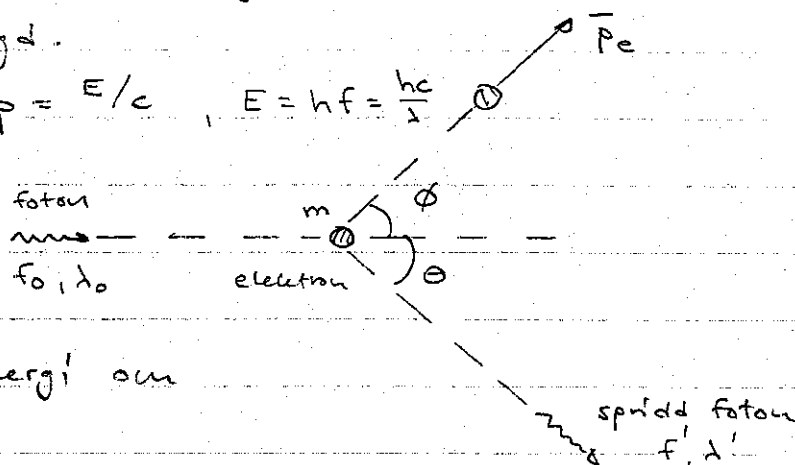
Comptoneffekten - spridning av röntgenstrålning mot elektroner

Fotonen har rörelsemängd.

Einsteins hypotes:

$$p = E/c, \quad E = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

Experiment:



Bevarande av total energi och
rörelsemängd

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

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

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

Rörelsemängdkonservering.

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

y-led: $0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \theta - \gamma mv \sin \phi$
 $= \lambda_c = 0,0243 \text{ Å}$

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

Perfekt överensstämmelse mellan teori och experiment
 $\Rightarrow$ kvantteori blev allmänt accepterad

Bohrmodellen

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

ex vätes emissionspektrum

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

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

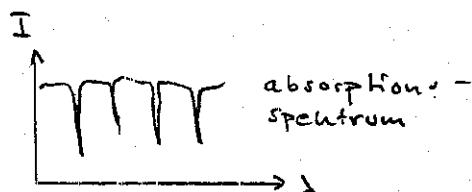
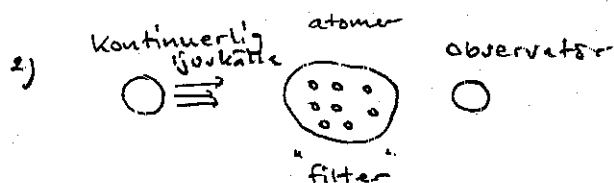
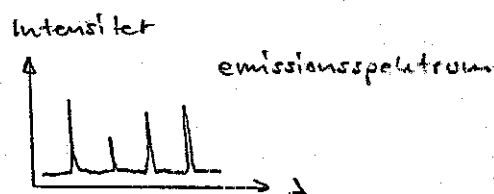
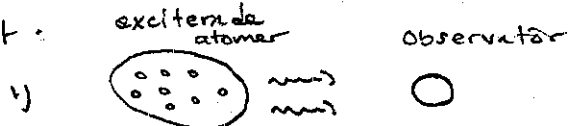
Linjer med

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

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

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

Allmänt:

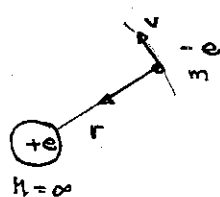


Hur förklarar man de olika spektrals utseende? Vi koncentrerar oss på den allra enklaste atomen, väteatomen.

klassisk behandling:

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

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



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

Coulombkraft

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

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

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

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

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 inte:

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

Bohrs postulat.

- a) elektronen kretsar runt kärnan i stabila banor utan att strålning 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 heltalmultiplikel av h

$$\oint p \, ds = nh$$

c) leder till

$$p \cdot 2\pi r = 2\pi mvr = nh$$

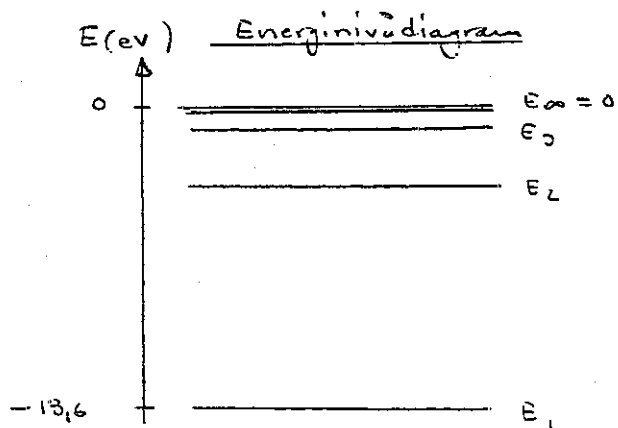
$$\Rightarrow mvr = n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow r = n \frac{h}{2\pi mv} \quad \left. \begin{array}{l} \uparrow nh = L \end{array} \right\} \Rightarrow$$

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

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

$\uparrow$
Bohrradien

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



Energien är kvantiserad och för bundna tillstånd är energin negativ

$n =$ huvudkvanttalet

Kvantmekanik

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

Kvantmekaniska partiklar beskrivs av MATERIEVÄGOR

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)

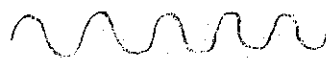
För en partikel som rör sig utan att känna av några yttre krafter en s.k. fri partikel är alla mekanisk energi rörelseenergi

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

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

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

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"

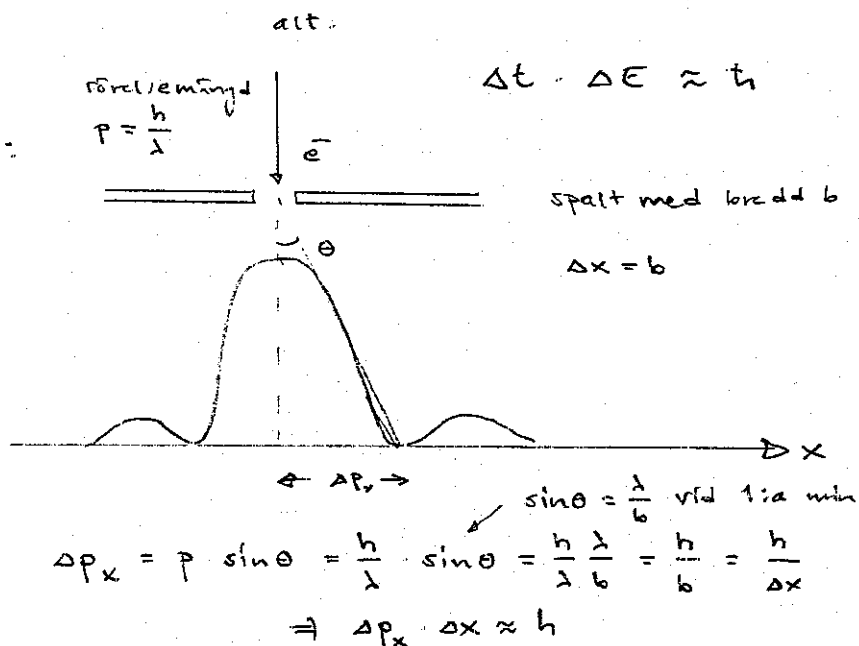
Det är omöjligt att samtidigt exakt bestämma både läge och rörelsemängd.

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx h$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \approx h$$

Illustration:

(ger allt utom $2\pi i \hbar$)

Vågfunktion och sannolikhetsföret:

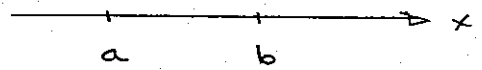
Partiklar beskrivs i kvantmekaniken av en materieföret $\Psi(\vec{r}, t)$
Intensiteten ges av $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$

1 dim.

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

Sannolikhetsföret $P(x, t) \equiv |\Psi(x, t)|^2$

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

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

$\Psi(x)$ kallas vågfunktion.

Hur bestämmer man Ψ el Ψ ?

Svar: genom att lösa Schrödingerekvationen

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

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

$$\Rightarrow \text{tidsoberoende Schr. ekv.} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + E_p(x) \Psi = E \Psi$$

3 dimensioner:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + E_p(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

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

Fri partikel

$$E_p(x) = 0$$

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

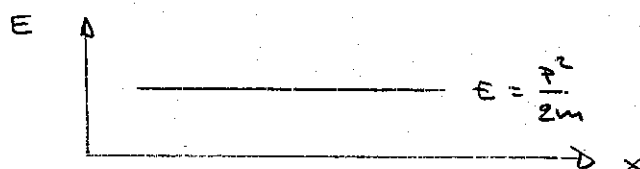
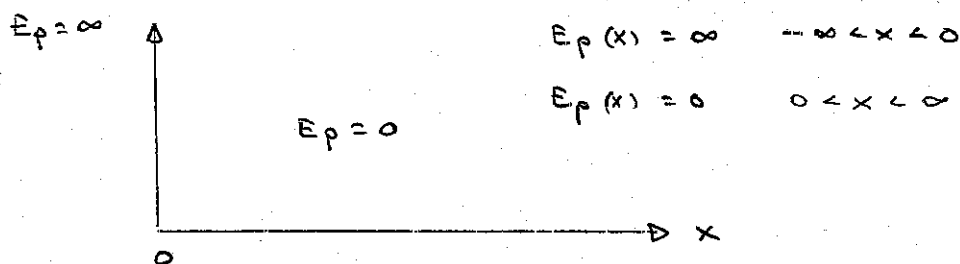
$$\left. \begin{array}{l} E = E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} \\ p = \hbar k \end{array} \right\} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

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

lösningar:

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

total osäkerhet i läge

Potentialvägg:

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

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

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

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

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

Potentiallåda (jätleviktigt)

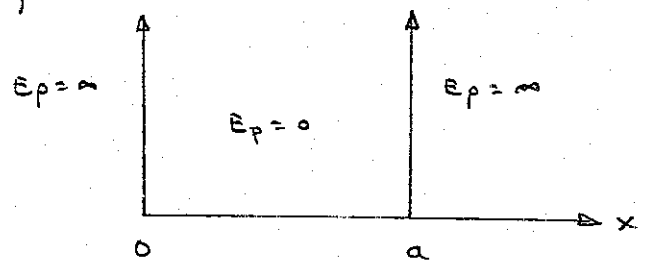
Schrödingerekv.

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

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad 0 < x < a$$

randvillkor $\psi(x=0) = 0$

$\psi(x=a) = 0$

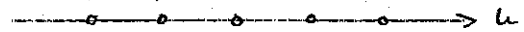


$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx}$$

$\Rightarrow \psi = C \cdot \sin kx$

$\Rightarrow C \cdot \sin ka = 0$

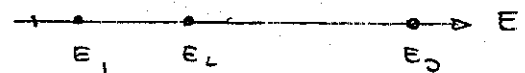
$$\Rightarrow k = n \frac{\pi}{a} \quad n = 1, 2, \dots$$



Kvantiserade k-värden.

konstant tillståndstäthet i k-rymden.

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



allt längre mellan tillstånden ju större E är

Bestämning av C!

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

$$\Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

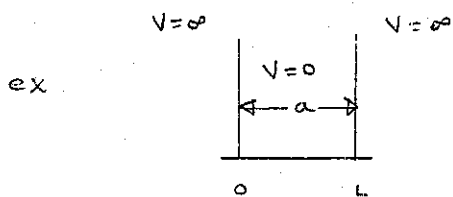
Kvantmekanisk beskrivning av väteatomen

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: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x)$



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

randvillkor $\Rightarrow$ endast vissa k tillåtna

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

med $x=0$ i vänstra kanten

$$\Rightarrow \Psi(x) = A \sin kx \quad \text{eftersom} \quad \Psi(0) = 0$$

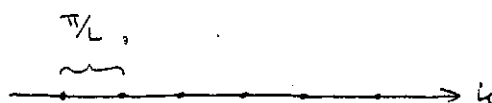
med $x=L$ i högra kanten

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

antal tillstånd på given längd Δk :

konstant tillståndstäthet i kromum

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

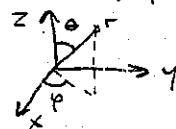


Väteatomen : $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ tredim problem

Schrödingerekvationen :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

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



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi)$$

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

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

$$\Rightarrow \frac{1}{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varphi^2} = -\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \theta \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right]$$

V, L beror endast av φ

H, L ——— r och θ

$$\therefore V, L = \text{konstant} = -m_l^2 \Rightarrow \phi(\varphi) = \phi_0 e^{jm_l \varphi}$$

entydighet : $\phi(\varphi) = \phi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Normera ϕ : $\int_0^{2\pi} \phi^* \phi d\varphi = 1 \Rightarrow \phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$$\therefore \boxed{\phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{jm_l \varphi}}$$

m_l är heltal
("magnetiska kvantitet")

Även $H.L = -m_l^2$

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

$$\Rightarrow \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) =$$

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

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 legendfunktioner)

lösbarhet endast om l är heltal
(l = banimpulsmomentkvanttalet)

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

dessutom måste $|m_l| \leq l$

$$\text{ex. } l=2 \Rightarrow m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$

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

$$E_n = - \frac{1}{n^2} \frac{m}{2\hbar^2} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right]^2 =$$

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

dessutom krävs

$$n \text{ heltal} \geq l+1$$

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

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

Elektroner som har samma värde på huvudkvanttalet n säger

härifrån samma skal . $n = 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4$
skalbeteckn. K L M N

För fixt n har vi följande tillåtna värden på l :

$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$
beteckning: $\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$
 s, p, d, f

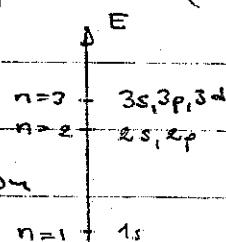
När vi skriver beteckningen $1s$ eller $3d$ menar vi att $n=1, l=0$ resp. $n=3, l=2$

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

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: degeneraton



Elektronens rörelsemängdsmoment L bestäms

av

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

$$l=1 \Rightarrow L=\sqrt{2}\hbar$$

Väteatomen i grundtillståndet:

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

$a = \text{Bohrradien} (\approx 0,53 \text{ \AA})$

Allmänt:

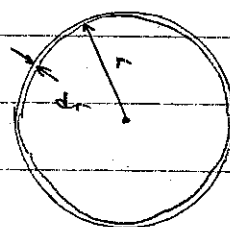
$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \underbrace{\Psi_{nlm}^* \Psi_{nlm}}_{\text{Volymelement } dV} r^2 \sin\theta dr d\varphi d\theta = 1$$

elektronen finns någonstans i universum med sannolikhet = 1.

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

Då ges volymelementet vid radien r och med tjockleken dr av

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



Normeringsvillkor:

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

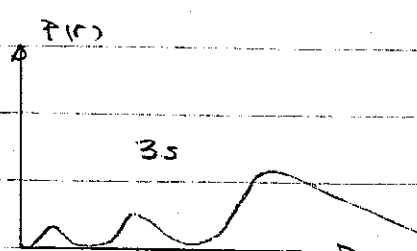
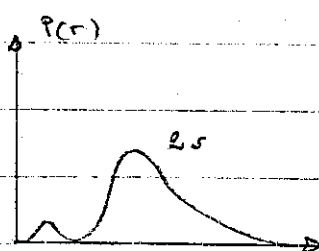
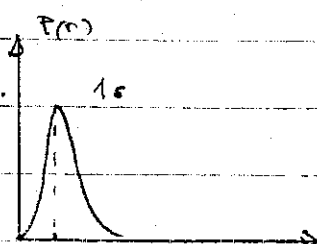
Sannolikheten att finna elektronen i intervaller $[a, b]$

ges av

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

Sannolikheten per längdenhet $P(r)$ ges av

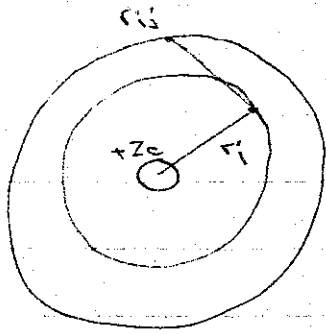
$$P(r) \cdot dr = \Psi^* \Psi \cdot 4\pi r^2 \cdot dr \Rightarrow P(r) = \Psi^* \Psi \cdot 4\pi r^2$$



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

Flerelektronatomer

N st elektroner



$$E_p = - \left(\sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} - \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right)$$

Lös. 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

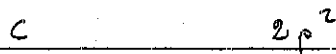
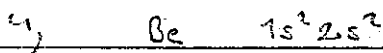
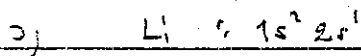
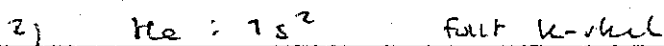
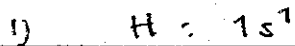
För givet n ger olika l underskal

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	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$
ant. el	2	8	18

electronkonfiguration: n, l (antal elektroner)

$1, 2, \dots$	$l=0$	bet.
	1	s
	2	p
	3	d
	4	f

ex.



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

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

