Introduktion til kvantemekanik

Indhold

En statistisk beskrivelse ... 3

Bølgefunktionen ... 4

Eksempel ... 4

Opgave 1 ... 5

Tidsafhængig og tidsuafhængig ... 5

Opgave 2 ... 6

Hvordan må bølgefunktionen se ud ... 6

Opgave 3 ... 7

En en-dimensional partikel i en kasse. ... 7

Sammenhængen mellem bølgelængde og hastighed ... 8

Opgave 4 ... 9

Opgave 5 ... 9

Opgave 6 ... 9

Opgave 7 ... 10

Lidt matematik ... 11

Opgave 8 ... 11

Opgave 9 ... 11

Opgave 10 ... 12

Bølgens amplitude ... 12

Eksempel ... 13

Opgave 11 ... 14

Opgave 12 ... 14

Opgave 13 ... 14

Schrödinger-ligningen ... 14

Opgave 14 ... 15

Den klassiske løsning ... 17

Brintbølgefunktionerne og brint-energi-nivauer ... 18

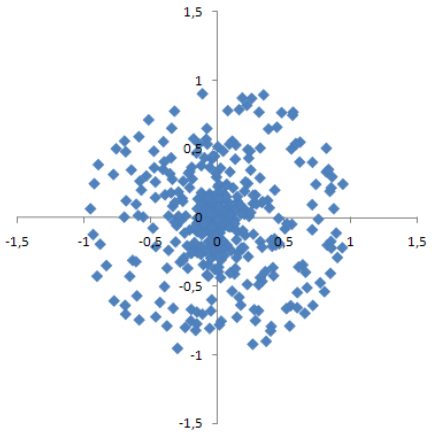
Bestemmelse af energi-niveauer ... 18

Opgave 16 ... 18

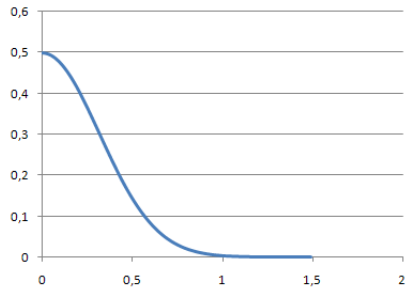
Eksempel 19
Opgave 17 19
Opgave 18 20
Eksperimentel øvelse 20
Elektroner mod et gitter 21
Opgave 19 21

En statistisk beskrivelse

I en ikke idealiseret verden, er en statistisk beskrivelse tit den eneste mulighed. Forestil dig, at du skal forudsige, hvor nedslaget af et projektil fra en ny kanon vil være. Du kunne nu regne på krudtmængden, trykket i affyringskammeret, mundingshastigheden på kanonen, vinden og så videre. Selv efter disse beregninger vil det være umuligt præcist at sige, hvor projektilet vil slå ned. Små variationer i krudtmængden og vinden vil gøre, at projektilet nogle gange vil flyve lidt længere, nogle gange lidt til venstre og andre gange til højre. Hvis du alligevel vil beskrive, hvor projektilet rammer, kunne du affyre kanonen mange gange under forskellige vejrforhold, og så se, hvor projektilet landede. På figur 1 er afbildet nedslagsstederne for mange forskellige affyringer af kanonen.



Figur 1: Nedslagssteder



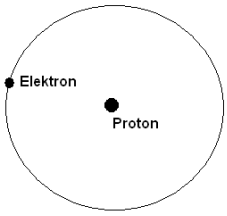
Figur 2: Sandsynligheden for at afstanden til nedslagsstedet fra centrum er af en bestemt størrelse

Der er flest nedslag omkring punktet (0,0) og tætheden af nedslag falder jo længere man bevæger sig væk fra dette punkt. Når man når længere end afstanden 1 væk fra centrum, findes der ikke flere nedslag. Ud fra nedslagsbilledet kan man danne sig et indtryk af, hvor det er mest sandsynligt, at nedslagene finder sted. Ved at inddele nedslagsområdet i en række små kasser, og tælle hvor mange nedslag der findes i hver sin kasse, kan man lave en sandsynlighedsfordeling af hvordan nedslagene finder sted. På figur 2 er vist sandsynligheden for at et nedslag finder sted i en bestemt afstand fra centrum. Vi ser igen at sandsynligheden falder, jo længere vi bevæger os væk fra centrum.

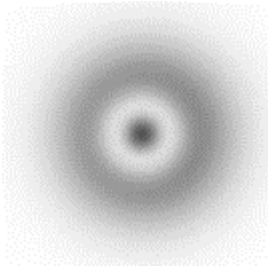
I en simpel opfattelse af et brintatom opfattes atomet som et lille solsystem med en lille hård kerne i midten, hvorom der kredser en lille hård elektron-partikel (se figur 3). I en kvantemekanisk beskrivelse af atomet spørger vi, med hvilken sandsynlighed vi i en bestemt afstand fra atomkernen vil finde elektronen, *hvis vi målte efter*.

Kvantemekanik drejer sig om at bestemme sandsynligheden for at finde et bestemt tal hvis vi foretager en måling.

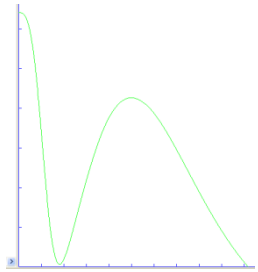
Vi kunne bestemme denne sandsynlighed ved at måle en masse gange og derefter fremstille en graf, der angiver sandsynligheden for at finde elektronen i en bestemt afstand. En kvantemekanisk beskrivelse af brintatomet kunne derfor angives som på figur 4. Her er der større



Figur 3



Figur 4



Figur 5

sandsynlighed for at finde elektronen i de mørkere områder. Grafen der beskriver sandsynligheden for at finde elektronen i en bestemt afstand fra brintatomets kerne kunne se ud som på figur 5. Kvantefysik drejer sig om at bestemme sådanne sandsynlighedsfordelinger. Vi ønsker med andre ord at bestemme den funktion som beskriver sandsynligheden for at måle et eller andet (læs f.eks. Kvantemekanik "Atomernes vilde verden side 54-63).

Bølgefunktionen

Det har vist sig, at man bliver nød til at gå en lille omvej for at finde den omtalte sandsynligheds-funktionen. Man bliver ofte nød til først at bestemme en funktion, som kaldes bølgefunktionen. Meget kvantefysik drejer sig om, at finde bølgefunktionen. Denne betegnes traditionelt med det græske bogstav ψ (som udtales *Ps*)*i*. Inden vi kan udregne sandsynligheden for, at en partikel findes indenfor et bestemt område, må vi med lave en ny funktion ved at kvadrere denne funktion

I kvantemekanik finder man den funktion som beskriver sandsynligheden ved først at finde bølgefunktionen.

$$S(x) = (\Psi(x))^2$$

Sandsynligheden for at finde en partikel udregnes ved at bestemme arealet under grafen for funktion *S(x)*.

Eksempel

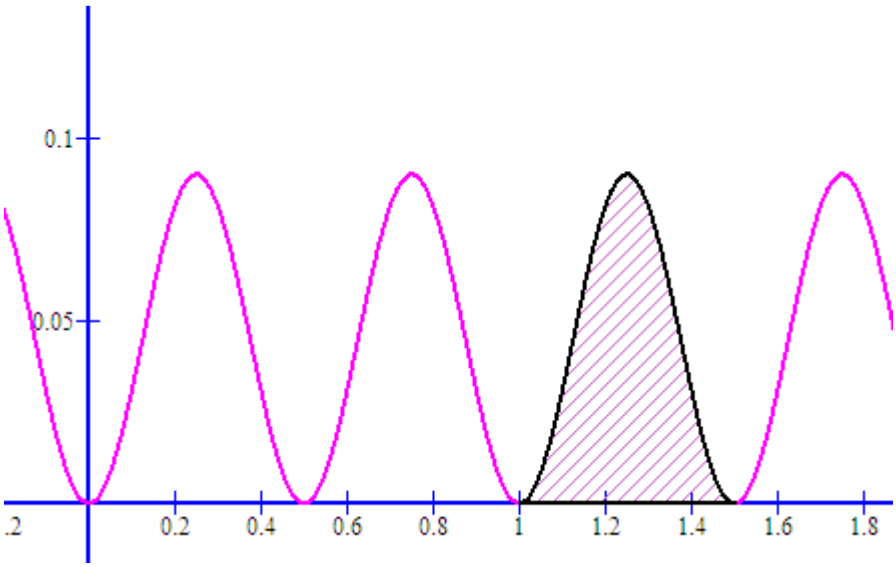
Lad en bølgefunktion være givet ved

$$\psi = 0.3 \cdot \sin(360 \cdot x)$$

Hvor x angiver en afstand. Vi ønsker at bestemme sandsynligheden for, at partiklen findes indenfor intervallet [1;1.5]. Første opskrives funktionen *S(x)*

$$S(x) = \Psi(x)^2 = (0.3 \cdot \sin(360 \cdot x))^2$$

Denne funktion er grafisk afbildet nedenfor



Sandsynligheden for at finde partiklen i intervallet fra 1 til 1.5 er arealet mellem x-aksen og grafen for *S(x).* Med programmet *Graph* kan man let finde dette areal: man starter programmet *Graph*, tegner grafen for funktionen *S(x)*, og trykker på ikonet . Nu kan man indtaste et område, og udregne arealet mellem x-aksen og grafen. I vores eksempel bliver arealet 0.0225=2.25%. Sandsynligheden for at finde partiklen i intervallet [1;1.5] er altså 2.25%.

Opgave 1

a.) En partikel er beskrevet ved en bølgefunktion, som er givet ved $\psi(x) = \sqrt{0.4} \cdot e^{-x^2}$. Hvad er sandsynligheden for at finde partiklen indenfor intervallet fra 0.5 til 1 (Denne opgave kan kun løses numerisk)?

b.) En partikel er beskrevet ved en bølgefunktion, hvor ψ(x) er 0 udenfor intervallet [-π/2; π/2] og givet ved $\psi = \cos(x)$ i intervallet [-π/2; π/2]. Tegn den graf som beskriver sandsynligheden for at finde partiklen i intervallet [-2;2].

Tidsafhængig og tidsuafhængig

Når to atomer støder sammen, vil den bølgefunktionen, som beskriver elektronerne ændre sig hele tiden gennem stødet. Man siger at bølgefunktionen ændrer sig i tiden. Når et atom er i ro og der ikke sker nogle ændringer med det, er bølgefunktionen som beskriver elektronerne også i ro. Bølgefunktionen ændrer sig ikke når tiden går, og man siger at bølgefunktionen er tids-uafhængig. Man siger at bølgefunktioner som ikke ændrer sig i tiden (altså en tidsuafhængig bølgefunktion) beskriver en *stationær tilstand* i atomet. Elektronen i et brint-atom kan kun findes i nogle ganske bestemte *stationære tilstande*. Hvis man vil finde ud af, hvilke stationære tilstande et brintatom kan være i, må man bestemme de mulige tidsuafhængige bølgefunktioner, som kan eksistere.

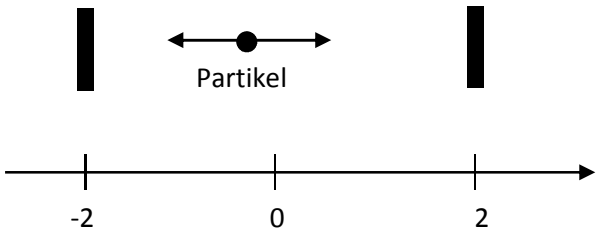
Opgave 2

Skriv en sætning der beskriver hvad der menes med hvert af følgende ord:

a.) Bølgefunktion
b.) Sandsynlighed
c.) Den stationære tilstanden for et atom
d.) tidsuafhængighed

Hvordan må bølgefunktionen se ud

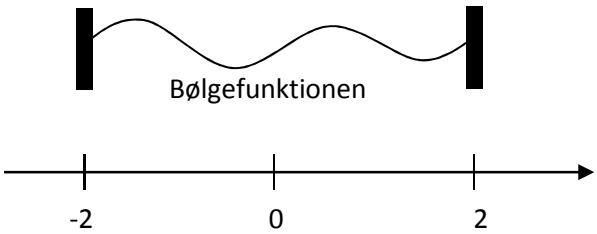
Når man skal bestemme en bølgefunktion for en partikel, må man starte med at se på den situation partiklen befinder sig i. Hvis partiklen frit kan bevæge sig f.eks. mellem punkterne x=-2 og x=2, men ikke kan komme udenfor disse grænser, så må sandsynligheden for at finde partiklen (hvis man målte) være nul udenfor intervallet [-2;2].



Hvis sandsynligheden for at finde partiklen er nul, må funktionen ψ (x) være nul, for ellers ville S(x)= ψ $(x)^2$ ikke kunne være nul og der ville findes et areal mellem x-aksen og grafen for *S(x)*. Vi ved altså allerede – bare ved at tænke over hvor partiklen kan findes – hvordan bølgefunktionen ser ud udenfor intervallet

$$\psi(x) = 0 \;\; Når\ x < -2\ eller\ x > 2$$

Inde i en kasse kan partiklen bevæge sig helt frit. Kvantemekanikken beskriver hvordan man kan bestemme bølgefunktionen inden i kassen. De ligninger der bruges til at beskrive ψ (x) minder meget om de ligninger, der bruges til at beskrive mange andre former for bølger. Bølgefunktionen der beskriver partiklen inde i kassen minder derfor i form om f.eks. snorebølger, lydbølger, lys eller vandbølger. Ud fra vores kendskab til disse andre former for bølger, kan vi altså gætte på, hvordan bølgefunktionen inde i kassen ser ud. Et godt gæt på ψ (x) ville være noget i retning af den bølge som er angivet på figuren nedenfor:



En sådan bølge har alle de bølgeegenskaber som vi er vant til fra normale bølger. Vi kan tale om bølgefunktionen amplitude og om bølgens bølgelængde. Det er sådan, at en bølgefunktion skal være en

glat kurve, den må altså ikke pludselig knække eller springe i værdi. *Man skal kunne tegne den uden at løfte blyanten fra papiret*. Det vil i eksemplet med partiklen i kassen sige, at når bølgefunktionen skal være nul udenfor kassen, så må den også være nul på kassens sider. Bølgen starter således ved nul og svinger så op og ned (som en stående bølge på en streng) indtil vi når den anden side af kassen, hvor bølgens amplitude igen skal være nul, fordi den skal være nul på den anden side af vægen.

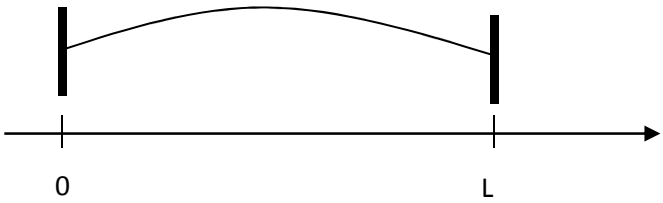
Opgave 3

a. Tegn 5 eksempler på hvordan ψ(x) kunne se ud, hvis den skulle beskrive en partikel i en en-dimensional kasse med længden på 10 cm.
b. Hvad er bølgelængden for hver af de 5 bølger?

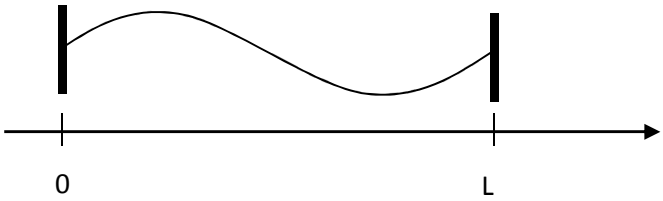
Vi ser af opgaven ovenfor, at med de bindinger som kassen giver (at $\psi(x)$ må være nul på kassens sider), er der kun nogle ganske bestemte bølgelængder, der kan komme på tale. Vi kan f.eks. ikke have en bølgelængde i eksemplet i opgaven ovenfor på 3 cm.

En en-dimensional partikel i en kasse.

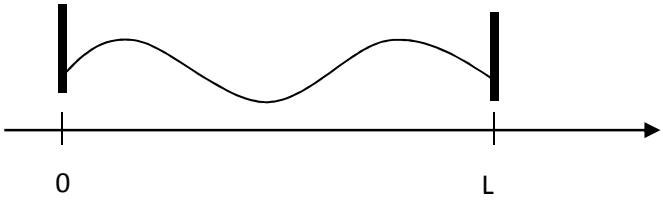
Ovenfor har vi set, at $\psi(x)$ ikke kan have vilkårlige bølgelængder. Nu skal vi være lidt mere præcise. Lad os forestille os en kasse med længden L. Heri findes en partikel med massen m. Vi ønsker nu at bestemme de mulige bølgelængder for bølgefunktionen. Vi ved, at $\psi(x)$ skal være nul i kassens ender. Mellem disse to nulpunkter kan der enten være ingen, et, to , tre, fire osv. steder, hvor funktionen har top eller bug. Lad os kalde antallet af steder, hvor bølgen enten har top eller bug mellem de to ender for *n*. Hvis bølgen ikke har præcis en top/bug mellem kassens to sider, må kassens længde være en halv bølgelængde, og bølgelængden på derfor være den dobbelte af kassens længe (altså $\lambda=2\cdot L$).



Hvis der til gengæld er to steder med top/bug mellem kassens sider, vil bølgelængden være lig med kassens længde.



Hvis funktionen har top/bug tre steder mellem kassens sider, må der være halvanden bølgelængde inde i kassen, og bølgelængden må derfor være $\lambda = \frac{2 \cdot L}{3}$



Hvis funktionen har top/bug fire steder mellem kassens sider, må der være to bølgelængde inde i kassen, og bølgelængden må derfor være λ=L/2. Når man fortsætter på denne måde, ser man, at hver gang der kommer et top/bug mere ind mellem kassens sider, bliver der plads til en halv bølgelængde mere inde i kassen. Antallet af halve bølgelængder mellem kassens sider er lig antallet af top/bug mellem kassens sider. For at finde længden af en halv bølgelængde, må man derfor dividere med antallet af top/bug. Skal man finde en hel bølgelængde skal man derefter gange med to.

Man kan nå frem til, at bølgelængden er

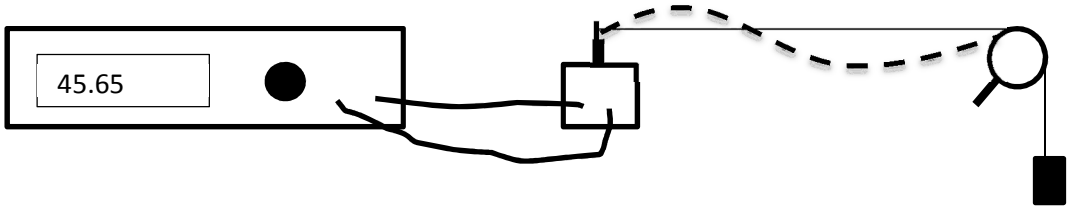
$$\lambda = \frac{2 \cdot L}{n}$$

Hvor n er antallet af top/bug mellem kassens to væge.

Dette svarer til de bølger man ser, når man eksperimenterer med en svingende streng.

Den kinetiske energi for en partikel kan udregnes som

$$E_{kinetisk} = \frac{h^2}{2 \cdot m \cdot \lambda^2}$$



Her finder man nogle tilsvarende resultater. Man kan med fordel lave dette forsøg for at øge sin forståelse for kvantemekaniske bølgefunktioner (se f.eks. Kvantemekanik Atomernes vilde verden side 20-21)

Sammenhængen mellem bølgelængde og hastighed

Bølgelængden hænger tæt sammen med partiklens hastighed. Hvis man f.eks. kender hastigheden kan man ud fra formlen

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

finde bølgelængden af bølgefunktionen *ψ(x)* (her er *h* = $6{,}62 \cdot 10^{-34}$ Js Plancks konstant - altså bare en naturkonstant med enheden joule gange sekund -, *m* er partiklens masse og *v* er partiklens hastighed). Vi kan omskrive denne formel og finde at partiklens hastighed er givet ved

$$v = \frac{h}{m \cdot \lambda}$$

Når vi kender hastigheden *v*, kan vi udregne den kinetiske energi af partiklen vha. formlen

$$E_{kinetisk} = ½ \cdot m \cdot v^2 = ½ \cdot m \cdot \left(\frac{h}{m \cdot \lambda}\right)^2 = \frac{h^2}{2 \cdot m \cdot \lambda^2}$$

Hvis bølgefunktionen kun kan findes med nogle gangske bestemte bølgelængder, kan vi se, at der kun er nogle ganske bestemte energier, som en partikel kan have, hvis den er lukket inde i en kasse. Dette er i modstrid med vores klassiske fysik. I den klassiske fysik, kan en partikel have en hvilken som helst hastighed og det afhænger ikke af, om den tilfældigvis befinder sig inde i en kasse. Dette er et eksempel på, at omgivelserne spiller en afgørende rolle for partiklers bevægelse i kvantemekanikken (se f.eks. Kvantemekanik Atomernes vilde verden side 50).

Opgave 4

Vi tænker nu på en elektron i en meget lille kasse. Denne kasses længde er kun 10^{-10} m. (det svarer nogenlunde til diameteren på et atom).

a. Hvad er de fem længste bølgelængder som en elektron kan have i en sådan kasse?
b. Hvilke energier svarer det til (elektronens masse er $9{,}1 \cdot 10^{-31}$ kg.)?

Det at man ikke kan have alle mulige energier for et system er en egenskab ved mange kvantemekaniske systemer. Man siger at energierne er *diskrete*. Det betyder bare, at der er spring imellem dem. Når man ønsker på en gang at tale om alle de mulige energier for et kvantemekanisk system, kalder man dem under et for systemets energi-spektrum.

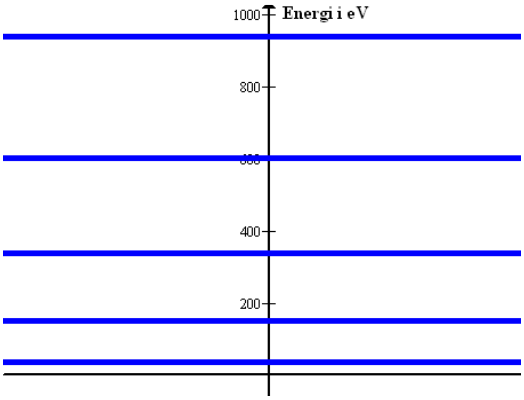
Opgave 5

a. Hvad betyder det, at energierne for et kvantemekanisk system er diskrete?
b. Hvad er energi-spektret for et kvantemekanisk system?

Opgave 6

a. Lav en formel der giver den kinetiske energi der svarer til n top/bug mellem kassens to væge.

Man nummerer de mulige energier ved at begynde med den laveste energi og så tæller gennem de mulige energier i stigende rækkefølge. Man taler om, at hver energi er et bestemt energi-niveau, som svarer til energiens nummer. Således bliver den 7. energi i rækken kaldt det 7. energi-niveau. Det nederste energi-niveau kaldes derudover for *grundtilstanden*. Nedenfor ses en udregning af de første 5 energi-niveauer for en elektron (med massen $9.1 \cdot 10^{-31}$kg.) i en en-dimensional kasse med sidelængden 10^{-10} m.



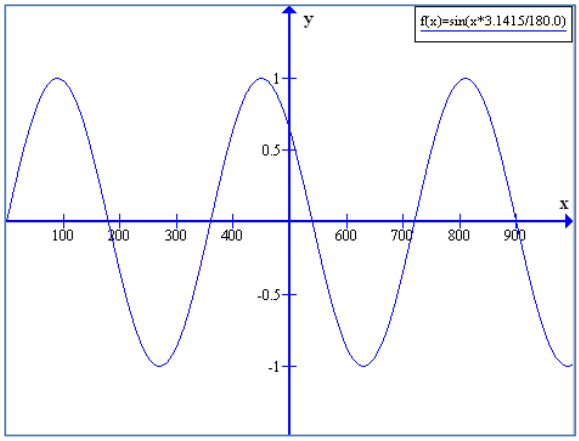
Læg mærke til, at den laveste energi ikke er nul. I dette tilfælde er den på 37 eV (en 1eV=$1.602 \cdot 10^{-19}$ J). Man siger at energien i grundtilstanden ikke er nul. Det kan tolke sådan, at partiklen faktisk ikke kan ligge stille inde i kassen.

Opgave 7

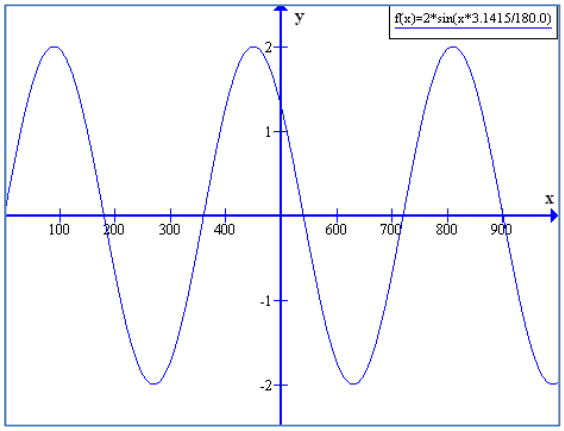
a. Hvad menes med det tredje energi-niveau?
b. Hvad menes med grundtilstanden?
c. Hvad betyder det at energi-niveauerne er diskrete?
d. Hvad betyder en stationær tilstand for et kvantesystem?
e. Hvad er grundtilstandens energi?

Lidt matematik

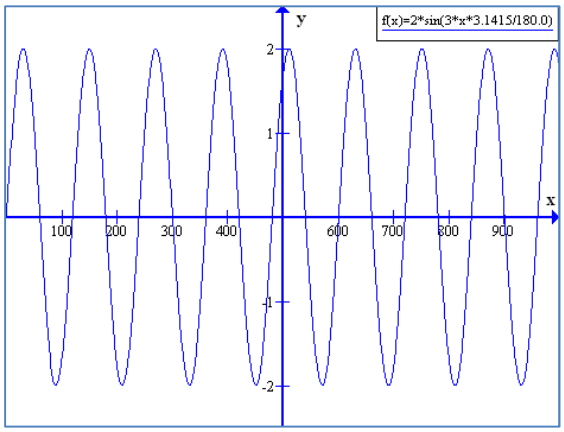
I fysik bruger vi ofte en sinus-funktion til at beskrive en bølge. Nedenfor ses en række forskellige sinusfunktioner



Funktionen sin(x)



Funktionen 2·sin(x)



Funktionen 2·sin(3·x)

Opgave 8

Hvad er amplituden og bølgelængden (aflæs på graferne) for de tre bølger ovenfor?

Man kan generelt kan vi sige, at hvis bølgelængden er λ, kan bølgens form beskrives med funktionen sin(ω·x), hvor ω=360/λ.

Opgave 9

Forklar hvorfor en bølge med bølgelængden er λ, kan bølgens form beskrives med funktionen sin(ω·x), hvor ω=360/λ

Vi kan nu beskrive bølgens form. Den bølge, der beskrives af funktionen f(x)=sin(ω·x) har amplituden 1. Hvis vi ønsker en bølge med en anden amplitude, ganges blot med amplitudens størrelse. Hvis vi f.eks. ønsker en bølge med amplitude 3, bliver funktionen der beskriver bølgen f(x)=3·sin(ω·x). Mere generelt kan en bølge med amplituden A beskrives ved f(x)=A·sin(ω·x). Nu ved vi både hvordan vi finder ω ud fra bølgelængden, og hvordan amplituden skal beskrives matematisk. Vi når derfor frem til, at en bølge med bølgelængde λ og en amplitude A kan beskrives med funktionen

En bølge med bølgelængden λ og amplituden A kan matematisk beskrives som

$$f(x) = A \cdot \sin\left(\frac{360}{\lambda} \cdot x\right)$$

$$f(x) = A \cdot sin\left(\frac{360}{\lambda} \cdot x\right)$$

Opgave 10

Beskriv en bølge med amplitude 0,003 og bølgelængde 45 matematisk

Bølgens amplitude

Vi har tidligere set at sandsynligheden for at finde en partikel hænger sammen med funktionen

$$S(x) = \Psi(x)^2$$

Hvis *ψ(x)* kan skrives

$$\Psi(x) = A \cdot sin\left(\frac{360}{\lambda} \cdot x\right)$$

så kan S(x) skrives

$$S(x) = \left(A \cdot sin\left(\frac{360}{\lambda} \cdot x\right)\right)^2 = A^2 \cdot sin^2\left(\frac{360}{\lambda} \cdot x\right)$$

Hvis vi er sikre på, at partiklen findes inde i kassen, så må sandsynligheden for at finde partiklen mellem kassens to sider være 100% (eller 1) – den er jo et eller andet sted derinde. Sandsynligheden for at finde partiklen mellem kassens to sider, er arealet mellem x-aksen og grafen for S(x). Vi må altså gøre amplituden præcis så stor, at dette areal bliver 1. For at gøre det, finder vi først arealet mellem x-aksen og grafen for funktionen $sin\left(\frac{360}{\lambda} \cdot x\right)^2$. Hvis dette areal f.eks. gav 0.1 ved vi, at vi har brug for en S(x)-funktion, der kan give et areal, der er 10 gange større (fordi 0.1 er 1/0.1 = 10 gange mindre end 1). En sådan S(x)-funktion kan vi skrive som

$$S(x) = 10 \cdot sin^2\left(\frac{360}{\lambda} \cdot x\right)$$

hvilket fortæller os, at $A^2 = 10$ eller at $A = \sqrt{10}$.

Mere generelt kan vi argumentere, at hvis arealet under funktionen $sin^2\left(\frac{360}{\lambda}\cdot x\right)$ giver tallet b, så må amplituden for ψ(x) være $A = \sqrt{\frac{1}{b}}$. Lad os se på et eksempel:

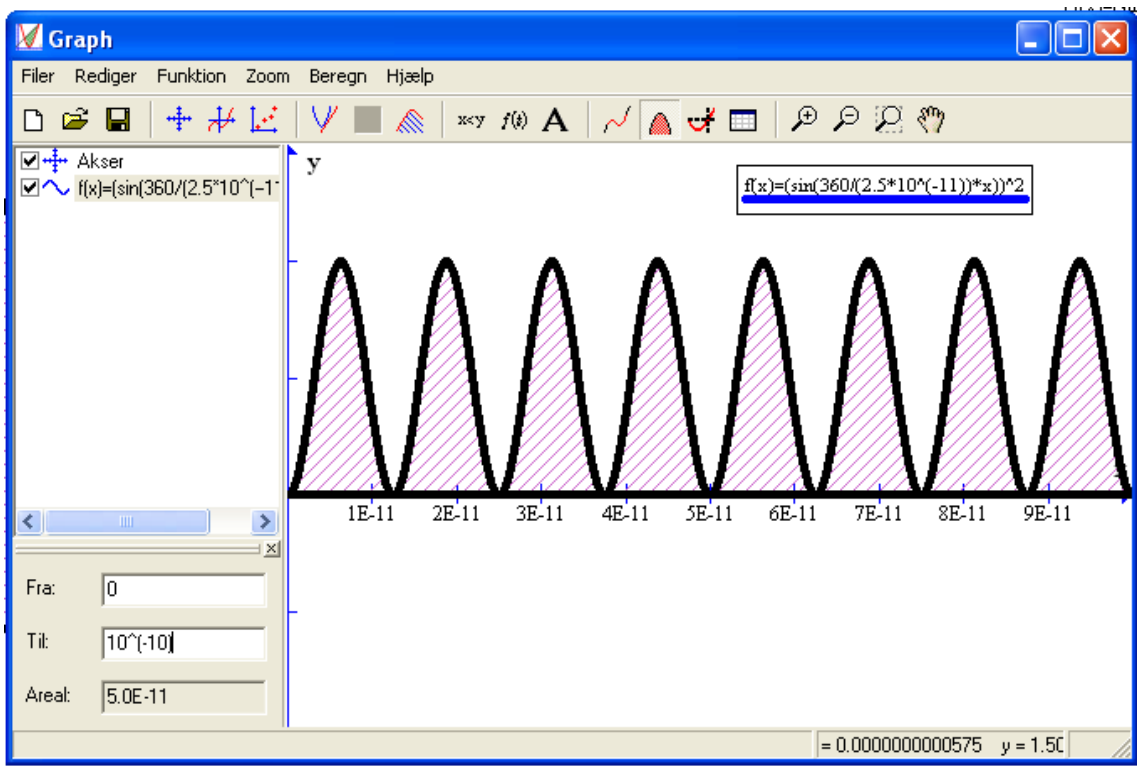
Eksempel

Vi ser på en partikel i en kasse med kantlængde 10^{-10}m . Partiklen har en bølgelængde på $2.5\cdot10^{-11}$m.

ψ(x) kan skrives

$$\Psi(x) = A\cdot\sin\left(\frac{360}{2.5\cdot10^{-11}}\cdot x\right)$$

Nu taster vi $sin^2\left(\frac{360}{2.5\cdot10^{-11}}\cdot x\right)$ ind i Graph og derefter udregner vi arealet mellem x-aksen og grafen i intervallet fra 0 til 10^{-10}



Vi ser at dette areal er $5.0\cdot10^{-11}$. Amplituden A_R findes nu ved at sige $A_R = \sqrt{\frac{1}{5.0\cdot10^{-11}}} = 141421.4$

Hele bølgefunktionen kan altså skrives

$$\psi = 141421.4\cdot\sin\left(\frac{360}{2.5\cdot10^{-11}}\cdot x\right)$$

Opgave 11

Se på eksemplet ovenfor og skriv en lille tekst der beskriver hvordan man finder amplituden for en bølgefunktion der beskriver en en-dimensional partikel i en kasse.

Opgave 12

Udregn energien for en partikel i en kasse med kantlængde $2 \cdot 10^{-10}$m .
Partiklen har en bølgelængde på $5 \cdot 10^{-11}$m og en masse på $9.1 \cdot 10^{-31}$ kg.

Opgave 13

Udregn bølgelængden for en partikel med masse $9.1 \cdot 10^{-31}$ kg og energi $2.17 \cdot 10^{-18}$J. Find bølgefunktionen for denne partikel, hvis den befinder sig i en kasse, der har en kantlængde på en 5 bølgelængde.

Schrödinger-ligningen

Vi har i det foregående noget løst argumenteret for, at en partikel i en kasse kan beskrives ved bølgefunktionen

$$\Psi(x) = A \cdot sin\left(\frac{360}{\lambda} \cdot x\right)$$

For at vise dette, må vi tage udgangspunkt i de ligninger der beskriver bølgefunktioner. Det drejer sig i første omgang om schrödinger ligningen. Denne ligning er en differentialligning (se f.eks. MAT A3 bogen fra systime). I det en-dimensionale tilfælde er ligningen givet ved

$$E \cdot \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \Psi(x)$$

Her er $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \cdot 10^{-34} js$, *m* er partiklens masse og *V(x)* er det potentiale som partiklen befinder sig i. Det første led på højre side ovenfor tolkes normalt som partiklens kinetiske energi, mens det sidste led tolkes som partiklens potentielle energi.

Vi skal nu løse den stationære Schrödinger - ligning for en partikel i en boks[1]. Det betyder, at vi har en partikel, som bevæger sig i en dimension. Potentialet er 0 i intervallet mellem 0 og a. I alle andre tilfælde er potentialet uendeligt, dvs.

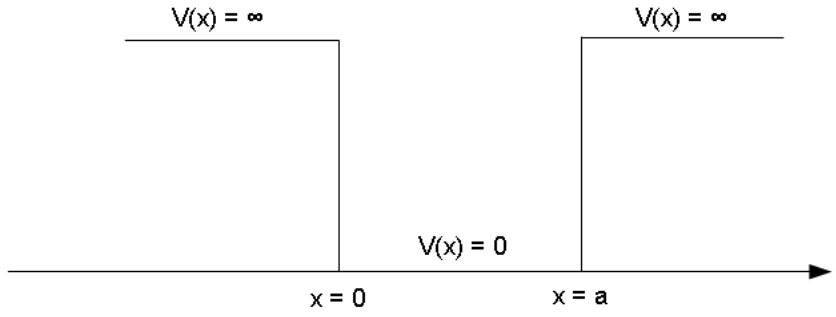
$$V(x) = \infty \quad for \ x < 0$$

$$V(x) = 0 \quad for \ 0 < x < a$$

$$V(x) = \infty \quad for \ x > a$$

Dette kan illustreres i følgende figur:

[1] Se f.eks. Stephen Gasiorowicz, Quantum Physics, Second Edition, John Wiley & Sons, side 58



Først ser vi på tilfældet $x < 0$: Men da $V(x) = \infty$ i dette tilfælde, må $\psi(x) = 0$

Det samme må være tilfældet for $> a$

Opgave 14

1) Nu skal vi så se på tilfældet $0 < x < a$
   Omskriv Schrödinger-ligningen, og vis at den derved kan skrives på formen:
   $$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \qquad \text{, hvor } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

2) Begrund, at den generelle løsning til ovenstående ligning kan skrives på formen:
   $$\psi(x) = A \cdot \cos(kx) + B \cdot \sin(kx)$$

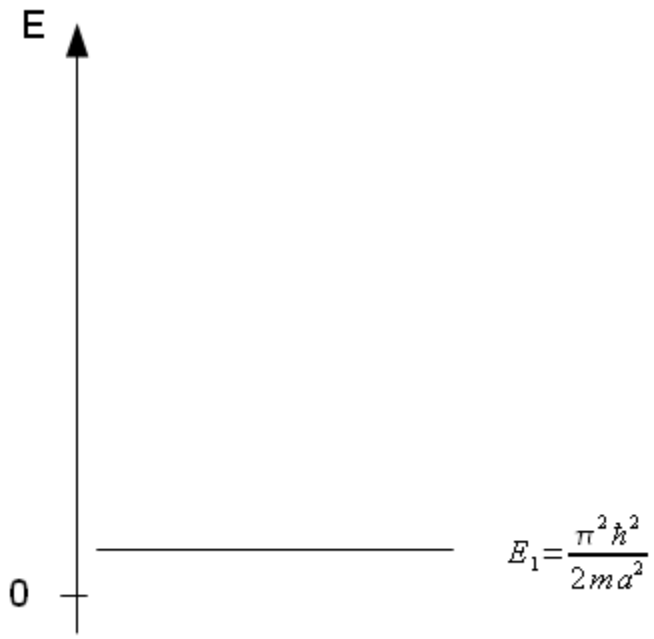
3) Bølgefunktionen skal være kontinuert. Specielt skal bølgefunktionen være kontinuert i $x = 0$ Benyt dette til at vise, at $B = 0$

4) Hvad bliver nu den generelle løsning i intervallet $0 < x < a$?
5) Bølgefunktionen skal være kontinuert. Specielt skal bølgefunktionen være kontinuert i $x = a$ Benyt dette til at vise, at $k\,a = n\,\pi$, n = 1, 2, 3, 4, ……
6) Benyt betingelsen fra ovenstående punkt til at vise følgende:
   $$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2\,m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2\,m\,a^2} \qquad \text{, n = 1, 2, 3, 4, ……}$$

Følgende skema er udfyldt for n = 1. Udfyld nu for n = 2, 3, 4, ……

n	E_n
1	$\frac{\hbar^2\pi^2 1^2}{2\,m\,a^2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\,m\,a^2}$
2	
3	
4	

7) Skitser energiniveaudiagrammet. Grundtilstanden er indtegnet:



Bemærk, at energiniveauerne ikke ligger med samme afstand.

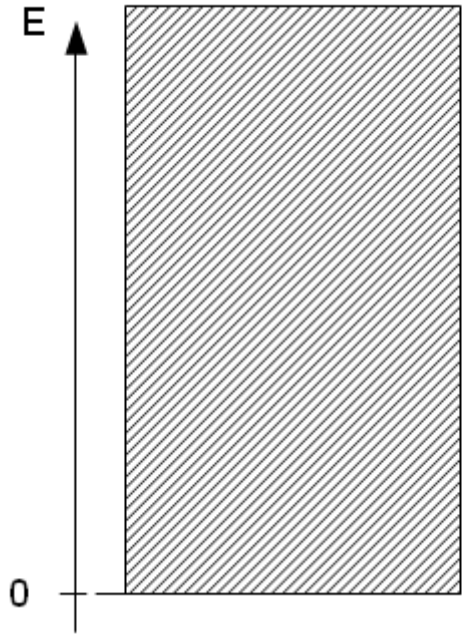
8) Skitser grafen for bølgefunktionen og for sandsynlighedsfunktionen. Skemaet er udfyldt for n = 1 og n = 2. Udfyld nu skemaet for n = 3, 4, …

n	$\psi_n(x)$	$\psi_n^2(x)$
1	x = 0 x = a	x = 0 x = a
2		
3		
4		

Et relevant forsøg hvor den ovenstående teori benyttes er forsøget med kvantedots

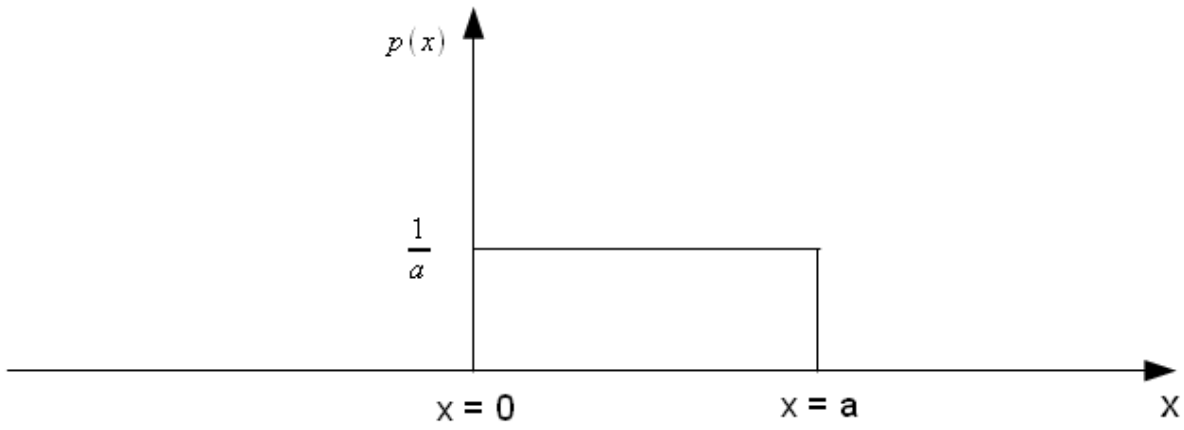
Den klassiske løsning

Vi skal nu se lidt nærmere på den tilsvarende klassiske løsning. I dette tilfælde vil partiklen selvfølgelig også være spærret inde i brønden af potentialet. Til gengæld er der ingen begrænsninger på energiniveauet. Partiklen kan have alle energier. Derfor bliver energispektret kontinuert.



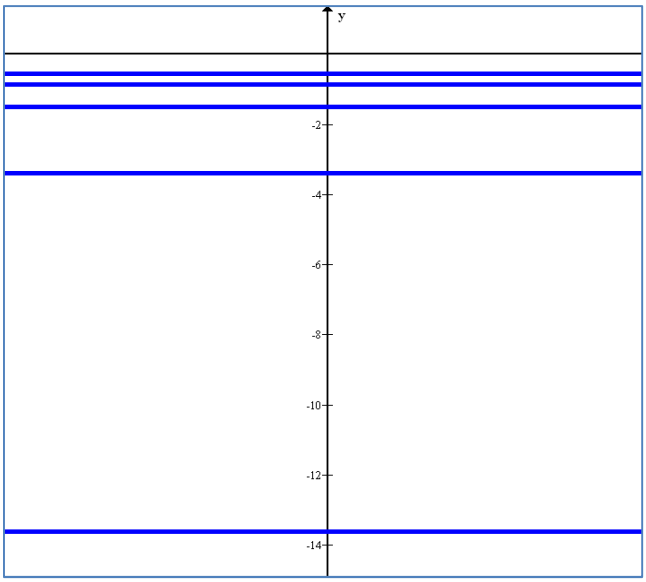
Der er lige stor sandsynlighed for at være alle steder for $0 < x <$ a. Desuden er $\int_0^a p(x)dx = 1$ hvor *p(x)* er sandsynlighedsfunktionen for partiklen.
Da $p(x)$ er konstant indses det let, at p(x) = 1/a

Dermed får vi følgende sandsynlighedsfordeling, hvor sandsynligheden er nul for at finde partiklen uden for brønden og fordelingen er $\frac{1}{a}$ for at finde partiklen i brønden.



Brintbølgefunktionerne og brint-energi-niveauer

Det er naturligvis ikke kun elektroner i kasser man kan beskrive med bølgefunktioner. I kvantemekanikken kan man udregne energi-niveauer og bølgefunktioner for mange forskellige kvantesystemer. En af de simpleste kvantesystemer beskriver elektronen i et brintatom. Elektronen holdes her ikke fast af nogle faste væge i en kasse, men derimod af den elektrostatisk tiltrækning som findes mellem protonen og elektronen. Nedenfor er vist en figur over de 5 laveste energi-niveauer i brint.



Brint-energi-niveauer. Enheden på energi-aksen er i eV (=$1.602 \cdot 10^{-19}$ J). Nulpunktet for energi-aksen er sat til den størst mulige energi elektronen i et brint-atom kan have (har den en større energi, kan den ikke hænge fast i atomet længere).

Bestemmelse af energi-niveauer

Energien i en foton (en lys-partikel) afhænger af lysets frekvens gennem formlen:

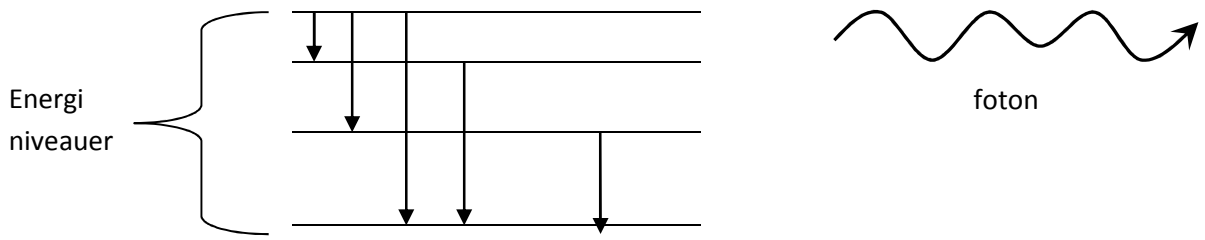
$$E = h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

Hvor h er Plancks konstant, c er lysets hastighed, λ er lysets bølgelængde og f er lysets frekvens.

Opgave 16

Forklar det sidste lig-med-tegn

Vi har tidligere studeret, at elektronen i et atom ikke kan have alle mulige forskellige energier, men kun de som svarer til atomets energiniveauer. Når en elektron springer fra et energi-niveau til et andet taber eller vinder den energi. Hvis den sidste stationære tilstand har mindre energi end den første, må atomet skilde sig af med den overskydende energi, og den udsender derfor lys. Det kan skematisk afbildes som på figuren nedenfor.

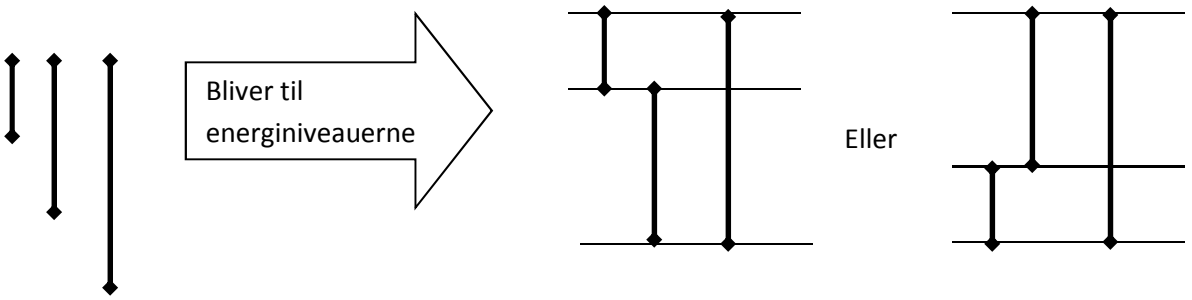


Elektronerne kan springe på de måder, som er beskrevet ved pilene på figuren. Den energi der udsendes svarer til forskellen mellem energi-niveauerne. Hvis man derfor måler fotonernes bølgelængder, kan man finde foton-energierne og dermed energi *forskellene* mellem energi-niveauerne. Det kan være lidt af et puslespil at finde energiniveauerne ud fra foton-energierne, men det er muligt.

Eksempel

Man måler følgende bølgelængder: $6\cdot10^{-7}$m, $3\cdot10^{-7}$m, $2\cdot10^{-7}$m af lys. Med formlen $c = f \cdot \lambda$ kan vi finde de tilsvarende bølgelængder til at være $5\cdot10^{14}$Hz, 10^{15}Hz og $1{,}5\cdot10^{15}$Hz (vis dette).

Nu kan man med $E = h \cdot f$ finde de tilsvarende energier til $3{,}3\cdot10^{-19}$J, $6.6\cdot10^{-19}$J og $9{,}9\cdot10^{-19}$J (vis det). Hvis svarer til $3{,}3\cdot10^{-19}$J, så kan de tre energier afbildes i stregform således



Disse kan stykkes sammen, så man får energiniveauerne, som er vist ovenfor. Læg mærke til, at der er to forskellige systemer af energiniveauer, der passe til de målte energier.

Opgave 17

Brintatomets laveste 4 energiniveauer er -13,6 eV, -3,4 eV, -1,5 eV og -0,85 eV (se f.eks. afsnittet *Brintbølgefunktionerne og brint-energi-nivauer* i noten). Enheden er elektron volt og 1 eV =$1.602\cdot10^{-19}$ J.

1. Omregn energierne til Joule.
2. Find alle de forskellige bølgelængder man vil se, når elektronerne springer rundt mellem disse energiniveauer.

Opgave 18

Man ser lys med følgende bølgelængder $2 \cdot 10^{-6}$m, 10^{-6}m, $5 \cdot 10^{-6}$m og $6{,}6 \cdot 10^{-6}$m. Hvordan kunne energi niveauerne se ud?

Eksperimentel øvelse

For at bestemme bølgelængderne af spektrallinierne i heliumspektret benyttes et spektrometer. Spektrometeret består af en kollimator, et gitter og en kikkert.

En He-spektrallampe anbringes bagved den smalle spalte i kollimatoren. På grund af linsen i den anden ende af kollimatoren samles lyset til et parallelt strålebundt. Dette strålebundt rammer gitteret og bliver afbøjet af gitteret.

Der benyttes en drejelig kikkert for at iagttage spektret. I kikkerten er anbragt et trådkors, og kikkerten drejes først mod højre således at den ønskede linje ligger igennem korset. Så drejes til den modsatte side indtil man finder den tilsvarende venstre linje. Ved at trække de to vinkler fra hinanden og dividere med to, finder man afbøjningsvinklen. Hvorfor det?

Du skal udmåle 1. ordens spektret til begge sider. Udmål så mange linjer som muligt.

Du skal tegne opstillingen af spektrometeret i rapporten, så det tydeligt fremgår, hvor spektrallampen står, hvor der er spalter og hvor der er linser. Lysets strålegang skal fremgå af tegningen.

Gitterkonstant d = 0.te ordens vinkel =

farve	lysstyrke	venstre vinkel	højre vinkel	θ	λ / nm (beregnet)	λ / nm (tabel)	afvigelse i %

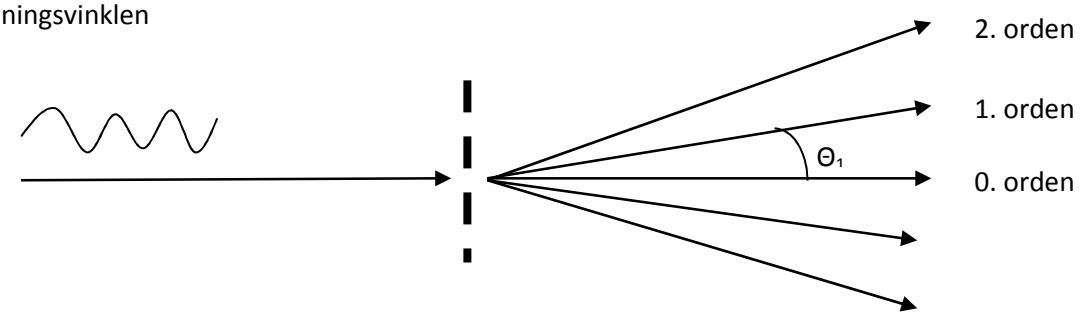
1. Find de tilsvarende foton-energier.
2. Giv et bud på energiniveauerne.

Elektroner mod et gitter

Fra bølgemekanikken kender vi gitterligningen. Den beskriver hvad der sker, når en bølge rammer et gitter og de dele af bølgen der kommer gennem hvert deres sprække interfererer på den anden side af gitteret. Ligningen ser således ud

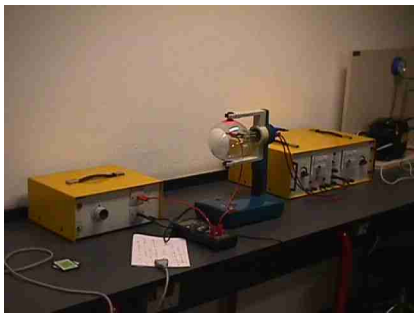
$$n \cdot \lambda = \mathrm{d} \cdot \sin(\theta)$$

Hvor n er ordenen, λ er bølgelængden, d er gitterkonstanten (afstanden mellem to sprækker) og θ er afbøjningsvinklen



Denne ligning gælder for alle bølger – men ikke for klassiske partikler. I kvantemekanikken beskrives partikler som bølger, og derfor kan vi også for elektroner benytte gitterligningen.

Opgave 19

Find første og anden ordens afbøjningsvinkel for en elektron (hvis masse er $9{,}1 \cdot 10^{-31}$ kg.) med energien $4 \cdot 10^{-16}$ j, når elektronen rammer et gitter med 10^6 riller pr. meter.

Nedenfor ses et billede af en eksperimentel opstilling, hvor man direkte kan se, at elektronerne afbøjes som bølger, når de rammer et gitter