

Moderne Fysik K 2017

- Ke2 Spørgetime

<http://users-phys.au.dk/jmd/ke2.pdf>

Fotoelektrisk effekt og Comtonspredning

S. 1281

Er tærskelfrekvensen lig workfunctionen ϕ ?

- Ikke helt. Den maksimalt mulige kinetiske energi af en e^- der løsriveres fra et materiale af en foton er

$$K_{\max} = E_{\text{foton}} - \phi, \quad E_{\text{foton}} = hf,$$

hvor f er frekvensen af fotonen. Den mindste frekvens der kun *lige* løsriver en elektron, altså den der giver $K_{\max} = 0$, er tærskelfrekvensen:

$$\begin{aligned} K_{\max} = 0 &\Rightarrow hf_{\text{tærskel}} = \phi \\ &\Rightarrow f_{\text{tærskel}} = \frac{\phi}{h}. \end{aligned}$$

Partikel i en boks, grænsebetingelse

S. 1356

Ved udledning af $\psi = C \sin(kx)$, helt til sidst, hvorfor forsvinder cosinus-leddet?

- Ligning (40.27) giver $\psi(x)$ for en partikel i en boks:

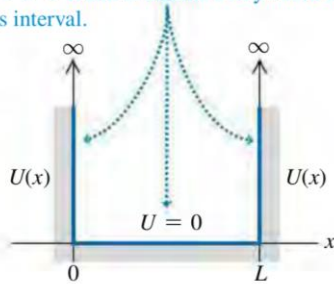
$$\psi(x) = (A_1 + A_2) \cos(kx) + i(A_1 - A_2) \sin(kx),$$

hvor A_1 og A_2 er ukendte konstanter.

- Der skal altid gælde at $\psi(x) = 0$ de steder hvor $U(x) = \infty$ (hvorfor?). Her er $U(x)$ for en boks:

40.9 The potential-energy function for a particle in a box.

The potential energy U is zero in the interval $0 < x < L$ and is infinite everywhere outside this interval.



- Altså skal vi have $\psi(0) = 0$ (samt $\psi(L) = 0$).
- Da vi har $\psi(0) = A_1 + A_2$ må $A_1 + A_2 = 0$, hvilket dræber cosinus-leddet.

Den harmoniske oscillator, fortegn ved grænsebetingelser

S. 1368

Hvorfor skal ψ og $\frac{d^2}{dx^2}\psi$ have samme fortegn?

Schrödinger for den harmoniske oscillator er (40.45)

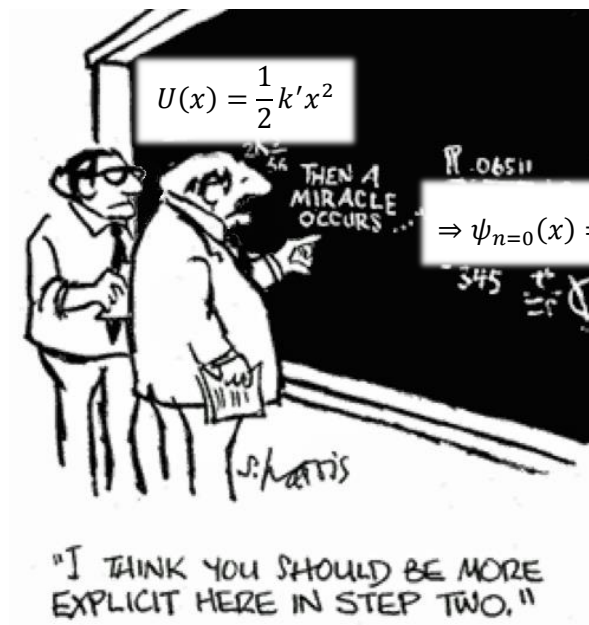
$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} k' x^2 - E \right) \psi.$$

Vi er interesseret i hvad der sker når $x \rightarrow \pm\infty$. Her er parentesen positiv (da $x^2 = +\infty$), og dermed har vi at $\frac{d^2}{dx^2}\psi$ er lig et positivt tal gange ψ . Ergo har $\frac{d^2}{dx^2}\psi$ og ψ samme fortegn.

Den harmoniske oscillator, ψ

S. 1370

Hvorfor er $\psi_{n=0}(x)$ en eksponentialfunktion, når $U(x)$ er et andengrads-polynomium?



- “Sådan er det bare”. Schrödinger-ligningen er tilstrækkelig grim til at man får uoplagte løsninger.
- Ved boksen fik vi sinus-bølger, selvom $U(x)$ her er flad.
- Den generelle løsning af den harmoniske oscillator (altså vilkårlig n) er ikke bare en eksponentialfunktion.

Den harmoniske oscillator, figur 40.24
S. 1368

Vi kigger på ψ i det klassisk forbudte område

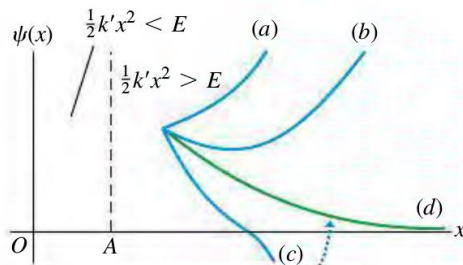
$$\frac{1}{2}k'x^2 = U > E.$$

Her ved vi fra tidligere at

$$\operatorname{sgn}\left(\frac{d^2}{dx^2}\psi\right) = \operatorname{sgn}(\psi),$$

men vi kender ikke fortegnet på $\frac{d}{dx}\psi$.

Kigger vi på det højre område får vi følgende problemstilling:



Only curve d , which approaches the x -axis asymptotically for large x , is an acceptable wave function for this system.

40.24 Possible behaviors of harmonic oscillator wave functions in the region $\frac{1}{2}k'x^2 > E$. In this region, $\psi(x)$ and $d^2\psi(x)/dx^2$ have the same sign. The curve is concave upward when $d^2\psi(x)/dx^2$ is positive and concave downward when $d^2\psi(x)/dx^2$ is negative.

- Da $\psi(x)$ er positive er $\frac{d^2}{dx^2}\psi$ det også. Dvs. $\psi(x)$ krummer opad ((a) og (b)), hvilket er ulovligt (hvorfor?).
- For at modarbejde den positive krumning er vi nødt til at have en negative hældning, $\frac{d}{dx}\psi < 0$, svarende til (c) og (d).
 - Ved (c) er $\frac{d}{dx}\psi$ valgt for negative, mens den i (d) er valgt lige tilpas, så $\psi(\infty) = 0$.

Hydrogenatomet, sfærisk ψ

S. 1392

Når $l = 0$ afhænger ψ kun af r som gør den sfærisk symmetrisk – hvorfor det?

Intuitivt:

- Hvis $l \neq 0$ har elektronen et impulsmoment $\vec{L}$ med størrelse $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$. Da $\vec{L}$ er en vektor må der være en bestemt retning som er speciel, hvilket bryder den sfæriske symmetri.
 - Kun $l = 0$ svarende til $\vec{L} = \vec{0}$ kan gøre alle retninger "lige gode" $\Rightarrow$ sfærisk symmetri.

Matematisk:

- Vi kan skrive $\psi(x, y, z) = \psi(r, \theta, \phi)$ op som et produkt af formen (lidt som i 41.19)

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_n(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi),$$

hvor jeg har påskrevet hvilket kvantetal der indgår i de tre funktioner. For $l = 0$ og dermed $m_l = 0$ får man

$$\Theta_{00}(\theta)\Phi_0(\phi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}},$$

hvilket ikke afhænger af vinklerne! Vi har da

$$\psi_{n00}(r, \theta, \phi) = \frac{R_n(r)}{2\sqrt{\pi}} = \psi_{n00}(r).$$

- Formlerne for $R_n(r)$, $\Theta(\theta)$ og $\Phi(\phi)$ sniger bogen sig udenom, hvilket er synd da det præcis er disse som giver de kendte orbital-former. Se evt.

https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_harmonics

Zeeman-effekten

Hvorfor antager vi at der kun er baneimpulsmoment L ?

Historien bliver indviklet hvis vi tager alle impulsmomenter med, såsom elektronens spin. Mere herom senere.

Zeeman, spin og spin-orbit-koblingen

- Interaktions-energien mellem et $\vec{B}$ -felt og en partikel med et magnetisk dipolmoment $\vec{\mu}$ er

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}.$$

- Hvis en elektron kan antage forskellige værdier for $\vec{\mu}$ kan man dermed opnå forskellige energier.
- Hvis der ikke er noget $\vec{B}$ -felt er $U = 0$ uanset hvad $\vec{\mu}$ er, og dermed får mange forskellige tilstande samme energi (udartet). Når man pålægger et $\vec{B}$ -felt ser man altså mange flere fine energiniveauer. Dette er Zeeman-effekten.
- Dipolmomentet $\vec{\mu}$ er proportional med elektronens impulsmoment. Antager vi at der kun findes baneimpulsmoment L fås (41.30).

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \vec{L}.$$

- Hvis vi medtager elektronens spin $\vec{s}$, som også er et impulsmoment, får vi noget ala.

$$\vec{\mu} \approx \frac{e}{2m} (\vec{L} + \vec{s}).$$

- Vi ser nu at der kan forekomme energi-opsplitning selv når $L = 0$, altså for en s-orbital. Dette kaldes den anormale Zeeman-effekt.
- Indtil videre har $\vec{B}$ været et $\vec{B}$ -felt som vi selv styrrede eksperimentelt. Fjerner man dette $\vec{B}$ -felt ser man *stadig* en lille opsplitning. Dette skyldes at atomkernen selv producerer et magnetfelt, set fra elektronens synspunkt. Dette $\vec{B}$ -felt afhænger af *elektronens* (underligt!) baneimpulsmoment, så man får

$$\begin{aligned} \vec{B} &\propto \vec{L} \\ \Rightarrow U &\propto -(\vec{L} + \vec{s}) \cdot \vec{L}. \end{aligned}$$

- "Spin-orbit-koblingen" er præcis leddet $\vec{s} \cdot \vec{L}$; en energi-opsplitning grundet en kobling mellem spinnets og baneimpulsmomentet.

Molekylspektre

S. 1437

Hvad er forskellen på molekylspektre og linjespektre?

- Molekylspektre er bare spektre fra molekyler, uanset hvordan de så måtte se ud.
- Linjespektre er spektre hvori der forekommer linjer 😊. Dette kan enten være emissionslinjer eller absorptionslinjer. Linjespektre findes for både atomer og molekyler (og større ting).

Emissionsspektrum (linjespektrum):



Absorptionsspektrum (linjespektrum):



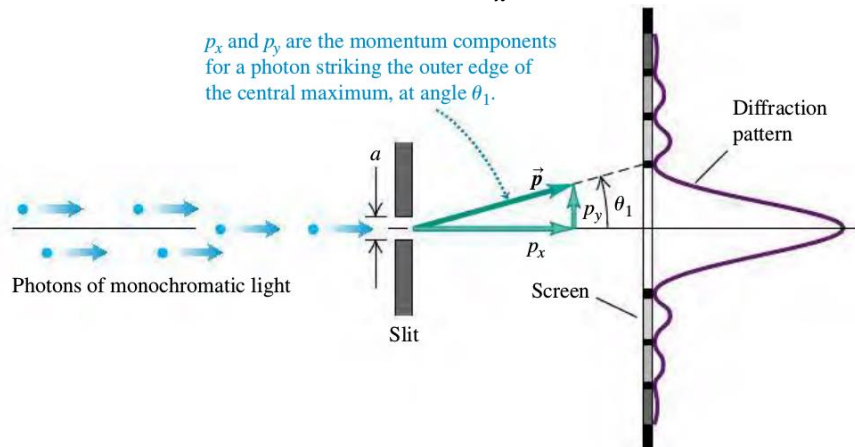
Kontinuert spektrum (ikke linjespektrum). Her ses ingen kvanteeffekter, så sådant et spektrum kan (nogle gange) forklares klassisk.



- Farverne er fuldstændig lige gyldige.

s. 1292

Er det rigtigt forstået, at "omdannelsen" af p_x til p_y skyldes usikkerheden i p_x kombineret med impulsbevarelse? Så når der er "for lidt" p_x kræver impulsbevarelsen mere p_y ?

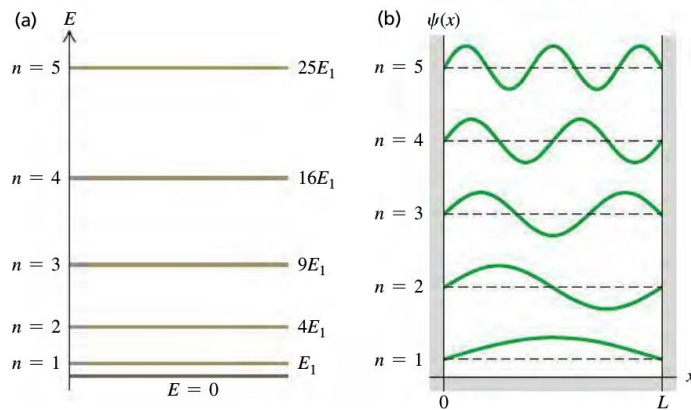


- Nej.
 - Der er ingen usikkerhed i p_x , er der?
 - Impulsbevarelse gælder komponent-vis; du må ikke bare lave p_x om til p_y .
- Det er væggene nær hullet der "sparker" til partiklen:

$$p_y \approx \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2\Delta y} = \frac{\hbar}{2a} \quad (\text{sammenlign med (38.16)}).$$

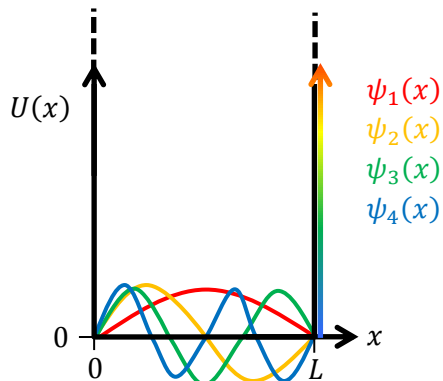
s. 1357

Ligger bølgefunktionerne på figur 40.11 (b) "på bunden"? Giver det overhovedet mening at splitte energiniveauerne rumligt op?



40.11 (a) Energy-level diagram for a particle in a box. Each energy is $n^2 E_1$, where E_1 is the ground-level energy. (b) Wave functions for a particle in a box, with $n = 1, 2, 3, 4$, and 5 . **CAUTION:** The five graphs have been displaced vertically for clarity, as in Fig. 40.10. Each of the horizontal dashed lines represents $\psi = 0$ for the respective wave function.

- Ja, alle ψ bør ligge på bunden, hvis man tegnede det rigtigt.
- At splitte E eller ψ om rumligt giver ikke mening nej. Husk dog på at y-aksen ikke er rumlig, men derimod viser $U(x)$ og $\psi(x)$. At y-aksen bruges til to ting er kilde til ekstra forvirring. Her er den "korrekte" tegning, hvor nulpunktet for ψ og U er valgt sammenfaldende:



Center of mass

s. 1435

Er udledningen her med CM og reduceret masse vigtig for at vise forståelse af fysik?

Hvilken udledning tænker du på? Hvis det bare er den der når frem til at inertimomentet for et diatomart molekyle er

$$I = m_r r_0^2, \quad m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2},$$

så nej. Det er ret oplagt at det må forholde sig sådan (enheder!), så lad være med at spille tid på at udlede det. Husk dog gerne resultatet.