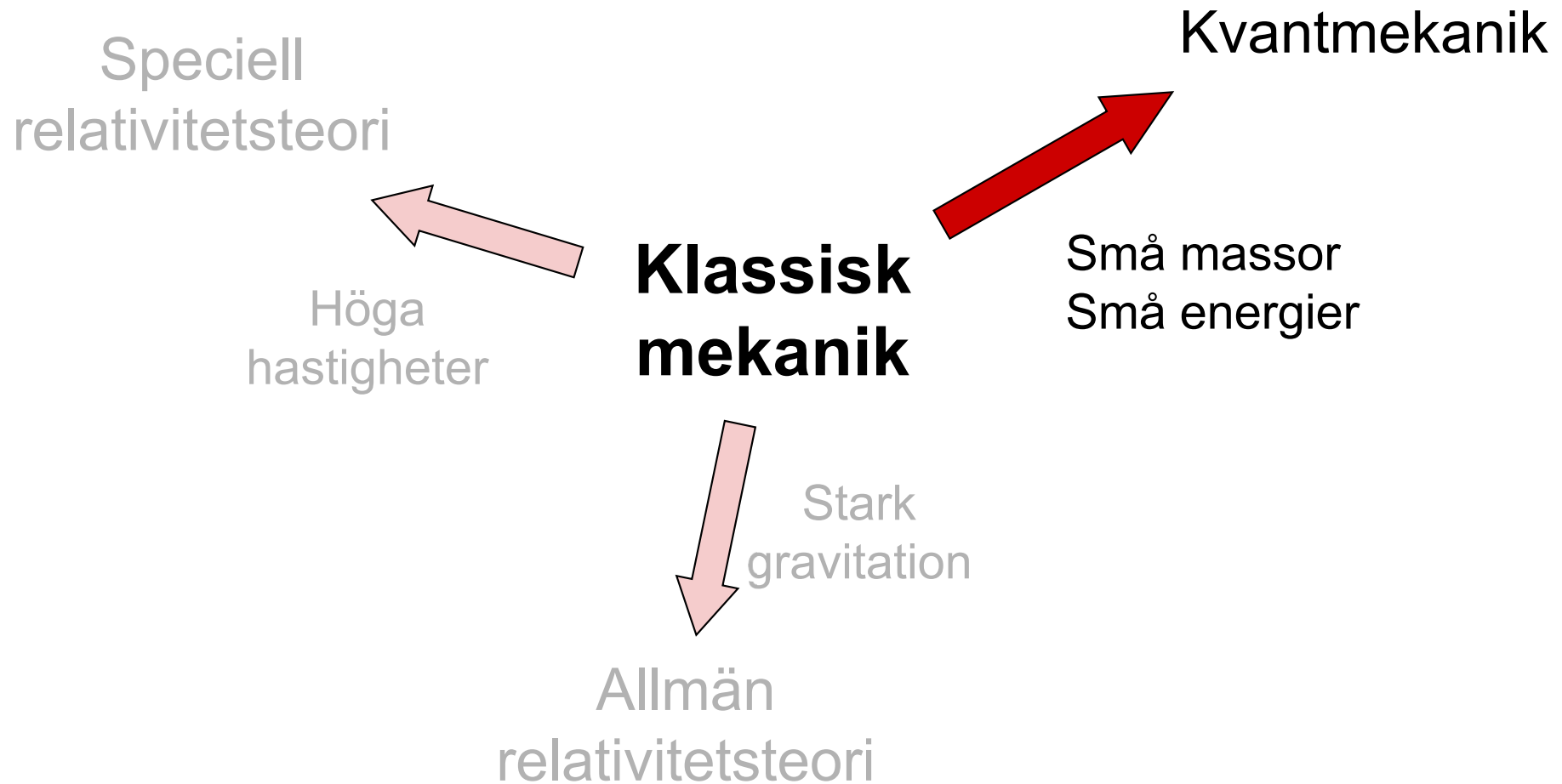


TFYA35 Molekylfysik  
Föreläsning 1

Thomas Ederth  
Linköpings universitet  
IFM

# Den klassiska mekanikens begränsningar



# Milstolpar i tidig kvantmekanik

- Descartes korpuskelteori – ljus som partiklar (1637)
  - Newton – utvecklad partikelteori för ljus (1672)
  - Huygens princip – ljus som vågrörelse (1678)
  - Max Planck, svartkroppsstrålning, kvanta (1901)
  - Albert Einstein, fotoelektrisk effekt (1905)
  - Niels Bohr, atomspektra (1913)
  - Louis de Broglie, vågegenskaper hos partiklar (1924)
  - Werner Heisenberg, kvantmekanik (1924)
  - Erwin Schrödinger, vågmekanik (1925)
  - Max Born, tolkning av vågfunktionen (1926)
  - Werner Heisenberg, osäkerhetsrelationen (1927)
  - Niels Bohr, komplementaritetsprincipen (1927)
- Resultat som gav anledning att ifrågasätta klassisk mekanik
- Nya begrepp och metoder, utveckling av kvantmekanik

# Läget vid 1900-talets början

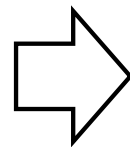
Den klassiska världsbilden lämnade många frågor inom fysik och kemi obesvarade:

- Atommodeller med elektroner som kretsar kring en positiv kärna, *men varför faller inte elektronen in i kärnan?*
- Varför är grafit ledande, men inte diamant?
- Varför emitterar urladdningslampor bara vid vissa våglängder?

- Svartkroppsstrålning

- Fotoelektriska effekten

- Diffraction av elektroner

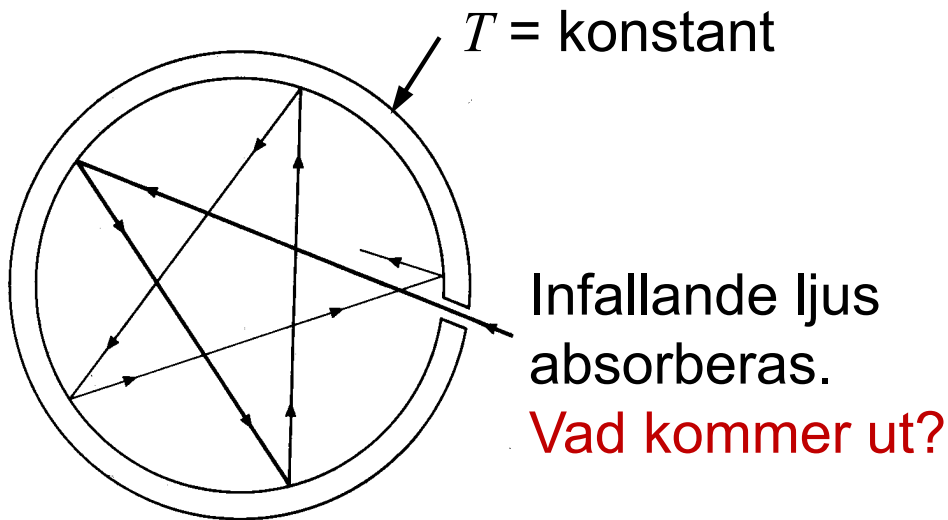


*Kvantisering av energi*

*Ljus har partikelegenskaper*

*Partiklar har vågegenskaper*

# Svartkropsstrålning

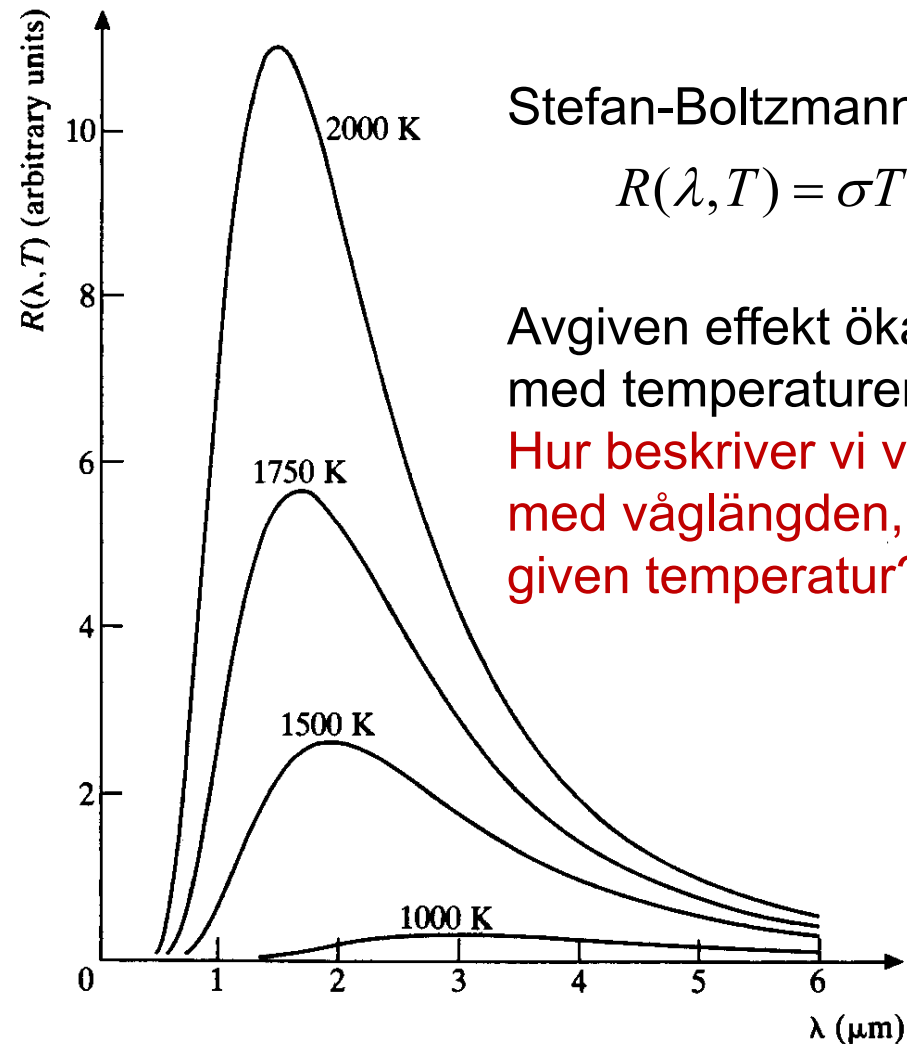


## 'Svartkropp'

Om väggarna är i termisk jämvikt, är strålningen som kommer ut fördelad enligt Stefan-Boltzmanns lag, s.k. *svartkropsstrålning*.

Strålningen avges från termiskt exciterade oscillatorer (svängande laddningar).

Observerad emittans,  
 $R(\lambda, T) = \text{avgiven effekt per areaenhet}$



Stefan-Boltzmanns lag:

$$R(\lambda, T) = \sigma T^4$$

Avgiven effekt ökar snabbt med temperaturen!

Hur beskriver vi variationen med våglängden,  $R(\lambda)$ , för en given temperatur?

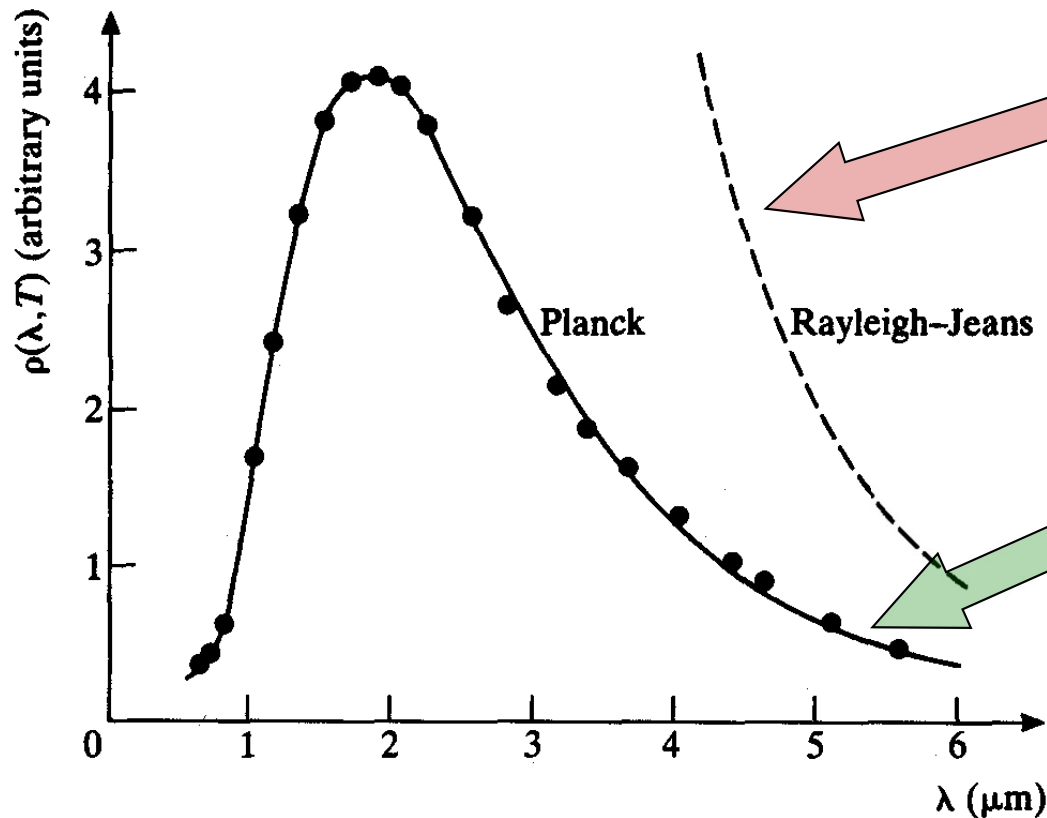
# Svartkroppsstrålning

## Rayleigh-Jeans vs. Planck

Energitätheten  $\rho$  (energi per volymsenhet och våglängd) är

$$\rho(\lambda, T) = \frac{8\pi}{\lambda^4} \bar{\varepsilon}$$

### Energifördelning



Medelenergin per oscillator är enligt klassisk statistisk mekanik:

$$\bar{\varepsilon} = kT$$

Alla oscillatorer (vid alla frekvenser) är exciterade vid varje temperatur.

Planck föreslog att en given oscillator endast kan anta diskreta värden:  $n\varepsilon_0$   
Medelenergin per oscillator blir då:

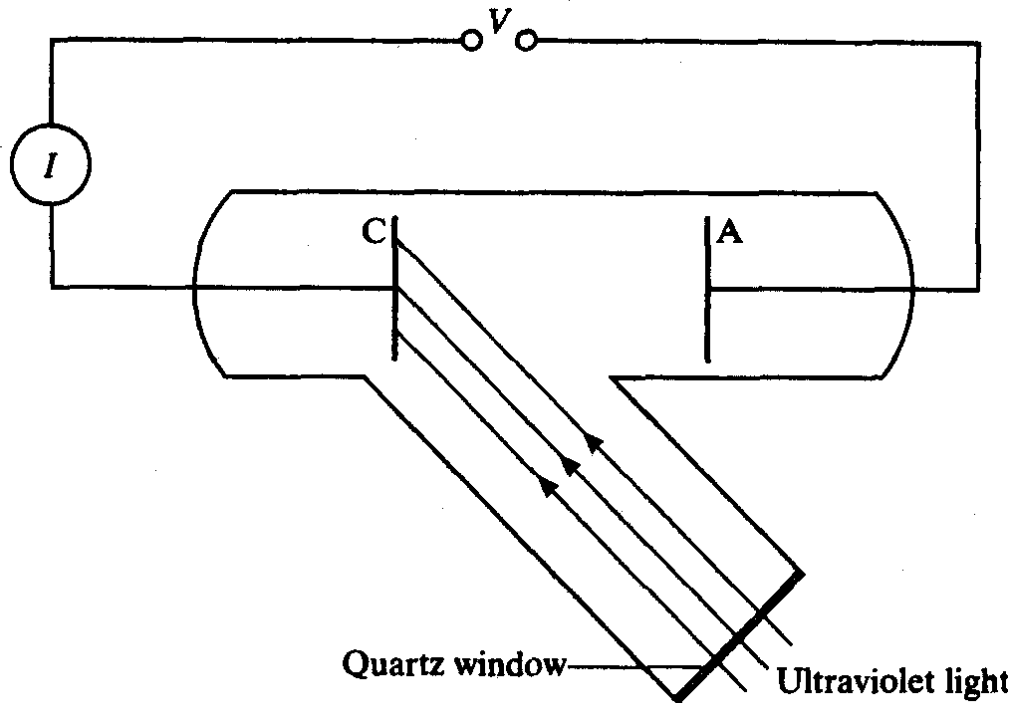
$$\bar{\varepsilon}(\lambda) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad \left( \nu = \frac{c}{\lambda} \right)$$

och en given oscillators bidrag beror på temperaturen. Stämmer med data!

**⇒ Fotonenergi är i så fall kvantiserade:  $E = n \cdot h\nu$ ,  $n$  heltal**

$$\left( \rho(\lambda, T) = \frac{4}{c} R(\lambda, T) \right)$$

# Fotoelektrisk effekt



Klassisk fysik förutsäger:

(1) Infallande ljus absorberas av ett stort antal elektroner, och en enskild elektron kan bara absorbera en liten del av det infallande ljusets energi.

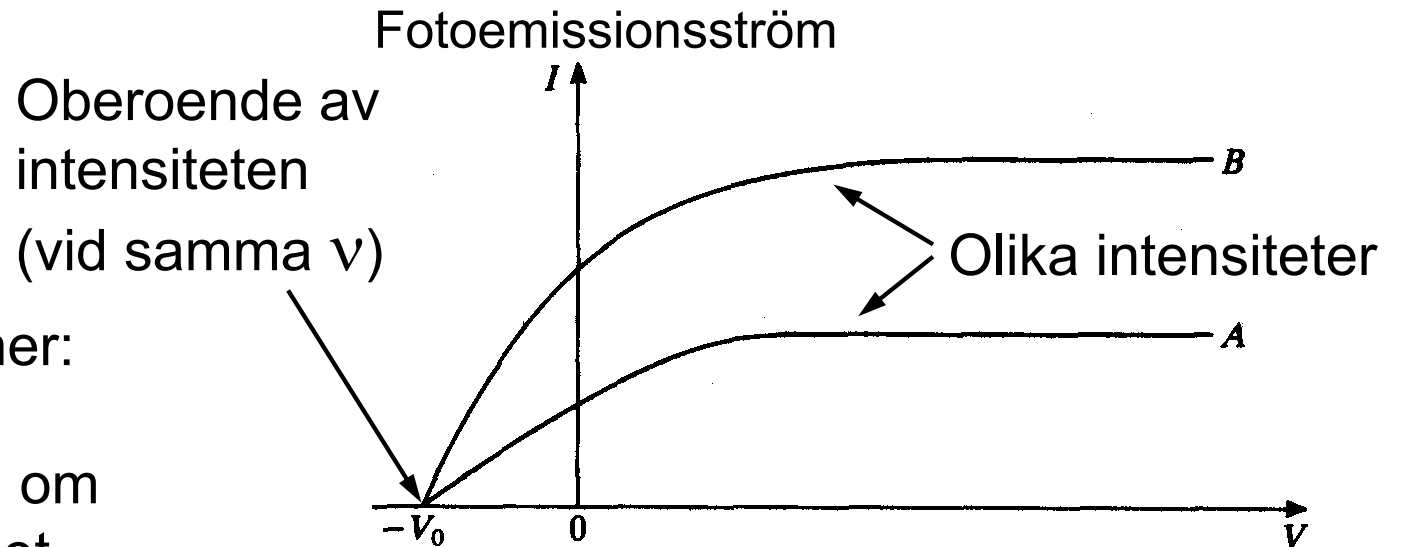
(2) Elektroner emitteras vid alla infallande frekvenser hos UV-ljuset, om bara intensiteten är tillräcklig.

(3) Kinetiska energin per elektron ökar med intensiteten.

$$E_{in} = E_{kin} + \Phi$$

$\Phi$  = Utträdesarbete, elektronens bindningsenergi i metallen

# Fotoelektrisk effekt



Experimentella observationer:

- Elektroner emitteras även om intensiteten är så låg att det absorberade ljuset nätt och jämt räcker för att emittera en elektron (jfr (1)).
- Inga elektroner emitteras för frekvenser under någon tröskel  $\nu_0$ , oavsett intensitet (jfr (2)).
- Antalet elektroner ökar med intensiteten, men den kinetiska energin beror på frekvensen (jfr (3)).

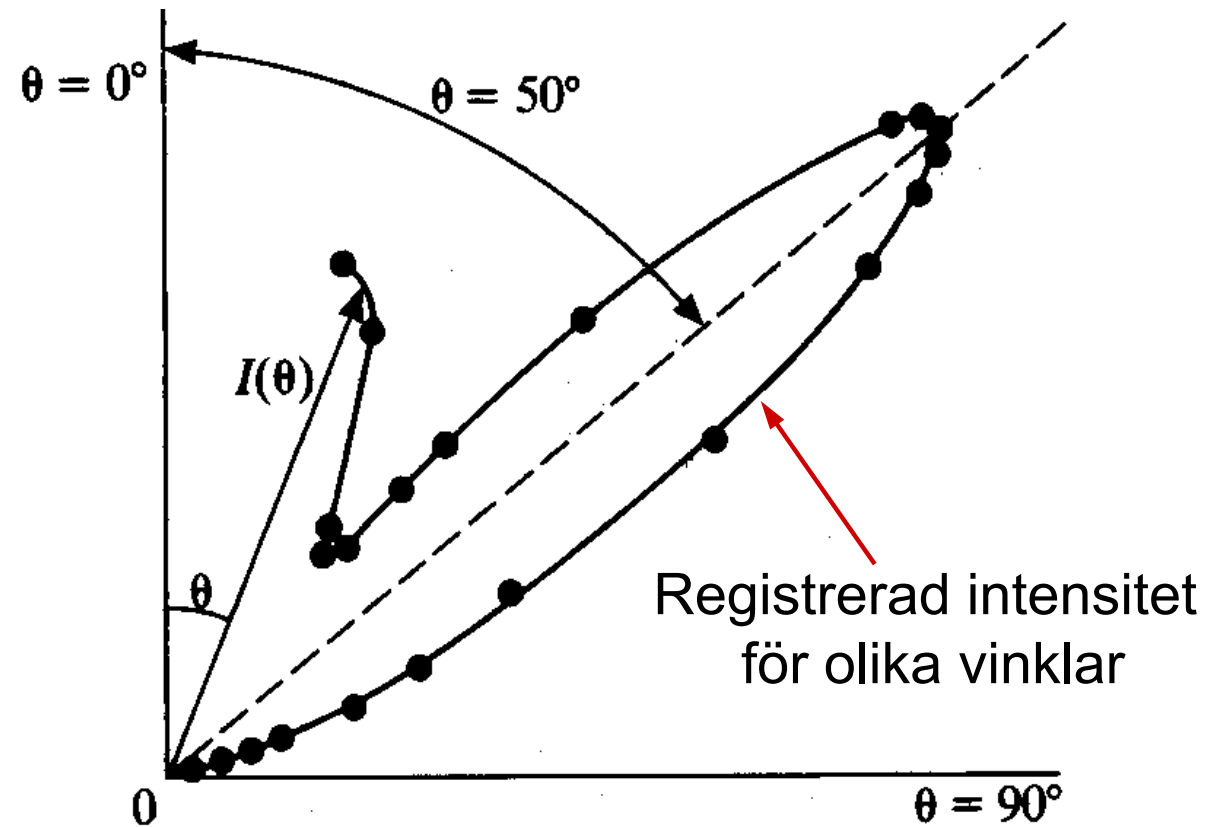
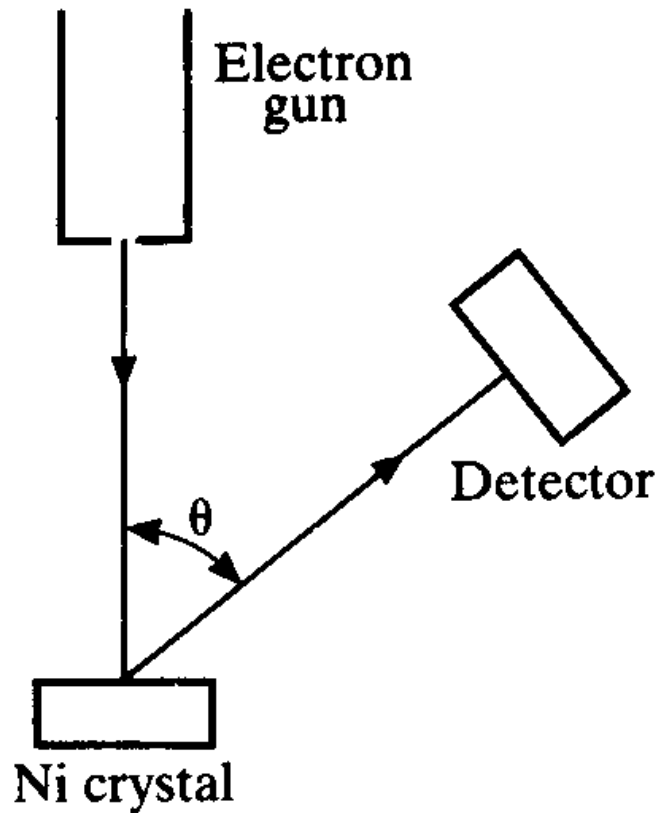
Einstein såg att observationerna kan förklaras om ljuset består av kvanta (fotoner, 'partiklar'), med energi

$$E = h\nu$$



# Diffraktion av elektroner

Davisson–Germers försök: elektroner med bestämd energi (54 eV) infaller mot en Ni-kristall, reflekterad intensitet mäts.



Intensitet med maxima vid givna vinklar?  
Karakteristiskt för interferens – ett vågfenomen!

# Diffraction av elektroner

$d$  = avstånd mellan Bragg-planen

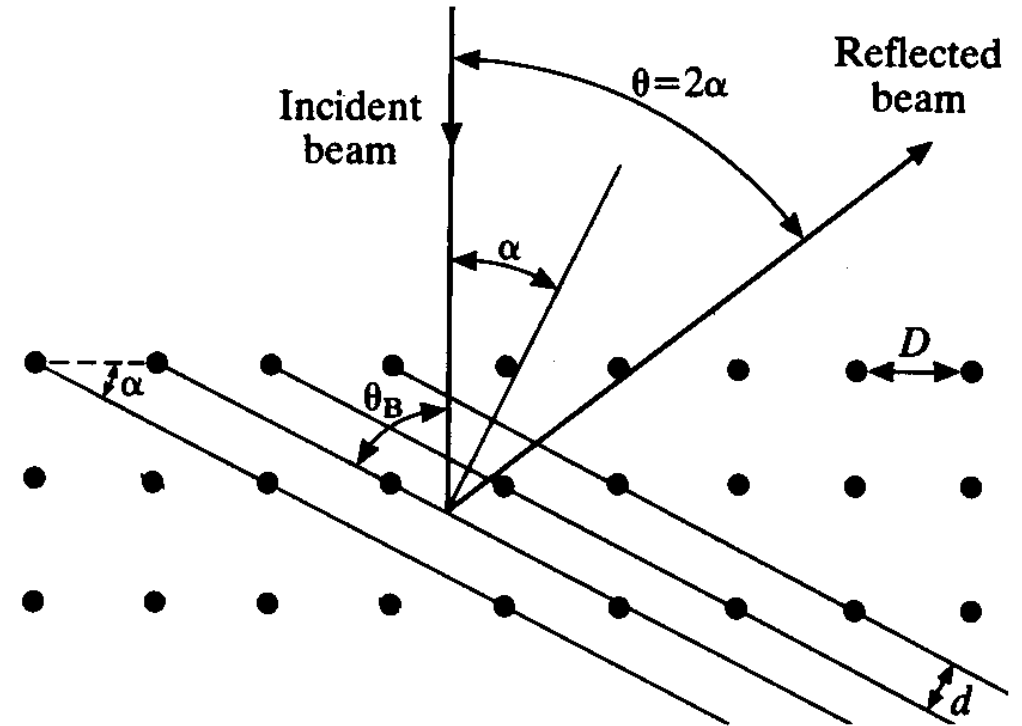
$D$  = avstånd mellan atomerna

$\theta_B$  = diffraktionsvinkeln

Om vi utgår från Braggs lag, vilken våglängd ger det oss för den infallande strålningen?

$$\left. \begin{array}{l} n\lambda = 2d \sin \theta \\ \theta_B = \frac{\pi}{2} - \alpha \\ d = D \sin \alpha \end{array} \right\} \sin \theta_B = \cos \alpha \Rightarrow$$

$$\Rightarrow n\lambda = 2D \sin \alpha \cos \alpha = D \sin 2\alpha = D \sin \theta$$



$$D = 2,15 \text{ \AA}; \text{ om } n = 1 \text{ \r{a}} \lambda = 2,15 \sin 50^\circ = \mathbf{1,65 \text{ \AA}}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \text{ f\"or } 54 \text{ eV elektroner \r{a}} \mathbf{1,67 \text{ \AA}}$$

## **Klassisk världsbild**

### *Trajektorier (partikelbana)*

En partikels läge är helt bestämt av dess läge, hastighet och de verkande krafterna.

### *Energikontinuum*

Varje frihetsgrad (ungefär 'rörelsesätt') kan ha godtycklig energi.

## **Kvantmekanisk världsbild**

### *Våg-partikeldualitet*

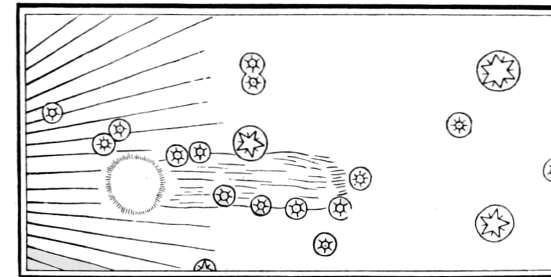
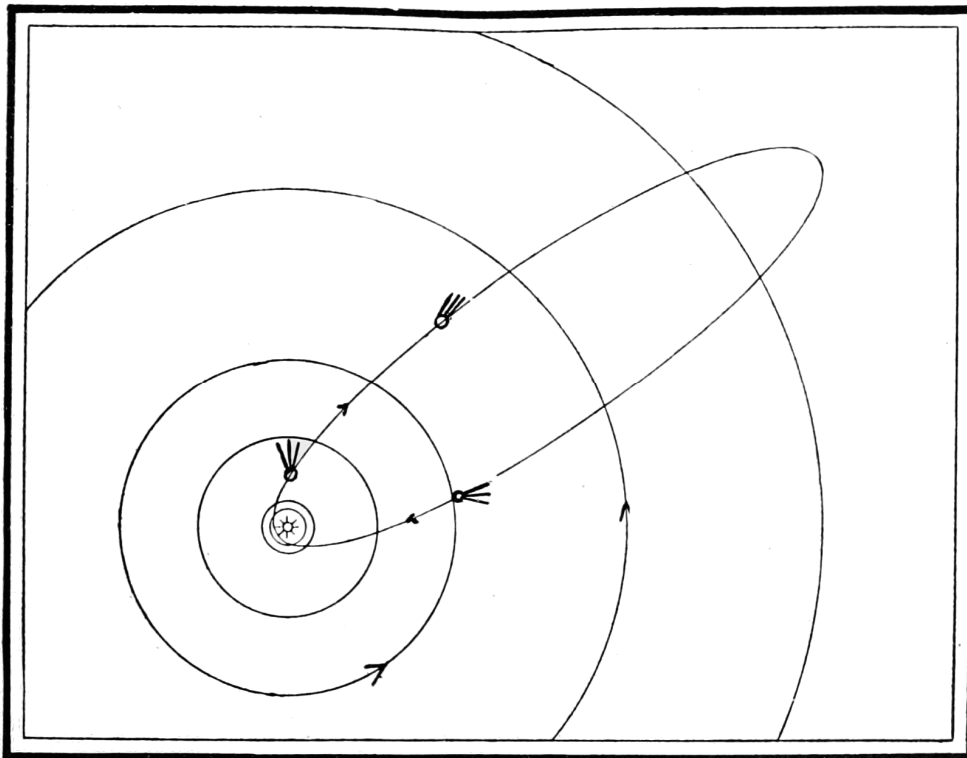
Vågor kan ha partikelegenskaper, och partiklar kan ha vågegenskaper.

### *Kvantisering*

På atomär nivå är energi inte en kontinuerlig variabel.

# Nya idéer?

- Ljus som partiklar respektive vågor, teorier av Descartes, Newton och Huygens under 1600-talet.
- Johannes Kepler (1571-1630) föreslog att kometsvansar alltid pekar bort från solen för att ljuset från solen har rörelsemängd.

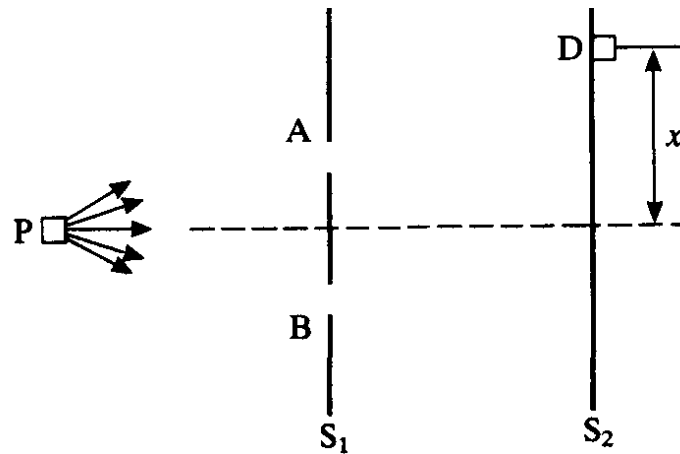


- 1905 utvecklade Poynting teorier för elektromagnetiskt strålningstryck (förutsätter rörelsemängd).

# Diffraction i dubbelspalt

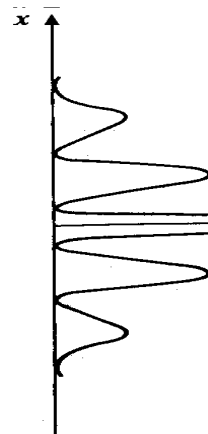
(T.ex. okorrelerade elektroner, dvs interferens mellan två elektroner kan inte förekomma.)

Partikelkälla



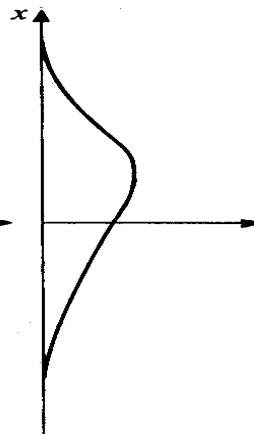
Partikeldetektor

Superposition av tillstånden A och B!



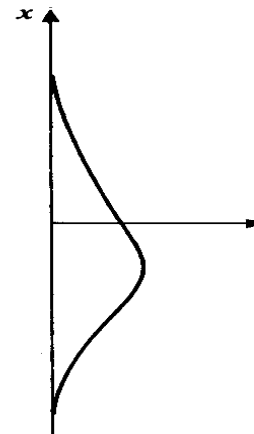
**A & B öppna**

$$P = |\psi_A + \psi_B|^2$$



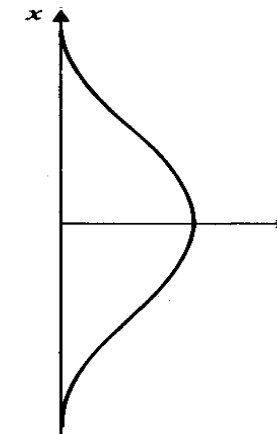
**A öppen**

$$P = |\psi_A|^2$$



**B öppen**

$$P = |\psi_B|^2$$



**A + B**

$$P = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2$$

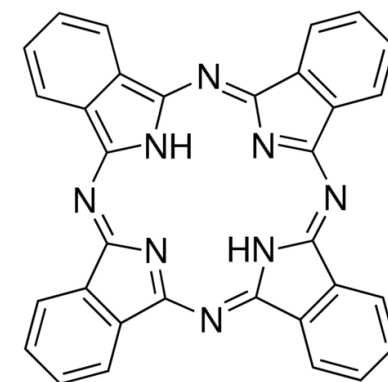
Våg- och partikelegenskaper i samma försök!

# In search of multipath interference using large molecules

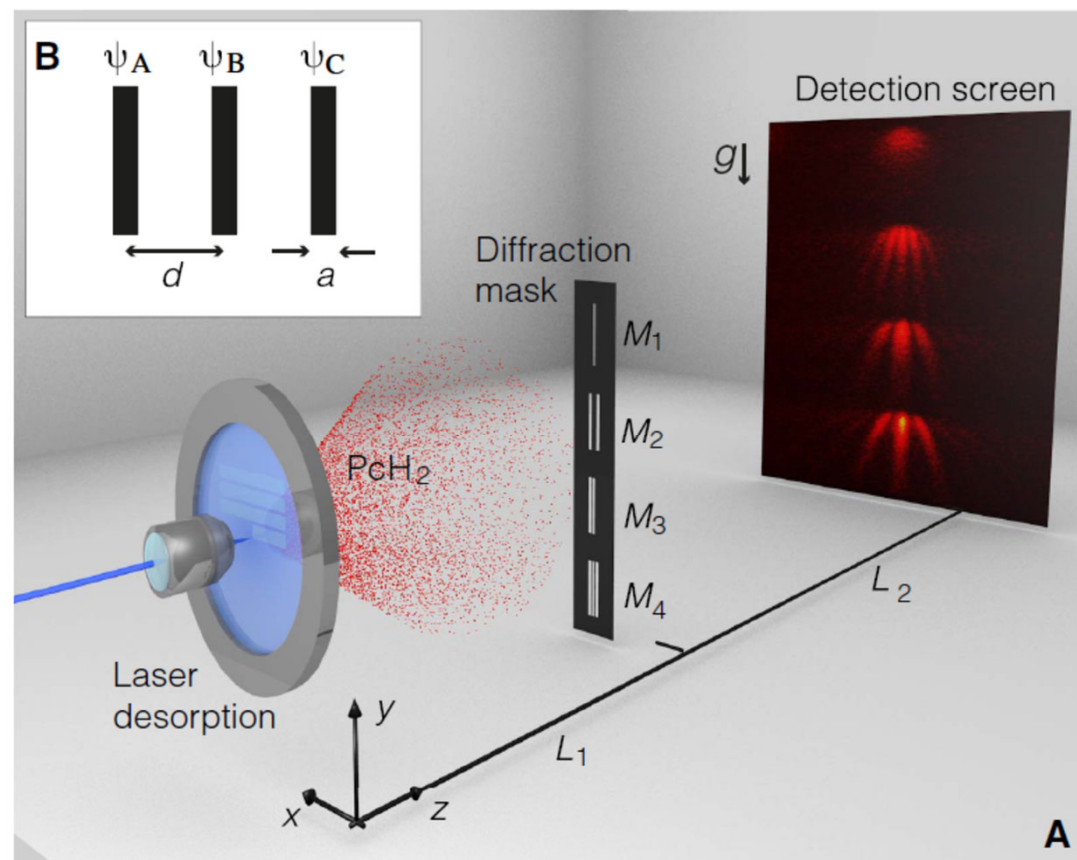
Joseph P. Cotter,<sup>1\*</sup>† Christian Brand,<sup>1</sup> Christian Knobloch,<sup>1</sup> Yigal Lilach,<sup>2</sup> Ori Cheshnovsky,<sup>2,3</sup> Markus Arndt<sup>1</sup>

Cotter *et al.*,  
*Science Advances*  
3:e1602478 (2017)  
11 August 2017

The superposition principle is fundamental to the quantum description of both light and matter. Recently, a number of experiments have sought to directly test this principle using coherent light, single photons, and nuclear spin states. We extend these experiments to massive particles for the first time. We compare the interference patterns arising from a beam of large dye molecules diffracting at single, double, and triple slit material masks to place limits on any high-order, or multipath, contributions. We observe an upper bound of less than one particle in a hundred deviating from the expectations of quantum mechanics over a broad range of transverse momenta and de Broglie wavelength.

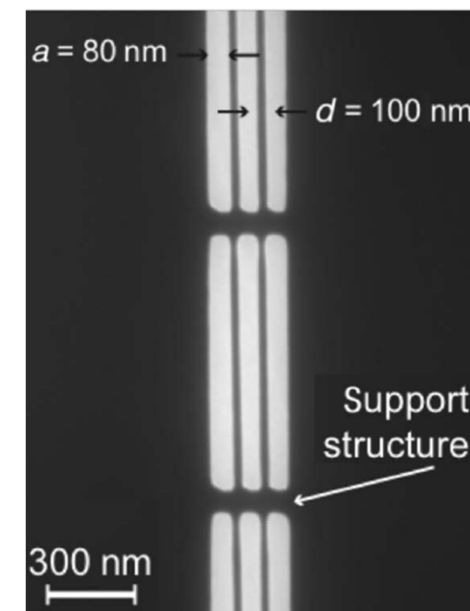


Phthalocyanine



(A) A laser produces a thermal beam of P<sub>41</sub>H<sub>2</sub> molecules, which diffracts at a vertical array of single, double, and triple slits, and deflect in the gravitation field, before landing on a detection screen. (B) Schematic of the triple slit.

Region M<sub>4</sub>  
of the  
diffraction  
mask.



# Superposition

Enligt superpositionsprincipen kan vilka två kvanttillstånd som helst summeras för att skapa ett tredje, nytt tillstånd.

Omvänt, så är det alltid möjligt att dela ett kvanttillstånd i deltillstånd; detta utnyttjas i t.ex. kvantdatorer (superposition av 0 och 1 i en 'qubit') eller då en laserstråle delas och interferens hos delstrålarna används för att bestämma små variationer i avstånd.

(Detta är helt okontroversiellt när det gäller vågor, t.ex.:  
Enligt superpositionsprincipen kan vilka två vågor som helst summeras för att skapa en tredje, ny våg. )

## 1-1 Vågfunktionen $\psi$ (psi)

**Slutsats från observationer:** Materien kan anta våg- eller partikelegenskaper, dessa är komplementära!

Från klassisk teori (vågrörelselära) lånar vi idén att beskriva partiklar som vågor, så att kvadraten av vågens amplitud motsvarar partikelns ”intensitet”, i detta fall en sannolikhetsfördelning av dess läge.

**Postulat:** En partikel är distribuerad i rummet som en våg och beskrivs med en *vågfunktion*,  $\psi$ .



## 1-1 Vågfunktionen $\psi$ (psi)

- Vågfunktionen innehåller all dynamisk information om det system den beskriver
- $\psi$  är i allmänhet en komplex funktion, men  $|\psi|^2 = \psi^* \psi$  är *alltid* reell  
( $\psi^*$  är komplexkonjugatet av  $\psi$ )

### Borns tolkning av $\psi$

$|\psi|^2$  är proportionell mot sannolikheten att hitta partikeln i ett område kring  $x$ .

(Sannolikheten att hitta partikeln i intervallet  $[x, x + dx] \propto |\psi|^2 dx$ )

$|\psi|^2$  är en *sannolikhetsstäthet*

$\psi$  är en *sannolikhetsamplitud* som saknar direkt fysikalisk tolkning