

IV. Materievågor

Plancks teori för svartkroppsstrålning och Einstens teori för den fotoelektriska effekten i början av 1900-talet bidrog med de första ledtrådarna till en kommande teori för kvanta.

Fram till 1926 utvecklades kvantteorin mera systematiskt, men det dröjde till 1926 innan man hade en mera fullständig teori, **kvantmekaniken**.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◇ ▶▶▶▶ X 1

IV.1. de Broglies postulat

Ett bidrag till den under utveckling varande kvantteorin gjordes av de Broglie 1924 då han lade fram ett postulat att massiva partiklar¹ också i allmänhet borde kunna beskrivas med formalism som vanligtvis förknippas med vågor.

Motiveringen för denna syn är det faktum att fenomen som involverar t.ex. ljus kan beskrivas med hjälp av vågor (t.ex. diffraktion) men också med hjälp av partiklar, fotoner (t.ex. fotoelektriska effekten).

För en foton gäller

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{IV.1})$$

¹"Massiv partikel" avser allmänt en partikel med massa. Svenskan har inte ett bekvämt ord för detta, så vi använder adjektivet ovan som har en annan egentlig innebörd.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◇ ▶▶▶▶ X 2

de Broglie postulerade nu att en (masslös eller massiv) partikel med rörelsemängden p har en associerad våglängd

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (IV.2)$$

Denna ekvation kallas **de Broglies relation**, och gäller som sagt alltid för ljus, men de Broglie föreslog alltså att den skulle generaliseras till att också gälla för materia.

En annan form av de Broglies relation är:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} \equiv \hbar k \quad (IV.3)$$

För icke-relativistiska hastigheter gäller

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶ X 3

$$p = mv \quad (IV.4)$$

så att

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (IV.5)$$

Exempel 1: Våglängden för en elektron med den kinetiska energin $K = 100$ eV

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} \approx 1,2 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1,23 \text{ \AA}$$

Röntgenstrålning har liknande våglängd, så om elektronen också kan beskrivas som en våg borde dessa elektroner ge t.ex. liknande diffraktionsmönster som röntgenstrålning i ett givet experiment.

Elektronens storlek är mindre än atomens storlek, som är av storleksordningen 10^{-10} m. I detta fall är partikelns och våglängdens storlek s.g.s. samma.

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶ X 4

Exempel 2: En sfärisk metallbit med massan 1 g och hastigheten 100 m/s har en våglängd $\lambda = 6,63 \times 10^{-33}$ m. Partikelns och våglängdens storlek skiljer sig mycket. Storleken som hänger ihop med vågnaturen är försvinnande liten jämfört med den massiva partikelns storlek.

Vi granskar Bohrs postulat om att rörelsemängdsmomentet för en elektron i en atom är kvantiserat enligt $L = n\hbar$, $n \in \mathbb{N}$. Då elektronen rör sig i en cirkulär bana kan vi skriva

$$L = rp = \frac{r\hbar}{\lambda} = n\hbar = \frac{n\hbar}{2\pi} \quad (\text{IV.6})$$

vilket ger

$$n\lambda = 2\pi r, \quad n \in \mathbb{N} \quad (\text{IV.7})$$

eller att elektronens banlängd måste vara en heltalsmultipel av elektronens (de Broglie-)våglängd — inga andra elektronbanor är tillåtna. Detta innebär att i Bohrs atommodell betar sig elektronerna som stående vågor.

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 5

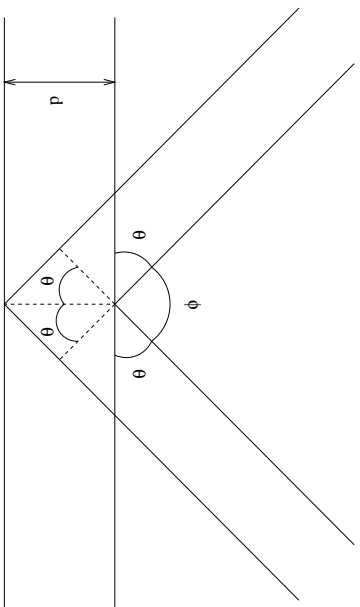
IV.2. Elektrodiffraktion

Bevis för "materievågor" — d.v.s. massiva partiklars vågnatur — hittades 1927 i diffraktionsexperiment med elektroner. Två oberoende experiment utfördes, det ena av C.J.Davison och L.H.Germer och det andra av J.J.Thomsons son G.P.Thomson (30 år efter pappan hittade elektronen).

Diffraktionen kan förstås med hjälp av Braggreflexion. Vi går här i genom en förenklad modell och antar att elektronerna/elektronvågorna reflekteras från endast en grupp av parallella plan.

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 6



Figur 1: Braggreflexion.

Från Figur 1 fås vägskilnhaden mellan de två strålarna som $2d \sin \theta$. Konstruktiv interferens erhålls om denna vägskilnhad är ett helt antal våglängder, enligt

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\} \quad (\text{IV.8})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ X 7

Detta kallas **Braggs formel**. n anger de olika ordningarnas maximer: ett maximum av första ordningen har $n = 1$.

Notera att Braggs formel också anger om en viss våglängd λ alls kan ge diffraktion, i.o.m. kravet att $-1 \leq \sin \theta \leq 1$. Skriv om i formen

$$\frac{\lambda}{2d} = \sin \theta, \quad n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\} \quad (\text{IV.9})$$

så blir kravet

$$\lambda \leq \frac{2d}{n}, \quad n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\} \quad (\text{IV.10})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ X 8

IV.3. Våg-partikel-dualiteten

Man visste på 1920-talet att ljus har en **dual** natur: Ljuset kan beskrivas med hjälp av vågor som i fenomen som interferens. Ljuset kan också beskrivas som en ström av partiklar i.o.m. experimenten som förklarades bäst med hjälp av kvanta. Dessa två olika förklaringar eller bilder av skeenden kallas **vågbilden** och **partikelbilden**.

Man visste också att elektronen — som man uppfattat som en partikel — kan uppträda som en våg i t.ex. diffraktionsexperiment. Med andra ord kunde också massiva partiklar ha en dual natur.

Denna duala natur hos ljus och massiva partiklar slogs fast i **komplementaritetsprincipen**, som kom att bli en av de viktigaste hörnstenarna i den kommande kvantfysiken. Enligt denna princip kan materia och strålning fullständigt förklaras med hjälp av **både partikel- och våg-bilden tillsammans, inte separat**. I t.ex. vågbilden kan man förklara en del, och i partikelbilden kan man förklara en annan (eventuellt överlappande) del.

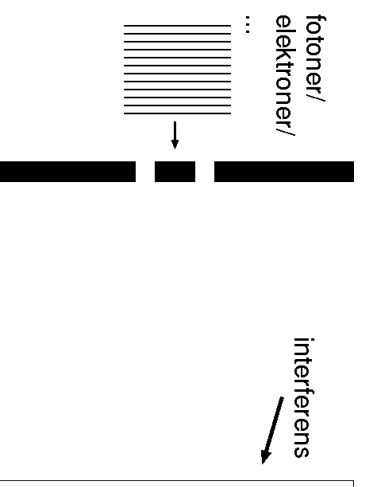
Förklaringarna från bägge bilderna kan inte vara motstridiga. Detta kommer sig av att man inte kan utforma ett experiment som mäter båda aspekterna (våg/partikel) av ett fenomen på en och samma gång.

Materiens Struktur I, 2013

▶▶ ▶▶ ◆ ▶▶▶▶ X 9

För att poängtera den duala naturen hos energi och materia införde man det allmänna begreppet **kvantpartikel**. Ljus är en kvantpartikel, elektronen är en kvantpartikel, o.s.v..

Betrakta ett tvåspaltsexperiment:



Figur 2: Tvåspaltsexperimentet.

Då ljus med våglängd av samma storleksordning som för de två spalterna (hålen) insänds kommer

Materiens Struktur I, 2013

▶▶ ▶▶ ◆ ▶▶▶▶ X 10

det att uppkomma ett interferensmönster i detektor som är placerad efter spalterna. Motsvarande händer då elektroner med lämpligt kort de Broglie-våglängd används istället för ljus.

Ljusets intensitet i en punkt P på detektorn är

$$c\epsilon_0\mathbf{E}_P^2 \quad (\text{IV.11})$$

där \mathbf{E} avser den inkommande vågens elfältsvektor. Detta elfält uppfyller en vågekvation som relaterar rums- och tidsberoendet hos vågen.

I partikelbilden är intensiteten

$$h\nu I_P \equiv c\epsilon_0\mathbf{E}_P^2 \quad (\text{IV.12})$$

där I_P är sannolikheten (per yta och tid) att en foton detekteras i punkten P . Detektorn innehåller fotoceller som genererar en ström då de mottager energin $h\nu$.

Ekv. (IV.12) anger att sannolikheten att en foton detekteras i punkten P är proportionell mot \mathbf{E}_P^2 för det inkommande ljuset.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ X 11

Om man använder t.ex. elektroner istället för ljus borde vi ha en analog formel, typ

$$E_e I_P \propto \Psi_P^2 \quad (\text{IV.13})$$

där E_e är elektronernas energi, och vi har skrivit Ψ_P^2 i analogi med fallet för ljuset. Vi förväntar alltså att vi kan associera ett fält Ψ med elektronen, och att detta fält kommer att uppfylla nås sorts vågekvation.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ X 12

IV.4. Determinism och slumpmässighet

Enligt Newtons mekanik kan vi förutse kroppars rörelse då vi känner den kraft som verkar på dem. För mikroskopiska partiklar är det dock annorlunda. För att mäta en partikels läge måste vi låta åtminstone en foton kollidera med den. Men i kollisionen sker ett utbyte av rörelsemängd, så fotonen stör elektronrörelsen. Trots denna motgång i betraktelsen av en foton och en elektron kommer man teoretiskt vidare — i stället för att räkna exakt blir vi tvungna att räkna statistiskt, med sannolikheter.

Materiens Struktur I, 2013

◄◄ ◀ ◊ ▶▶ ▶▶ × 13

IV.5. Osäkerhetsrelationen

W. Heisenbergs formulering av kvantpartikel-dynamik introducerades 1925. I teorin används långt ut matriser för att beräkna olika storheter. En teori som är enklare att förstå än Heisenbergs matrismekanik är vågmekaniken som baseras på de Broglies våghypotes. Från båda teorierna kan man härleda en så kallad **osäkerhetsrelation** som binder samman osäkerheten i **konjugerade variabler**.

Ett exempel på konjugerade variabler är x och p_x . Man kan visa att för dylika gäller osäkerhetsrelationen

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{IV.14})$$

Materiens Struktur I, 2013

◄◄ ◀ ◊ ▶▶ ▶▶ × 14

För tid och energi gäller en annan osäkerhetsrelation:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

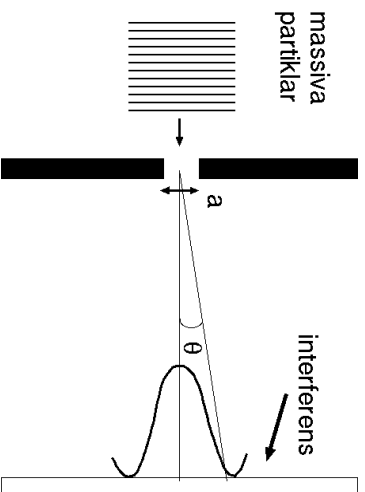
(IV.15)

Den sedvanliga motiveringen till osäkerhetsrelationen är att t.ex. observation av en partikels position kräver att vi bestrålar den med åtminstone en foton. Men bestrålningen som ger oss information om positionen kommer att påverka partikeln och ändra dess rörelsemängd. Med andra ord kan vi inte få exakt information om båda konjugerade storheterna.

Materiens Struktur I, 2013

◀▶◀▶◊▶▶▶▶ X 15

Exempel:



Figur 3: Diffraction.

En ström av partiklar kommer in mot en spalt och passerar denna. På skärmen bakom spalten uppstår ett diffraktionsmönster, då de Broglie-våglängden för partiklarna är av samma storleksordning som spaltens bredd. Diffraktionsmönstret har en stor central topp som omges av minimer och flera mindre toppar.

Materiens Struktur I, 2013

◀▶◀▶◊▶▶▶▶ X 16

Från diffraktionslära vet vi att det första minimet kring den centrala toppen inträffar för en vinkel θ som ges av uttrycket

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{a} \quad (\text{IV.16})$$

För de vågor som träffar skärmen i den centrala toppen har vi deras rörelsemängd är

$$p_y = \langle p_y \rangle \pm \Delta p_y = 0 \pm \Delta p_y$$

Vi kan se från figuren att

$$p_y \in [-p \sin \theta, p \sin \theta]$$

Osäkerheten är alltså

$$\Delta p_y = p \sin \theta = \frac{h \lambda}{\lambda a} = \frac{h}{a} \quad (\text{IV.17})$$

Partiklarnas position är

Materiens Struktur I, 2013



$$y \in [-d_y, d_y]$$

Osäkerheten är alltså

$$\Delta y = d_y \geq \frac{a}{2} \quad (\text{IV.18})$$

då elementarvågorna från början kommer från nå punkt inom spalten, och naturligtvis sprids utåt.

Vi får

$$\Delta p_y \Delta y \geq \frac{h a}{a 2} = \frac{h}{2} = \frac{1}{2} \frac{h}{2 \pi} 2 \pi = 2 \pi \frac{h}{2} > \frac{h}{2} \quad (\text{IV.19})$$

Detta är i överensstämmelse med osäkerhetsrelationen.

IV.6. Vågor och vågpaket

För en våg gäller att rörelsemängden $p = h/\lambda = \hbar k$ är exakt, eftersom våglängden är exakt. Enligt osäkerhetsrelationen är då "jäget" för vågen helt obestämt, d.v.s. vågen är utsmetad över hela världen.

Vi vet dock att masspartiklar som elektronen kan **lokaliseras** till ett rumsligt intervall. Detta kan inte göras om vi bara använder en enda våg, eftersom dessa är olokaliserade. Vi måste istället använda oss av flera monokromatiska vågor och bygga upp ett **vågpaket**.

Formen för en monokromatisk våg med våglängden λ och frekvensen $\nu = 1/T$ som rör sig i den positiva x -axelns riktning är

$$\Psi(x, t) = A \cos \left(2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T} \right) \right) = A \cos(kx - \omega t) \quad (\text{IV.20})$$

där vi använde oss av vågtalet $k = 2\pi/\lambda$ och **vinkelfrekvensen** $\omega = 2\pi\nu$. Argumentet $kx - \omega t$ är vågens **fas**.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶▶ X 19

Ett **vågplan** definieras av en konstant fas. Vågen själv kan ses som en oändlig sekvens av vågplan som fortskrider i en viss riktning.

Definiera ett vågplan:

$$kx - \omega t = \phi \quad (\text{IV.21})$$

Vågplanets plats är

$$x(t) = \frac{\phi + \omega t}{k} = x(0) + \frac{\omega}{k}t \equiv x(0) + v_\phi t, \quad (\text{IV.22})$$

Vågplanets hastighet kallas för dess **fashastighet**. Från uttrycket ovan ser vi att fashastigheten är

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} \quad (\text{IV.23})$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶▶ X 20

En våg uppfyller vågekvationen

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - v^2 \nabla^2 \Psi = 0 \quad (\text{IV.24})$$

Om $A \cos(kx - \omega t)$ är en lösning så kommer också $A \sin(kx - \omega t)$ att vara en lösning till samma vågekvation. Den fullständiga lösningen är då

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) + A \sin(kx - \omega t) \quad (\text{IV.25})$$

För att förenkla behandlingen använder man ofta den komplexa formen:

$$\Psi = A e^{i(kx - \omega t)} \equiv A \cos(kx - \omega t) + i A \sin(kx - \omega t) \quad (\text{IV.26})$$

Cosinus-formen fås då som

$$\text{Re}(\Psi) = \text{Re} \left(A e^{i(kx - \omega t)} \right) \quad (\text{IV.27})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ X 21

Låt oss nu addera två vågor med aningen olika vågvektorer och vinkelfrekvenser. Den ena vågen är

$$\Psi_1(x, t) = A e^{i((k+\delta k)x - (\omega+\delta\omega)t)} \quad (\text{IV.28})$$

och den andra vågen är

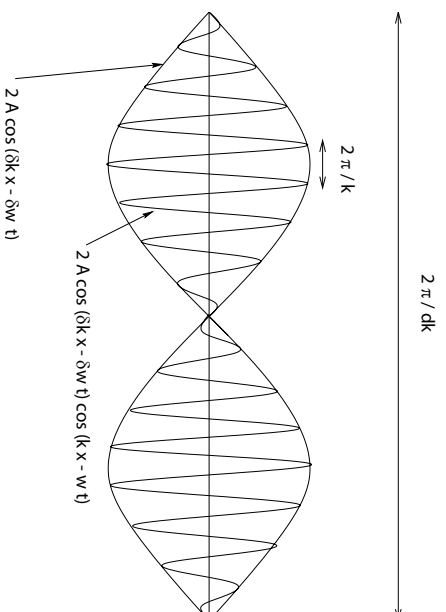
$$\Psi_2(x, t) = A e^{i((k-\delta k)x - (\omega-\delta\omega)t)} \quad (\text{IV.29})$$

Summan är

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi_1 + \Psi_2 \\ &= A [e^{i((k+\delta k)x - (\omega+\delta\omega)t)} + e^{i((k-\delta k)x - (\omega-\delta\omega)t)}] \\ &= A [e^{i(\delta kx - \delta\omega t)} + e^{-i(\delta kx - \delta\omega t)}] e^{i(kx - \omega t)} \\ &= 2A \cos(\delta kx - \delta\omega t) e^{i(kx - \omega t)} \end{aligned} \quad (\text{IV.30})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ X 22



Figur 4: Superposition.

Realdelen är

$$\text{Re}(\Psi) = 2A \cos(\delta kx - \delta \omega t) \cos(kx - \omega t) \quad (\text{IV.31})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ X 23

Vågen $A \cos(kx - \omega t)$ moduleras av vågen $2 \cos(\delta kx - \delta \omega t)$, som kallas *slöjvåg* (slöjfunktion). Fenomenet kallas för *svävning*. Bägge vågorna är fortskridande, med fashastigheterna $(\omega - \delta \omega)/(k - \delta k)$ och $(\omega + \delta \omega)/(k + \delta k)$.

Låt oss nu bygga upp ett vågpaket. Den allmänna formen är

$$\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{IV.32})$$

där $\omega = kv_\phi$, så

$$\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{ik(x - v_\phi t)} \quad (\text{IV.33})$$

Vågpaketet — summan av alla monokromatiska vågor med olika fashastigheter $v_\phi = \omega/k$ — rör sig en hastighet som kallas **gruppshastigheten**:

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ X 24

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (\text{IV.34})$$

(förmodligen ett skrivfel i boken; detta beror fortfarande på k då det borde vara en konstant för hela vågpaketet; jag skall tippa att formen borde vara

$$v_g = \left\langle \frac{d\omega}{dk} \right\rangle = \frac{1}{\int dk A(k)} \int dk A(k) \frac{d\omega}{dk} \quad (\text{IV.35})$$

)

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶◆▶▶▶▶▶ × 25

Med $\omega = kv_\phi$ fås

$$v_g = v_\phi + k \frac{dv_\phi}{dk} \quad (\text{IV.36})$$

Fashastigheten beror i allmänhet på $k = 2\pi/\lambda$. T.ex. för ljus har man att $v_\phi = c/n$, där brytningsindexet n beror på k . Då olika elementarvågor rör sig olika fort i ett visst medium talar man om **dispersion**.

För det mesta kan vågpaket för massiva partiklar modelleras så att vågpaketets amplitudfunktion $A(k)$ är klockformad, d.v.s vågor kring ett visst k -värde \bar{k} förekommer mycket, medan förekomsten av mindre och större vågtal är redan mycket liten.

Då fås

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=\bar{k}} \quad (\text{IV.37})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶◆▶▶▶▶▶ × 26

För en kvantpartikel gäller allmänt

$$E = h\nu = \hbar 2\pi\nu = \hbar\omega \quad (\text{IV.38})$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad (\text{IV.39})$$

så

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(E/\hbar)}{d(p/\hbar)} = \frac{dE}{dp} \quad (\text{IV.40})$$

För en fri icke-relativistisk partikel gäller

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{IV.41})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 27

så

$$v_g = \frac{p}{m} = v \quad (\text{IV.42})$$

En klassisk partikel kan alltså modelleras som ett vågpaket.

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 28

Uppgifter

- [1] En stråle av 1 eV elektroner träffar en kristall, vars kristallplan befinner sig på avståndet 0,025 nm från varandra. Bestäm den vinkel ϕ i vilken det första diffraktionsmaximet ses. Uppträder högre ordningens diffraktionsmönster? (B & M 4.4).
- [2] En proton i en kärna känner av den starka kraften, då den befinner sig på avstånd mindre än 10^{-15} m från andra nukleoner. Uppskatta utgående från detta den bundna protonens energi. Vad kan man säga om den potentiella energin? (B & M 4.7).