
NATUURKUNDE 5

Quantummechanica: Principes

I am at all events convinced that He does not play dice.

Albert Einstein

God not only plays dice.

He also sometimes throws the dice where they cannot be seen.

Stephen Hawking

God rolls the dice every time a quantum interaction takes place.

Heinz Pagels

Kernbegrippen

$$\epsilon = h f, \quad p = \frac{h}{\lambda}, \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2\pi}$$

De Broglie relaties

dualiteit van golf – en deeltjes beschrijving

golffunctie

Heisenberg onzekerheidsrelaties

waarschijnlijkheidsdichtheid

quantisatie van energie

Inleiding

Tegen het einde van de negentiende eeuw werden steeds meer verschijnselen ontdekt die niet met de toen bekende theorieën van de natuurkunde verklaard konden worden. We geven hiervan enkele voorbeelden en laten in het kort een aantal experimentele observaties en theoretische beschouwingen in historisch perspectief de revue passeren. Achtereenvolgens maken we zo kennis met:

- de quantisatie van energie,
- de dualiteit van golf- en deeltjesbeschrijving van electromagnetische straling, leidend tot het begrip *foton* als drager van het energiequantum van deze straling en als grootte waaraan een impuls toegekend kan worden,
- materiegolven waarmee deeltjes op atomaire schaal beschreven kunnen
- de begrippen *golffunctie* en *waarschijnlijkheidsdichtheid*
- de statistische interpretatie die het deeltjes- en golfkarakter van deeltjes op atomaire schaal met elkaar verzoent.

Theorie

▼ Thermische straling

▼ Zwarte straler

Een vast lichaam dat in thermisch evenwicht is met zijn omgeving is, emiteert en absorbeert gelijke hoeveelheden straling.

- Bijvoorbeeld: een steen die in een oven verwarmd is, straalt energie uit naar zijn omgeving totdat de omgevingstemperatuur bereikt is. Voor temperaturen tot ruwweg 1000 K ligt de geëmitteerde straling voornamelijk in het infrarood en voelen we de warmte die de steen uitstraalt. Bij hogere temperaturen zendt de steen straling in het zichtbare gebied uit en zien we de steen gloeien, eerst donkerrood maar steeds heller naarmate de temperatuur van de oven hoger was.

Metingen met een frequentiegevoelige detector tonen aan dat het spectrum van de uitgezonden straling een maximum laat zien voor een zekere golflengte λ_{\max} die afhankelijk is van de temperatuur van de steen. De uitgezonden straling hangt slechts in beperkte mate af van de oppervlakte condities van de steen. Het blijkt dat het uitgezonden spectrum universeel is voor zogenaamde *zwarte lichamen* (lichamen die alle opvallende straling absorberen en niets reflecteren). In de figuur wordt de thermische emissie van een lichaam, zoals dat experimenteel gevonden wordt, weergegeven voor drie verschillende temperaturen.

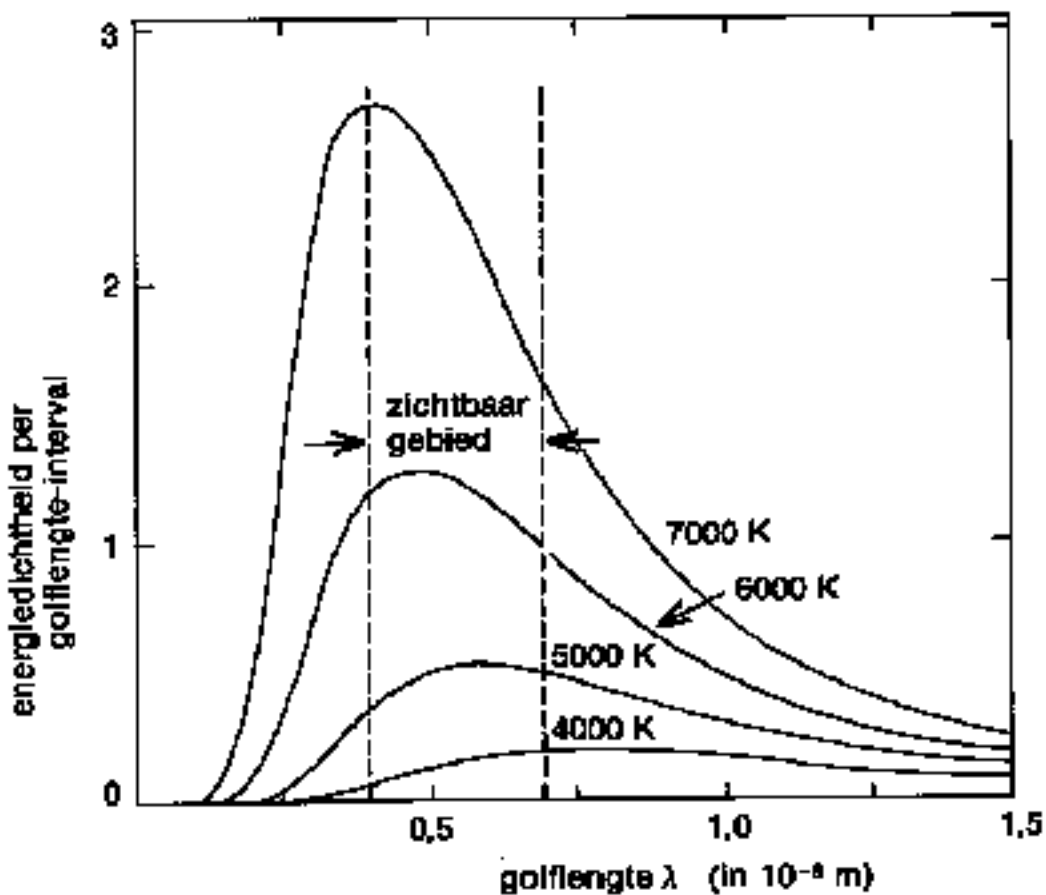


Figure 1

▽ Stralingswetten van Stephan en Wien

In de figuur hierboven stelt $E_\lambda d\lambda$ de energie voor die in het golflengte-interval tussen λ en $\lambda + d\lambda$ per vierkante meter wordt uitgezonden. Men kan daaruit bepalen dat de geïntegreerde emissie over het gehele frequentiegebied:

$$E(T) = \int_0^\infty E_\lambda(T) d\lambda \quad (1)$$

toeneemt met de temperatuur volgens de *wet van Stefan* (1879):

$$E(T) = \sigma T^4 \quad (2)$$

met voor σ , de *Stefan-Boltzmann constante*, de experimenteel bepaalde waarde: $5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$. Voor de temperatuurafhankelijkheid van λ_{max} geldt de eveneens experimenteel bepaalde *verschuivingswet van Wien* (1896):

$$\lambda_{\text{max}} T = 2.90 \times 10^{-3} \text{ m K} \quad (3)$$

waarin T de temperatuur voorstelt waarvoor het maximum gerealiseerd wordt. Noch de stralingswet van Stefan, noch de verschuivingswet van Wien kunnen met een klassieke benadering van de natuurkundewetten begrepen worden.

▽ Stralingswet van Rayleigh-Jeans

Het gedrag bij lage frequenties (grote golflengten) van een zwarte straler kan beschreven worden met de klassieke stralingswet van Rayleigh-Jeans voor de energie per tijdseenheid per volume eenheid:

$$E_\lambda = 2 \pi c k_B \frac{T}{\lambda^4} \quad (4)$$

met k_B de constante van Boltzmann en c de lichtsnelheid. In afwijking met wat wordt waargenomen, voorspelt de wet van Rayleigh-Jeans dat bij hoge frequenties (kleine golflengten) de energie groeit naar oneindig. Deze discrepantie tussen het experiment en de klassieke theorie wordt de "ultraviolet catastrofe" genoemd.

▽ Stralingswet van Planck

Achtergrond van de stralingswet van Rayleigh-Jeans is een beschouwing waarin de straling die een thermisch lichaam uitzendt, geassocieerd wordt met een verzameling van staande golven die elk, volgens het equipartitie principe, een gemiddelde energie van $k_B T$ hebben. Om het afwijkend gedrag voor kleine golflengtes (hoge frequenties) te verklaren veronderstelde Planck in 1900 dat in plaats van $k_B T$, de gemiddelde energie per staande golf met frequentie f gelijk is aan:

$$\epsilon_f = \frac{h f}{e^{h f / k_B T} - 1} \quad (5)$$

waarbij λ en f samenhangen via de relatie $\lambda f = c$ (de lichtsnelheid). Essentieel in deze uitdrukking is dat de gemiddelde energie per staande golf niet in willekeurig kleine stappen kan toenemen maar dat een ondergrens $h f$ bestaat voor de kleinste energietoename. Voor hogere temperaturen ($h f / k_B T \rightarrow 0$) vinden we:

$$e^{\frac{h f}{k_B T}} \rightarrow 1 + \frac{h f}{k_B T} \quad (6)$$

waaruit volgt $\epsilon_f \rightarrow k_B T$, het klassieke resultaat.

De ansatz van Planck leidt tot een uitdrukking voor de stralingsintensiteit :

$$E_\lambda = 2 \pi h c^2 \frac{1}{\lambda^5 (e^{h c / \lambda k_B T} - 1)} \quad (7)$$

- De constanten en de macht van λ in deze uitdrukking zijn zo gekozen dat voor hoge temperatuur de wet van Rayleigh-Jeans (4) wordt teruggevonden.

Het maximum in E_λ vinden we door te stellen $d E_\lambda / d \lambda = 0$ waaruit volgt:

$$\lambda_{\max} T = 0.2014 \frac{h c}{k_B} \quad (8)$$

waaruit de wet van Wien (3) direct valt af te leiden. Voor de totale intensiteit leiden we af

$$\int_0^\infty E_\lambda(T) d \lambda = \frac{2 \pi (k_B T)^4}{h^3 c^2} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} d x \quad (9)$$

met de afkorting $x = h c / \lambda k_B T$.

De integraal heeft de waarde

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

$$\frac{\pi^4}{15}$$

waarmee ook een uitdrukking voor de Stefan-Boltzmann constante wordt gevonden:

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 c^2 h^3} \quad (10)$$

▼ Kosmische achtergrondstraling

In 1965 vonden Arno Penzias en Robert Wilson met een radiotelescoop een achtergrond signaal dat niet uit een bepaalde richting kwam en kennelijk niet werd uitgezonden door een lokaliseerbare bron in het heelal. (Het ruissignaal op de TV bestaat voor ongeveer 1% uit deze achtergrond straling.) Uit verder onderzoek bleek het energiespectrum van dit signaal precies de Planckse vorm te hebben met een temperatuur van $T = 2.73$ K. De verklaring voor dit signaal wordt gegeven door de kosmologie: de achtergrond straling is het restant van straling die onstond toen het heelal veel heter was, ongeveer 700.000 jaar na de oerknal. Door de uitzetting van het heelal is deze straling die toen een temperatuur had van 3000 K afgekoeld tot de nu gemeten waarde.

- Het bestaan van de achtergrondstraling wordt beschouwd als het belangrijkste bewijs voor de oerknal theorie.
- De achtergrondstraling is ook de bevestiging van het zeer universele karakter van de formule van Planck.

▼ Quantisatie van energie

▼ Foto-electrisch effect

Het foto-electrisch effect werd in de jaren 1890-1900 uitvoerig bestudeerd door Halwachs en Lenard en vormde een van de eerste toepassingen van de nieuwe quantumtheorie.

Een bundel licht is in staat electronen uit een metaaloppervlak vrij te maken. De kinetische energie van de vrijgekomen electronen kan vervolgens gemeten worden.

- Het verrassende resultaat van deze experimenten is dat de kinetische energie niet door de intensiteit van de opvallende lichtbundel bepaald wordt maar door de frequentie.
- De intensiteit is wel bepalend voor het aantal electronen dat uit het metaaloppervlak vrijgemaakt wordt.

Einstein kon in 1902 een beschrijving van deze experimenten geven door te gebruik te maken van de hypothese van Planck dat de energie van het opvallend licht gequantiseerd is in eenheden hf . De energie van het lichtquantum wordt nu gebruikt om het electron uit het metaal te laten treden (uittreearbeid $= e V_A$) en het electron daarnaast nog kinetische energie mee te geven:

$$hf = e V_A + \frac{1}{2} m v^2 \quad (11)$$

De kinetische energie kan uit de waarde van de remspanning bepaald worden.

In de figuur wordt een schets gegeven van de opstelling waarmee het foto-electrisch effect

gedemonstreerd en de constante van Planck bepaald kan worden. Licht van voldoende hoge frequentie maakt electronen op de kathode vrij. De electronen gaan naar de anode en veroorzaken zo een fotostroom. Door een tegenspanning tussen anode en kathode aan te brengen kunnen electronen zover afgeremd worden dat ze juist de anode niet meer bereiken. De waarde van de remspanning is afhankelijk van de frequentie van het opvallende licht.

Men kan de foto-stroom, i , meten als functie van het spanningsverschil tussen anode en kathode voor opvallend licht van frequentie f ; zie figuur. De rempotentiaal, V_0 , is onafhankelijk van de lichtintensiteit I ; de fotostroom is voor grote waarden van het potentiaalverschil evenredig met de intensiteit I .

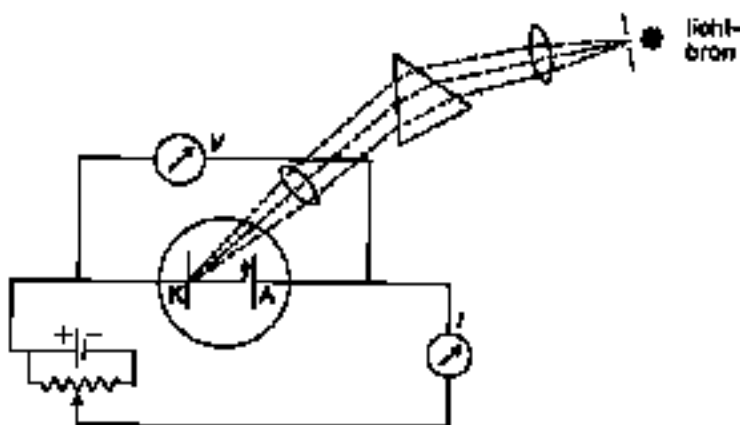


Figure 2

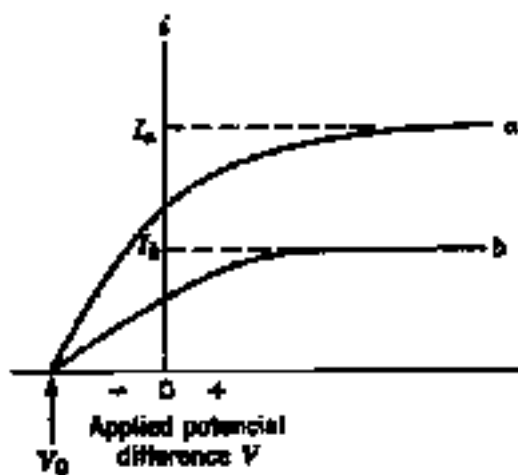


Figure 3

▽ Emissie spectrum van een sterk verhit gas

Meten we het emissiespectrum van de zon (een gloeiende gasmassa) dan vinden we naast het continue spectrum zoals dat bij benadering in figuur 1: door de curve voor $T = 5000$ K gegeven wordt, veel emissielijnen bij golflengten die karakteristiek voor waterstof en helium blijken te zijn. Deze emissielijnen gaven de eerste aanwijzingen dat waterstofatomen en heliumatomen een inwendige structuur hebben met karakteristieke resonantiefrequenties. De emissielijnen kunnen in groepen ingedeeld worden (Lyman-, Balmer-, Paschen-reeks voor waterstof, bijvoorbeeld) volgens de volgende systematiek:

$$\frac{1}{\lambda_{n,m}} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m \quad (12)$$

met de *Rydberg constante*: $R_H = 1.0974 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$;

$m = 1$: Lyman reeks,

$m = 2$: Balmer reeks,

$m = 3$: Paschen reeks.

▽ Bohr atoom-model

De fysische achtergrond van de gemeten Balmer- en andere spectra bleef lange tijd een raadsel tot de Deense fysicus Niels Bohr in 1913 met een beschrijving kwam die gebaseerd is op een "planetair" atoommodel, waarbij nagenoeg de gehele atomaire massa geconcentreerd is in een kleine positief geladen kern en waarbij de electronen zich op grote afstand in planeetvormige banen rond de kern bewegen. De overgang van het electron van de ene planetenbaan naar de andere gaat gepaard met de emissie/absorptie van licht volgens onderstaande formule:

$$E_b - E_e = h f \quad (13)$$

waarbij E_b en E_e de energie in de begin- en eindtoestand aangeven.

Volgens het atoommodel van Bohr kan het electron in het waterstof atoom in verschillende banen rond de kern draaien. Vanuit een baan met hogere energie en hoger kwantumgetal n kan het electron terugvallen op een baan van lagere energie en daarbij electro- magnetische straling uitzenden. In figuur 4 staan de verschillende reeksen van spectraallijnen aangegeven met de namen van de onderzoekers die de systematiek achterhaald hebben.

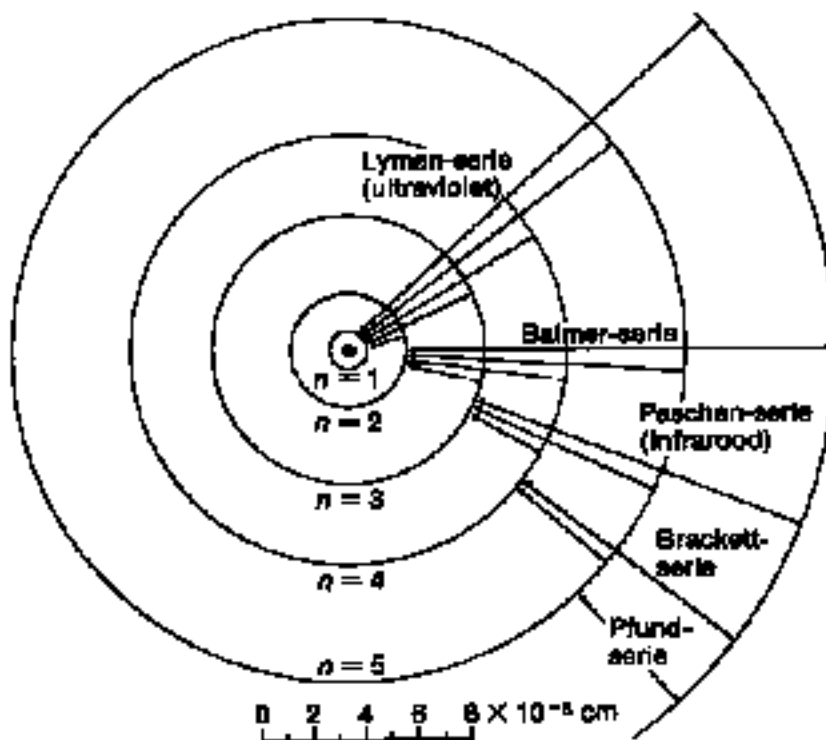


Figure 4

- In dit model bleek het mogelijk te zijn de Rydberg constante uit te drukken in een aantal elementaire constanten:

$$R_H = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \quad (14)$$

Als waarden voor de elementaire constanten worden ingevuld, komt dit precies overeen met het experimentele resultaat voor R_H .

▼ Dualiteit van golf- en deeltjeskarakter

▼ Compton effect

Het foto-electrisch effect vormde het bewijs van het gequantiseerd karakter van electromagnetische straling. Een aanwijzing dat deze energiequanta (fotonen) ook een deeltjeskarakter hebben kwam later aan het licht. In 1921 voerde Compton een reeks experimenten uit waarbij hij Röntgenstraling liet invallen op een bundel electronen die zich loodrecht op de richting van de Röntgenstraling bewegen.

In figuur 5 botst een foton γ met frequentie f op een electron; het foton wordt daardoor verstrooid over een bepaalde hoek; na de botsing is de frequentie f' van foton γ' lager dan de oorspronkelijke frequentie f .

Compton observeerde dat naast de rechtdoorgaande Rö-stralen er in het vlak loodrecht op de electronenbundel ook stralingsintensiteit bij andere hoeken gemeten kan worden, maar met een afwijkende golflengte.

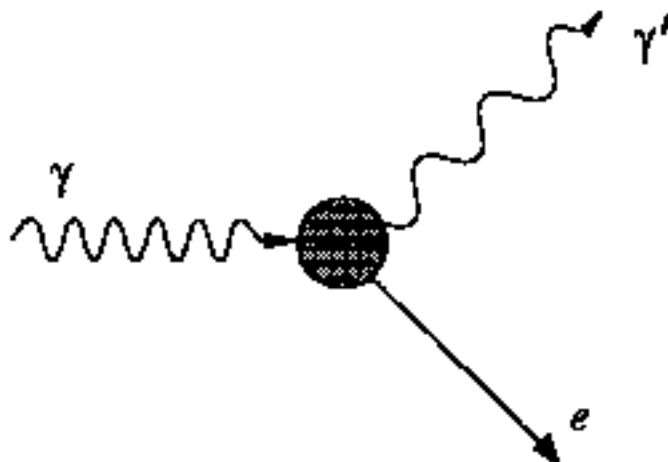


Figure 5

- Empirisch werd het volgende verband tussen de afbuighoek θ en de toename in golflengte van het verstrooide Röntgenlicht gevonden:

$$\Delta \lambda = \lambda_C (1 - \cos(\theta)) \quad (15)$$

waarbij voor λ_C , de *Comptongolflengte*, de experimentele waarde $0.024 \cdot 10^{-10}$ m bepaald werd.

De verklaring voor dit effect werd in 1923 door Debye en Compton gevonden door de interactie tussen de Röntgenbundel en de elektronen als een elastisch botsingsproces op te vatten. Hierin wordt de Röntgenbundel opgevat als een stroom van fotonen waarbij aan de fotonen

- een energie $h f$ en
- een impuls $h f / c$

wordt toegekend. Het deeltjeskarakter van electro-magnetische straling werd hierbij op overtuigende manier aangetoond.

▼ De Broglie relaties

Het foto-electrische effect en het Compton effect gaven een duidelijke demonstratie van de energiekwantisatie en het deeltjes karakter van electromagnetische straling. Electromagnetische straling kan opgevat worden als een bundel van een bijzonder soort deeltjes, de fotonen. Het bijzondere schuilt in de voortplantingssnelheid van de fotonen die gelijk is aan de lichtsnelheid. In 1923 kwam De Broglie met de gewaagde veronderstelling dat deze dualiteit van golf- en deeltjeskarakter ook geldt voor materie-deeltjes. Het deeltjeskarakter van materie-deeltjes wordt beschreven met de grootheden energie en impuls. Het golfkarakter van materie-deeltjes, daarentegen, wordt gekarakteriseerd door golflengte en frequentie.

- De Broglie postuleerde voor materiedeeltjes de volgende relaties tussen frequentie en energie en tussen golflengte en impuls:

$$f = \frac{E}{h} \quad (16)$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (17)$$

- De hypothese van De Broglie werd in 1928 bevestigd door experimenten van Davisson en Germer waarin diffractiepatronen waargenomen werden voor electronen die aan een één-kristallijn oppervlak van een vaste stof gereflecteerd werden.

De rijen atomen in het éénkristallijne oppervlak verstrooien de opvallende electronen juist zoals de lijnen van een tralie opvallend licht gereflecteren. Davisson en Germer waren in staat de snelheid van de opvallende electronen te bepalen en konden daaruit de golflengte van de electronen berekenen. Anderzijds konden zij uit het diffractiepatroon en de bekende afstand tussen de rijen van atomen in de vaste stof, ook een golflengte berekenen. De twee resultaten stemden overeen en gaven daardoor een experimentele bevestiging van de De Broglie relaties.

- Merk op dat de De Broglie relaties tussen frequentie en energie en tussen golflengte en impuls, dezelfde zijn als die welke bij de beschrijving van het Compton effect gehanteerd worden.
- Een hedendaagse toepassing van deze dualiteit is de electronenmicroscop waarmee met een bundel electronen een afbeelding van zeer kleine voorwerpen gemaakt kan worden.

▽ Heisenberg onzekerheidsrelaties

Het toekennen aan materie deeltje van een golfkarakter heeft verdragende consequenties voor de beschrijving van positie en beweging van de deeltjes. In de klassieke mechanica kennen we de idealisering van de puntmassa waarvan de plaats als functie van de tijd met mathematische precisie afgeleid kan worden uit de bewegingsvergelijkingen. Die mathematische precisie kan niet van toepassing zijn op een deeltje dat met een golflengte beschreven wordt omdat de positie niet beter dan op een golflengte bepaald kan worden.

- Deze onbepaaldheid is een fundamenteel aspect van de quantummechanica en heeft in 1927 Heisenberg ertoe gebracht de volgende onzekerheidsrelatie te poneren:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{2\pi} \quad (18)$$

Dit houdt in dat naarmate de positie van een deeltje beter bepaald wordt, de impuls een grotere onzekerheid krijgt. Gelijkluidende uitdrukkingen kunnen voor de y- en z- componenten van plaats en impuls opgeschreven worden.

Deze onzekerheidsrelatie kan met het volgende "gedachte-experiment" geïllustreerd worden, zie figuur 6. Een deeltje wordt onder een microscoop met apertuur ϵ bekeken waarbij slechts een enkel foton met golflengte λ het deeltje treft. Uit de optica is bekend dat vanwege het golfkarakter van het licht, het deeltje als een vlekje afgebeeld wordt met een diameter:

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin(\epsilon)} \quad (19)$$

We zien de afbuiging van het licht door het deeltje als een botsingsproces. Het afgebogen foton treedt binnen een hoek 2ϵ het objectief van de microscoop binnen. Dit houdt in dat er bij de impulsoverdracht tussen deeltje en foton een onzekerheid in de x-component van de impuls is die gelijk is aan:

$$\Delta p_x = \frac{h \sin(\epsilon)}{\lambda} \quad (20)$$

Combinatie van deze twee uitdrukkingen geeft inderdaad een waarde voor het product van Δx en Δp_x die van de orde is van h , de Planckse constante.

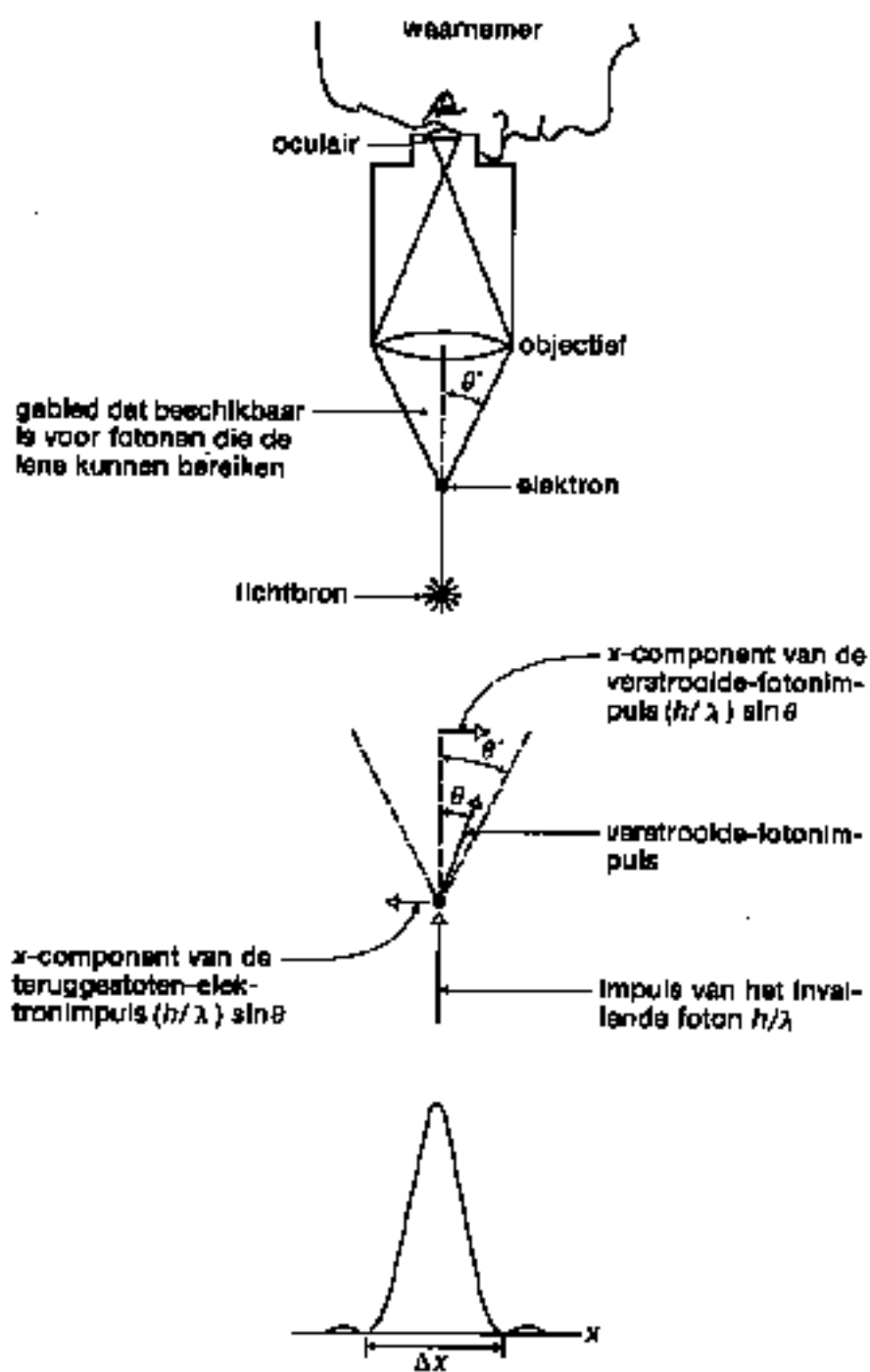


Figure 6

▽ Waarschijnlijkheid en golffunctie

De plaatsfunctie $x(t)$ in de klassieke mechanica wordt in de quantummechanica vervangen door een functie die ook het golfkarakter kan weergeven. Deze functie wordt de *golffunctie* genoemd die meestal genoteerd wordt als $\psi(x, t)$. In het algemeen is $\psi(x, t)$ een complexe functie en heeft alleen de absolute waarde $|\psi(x, t)|$ een reële betekenis. In het bijzonder wordt de grootheid $|\psi(x, t)|^2 dx$ opgevat als de kans om het deeltje dat met $\psi(x, t)$ beschreven wordt in het interval dx aan te treffen. De grootheid $|\psi(x, t)|^2$ wordt de *waarschijnlijkheidsdichtheid* genoemd.

In veel fysische problemen is de waarschijnlijkheidsdichtheid onafhankelijk van de tijd. We spreken dan van een *stationaire toestand*. In dat geval noteren we de golffunctie als $\psi(x)$. Een voorbeeld van een golffunctie die een deeltje op een bepaalde positie beschrijft zou de volgende functie kunnen zijn:

$$\psi(x) = \int_0^{\infty} A(\lambda) \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) d\lambda \quad (21)$$

een superpositie van sinus-achtige functies elk met amplitude $A(\lambda)$. Er is een duidelijke relatie tussen het bereik van λ -waarden waarvoor $A(\lambda)$ van nul verschilt en de uitgebreidheid van de functie $\psi(x)$, zie Voorbeeld; de breedte van $\psi(x)$ is omgekeerd evenredig met die van $A(\lambda)$.

Testvragen

▽ 1. foton

Een foton heeft

? energie $\epsilon = ?$

? impuls $p = ?$

? massa $m = ?$

▽ 2. infrarood foton

Vergelijk een radio-foton met een infrarood foton.

☐ een radio-foton heeft een grotere energie

☐ een grotere golflengte

☐ een grotere massa

▽ 3. ultraviolet foton

De energie van een ultraviolet-foton ($UV \div 200 \text{ nm}$) verhoudt zich tot de energie van een Röntgen-foton ($R\ddot{o} \div 0.1 \text{ nm}$) als:

☐ $1 : 5 \times 10^{-3}$

☐ $1 : 2000$

☐ $1 : 2 \times 10^{-3}$

▽ 4. zonlicht

De intensiteit van het zonlicht is maximaal in het geel-groen (golflengte 510 nm). Dit betekent dat de oppervlaktetemperatuur van de (T_{zon}) gegeven wordt door:

☐ $T_{\text{zon}} = 4000 \text{ K}$

☐ $5000 \text{ K} < T_{\text{zon}} < 6000 \text{ K}$

☐ $T_{\text{zon}} = 7000 \text{ K}$

▽ 5. ultraviolet licht

Ultraviolet licht kan schade aan de huid aanbrengen omdat:

☐ de golflengte van het ultraviolet licht vergelijkbaar is met de karakteristieke lengteschalen in de huidcel

☐ ultraviolet licht een gevaarlijk soort straling is

☐ ultraviolet licht selectief door de cel geabsorbeerd wordt

▽ 6. atoom

Als een atoom een foton uitzendt, zal dan de energie van het atoom

☐ af nemen

☐ toenemen

- ☐ gelijk blijven ?

▽ 7. waterstofatoom

Een waterstof atoom wordt geexciteerd naar een toestand waarbij het electron zich in een baan begeeft die gekarakteriseerd wordt door het hoofdquantumgetal $n = 3$. Bij terugvallen naar de grondtoestand wordt licht uitgezonden dat meerdere golflengten bevat. Welke van de volgende uitspraken zijn juist?

- ☐ er zijn drie karakteristieke frequenties
- ☐ er zijn twee karakteristieke lijnen waarvan de golflengten zich verhouden als 27 : 32
- ☐ er zijn twee karakteristieke lijnen waarvan de golflengten zich verhouden als 5 : 32

▽ 8. electron

Heeft een electron dat met dezelfde snelheid beweegt als een proton een golflengte die

- ☐ groter is
- ☐ kleiner is
- ☐ hetzelfde is

als die van het proton ?

▽ 9. constante van Planck

Een knikker met een massa van 1 gram ligt op de bodem van een horizontale koker met een lengte van 1 meter. Stel eens dat in de Heisenberg onzekerheidsrelatie de constant van Planck niet de waarde 6.6×10^{-34} Js heeft maar van de orde van 1 Js is. In dat hypothetische geval zal de knikker:

- ☐ rustig op de bodem van de koker blijven liggen
- ☐ met grote snelheid in de koker op en neer springen
- ☐ zich gemiddeld iets beneden het midden van de koker bevinden

▼ 10. Heisenberg onzekerheidsrelatie

De Heisenberg onzekerheidsrelatie kan aannemelijk gemaakt worden aan de hand van een experiment waarbij de waarneming de toestand van het geobserveerde deeltje verandert. Ook in het dagelijks leven kan een waarneming de realiteit van het object beïnvloeden. Voor welk van de drie volgende acties geldt dit?

- ☐ kijken naar de volle maan
- ☐ meten van de temperatuur van een voorwerp met een thermometer
- ☐ organiseren van verkiezingsenquetes

Mathematica

▼ Packages

Voor dit notebook heb je de volgende packages nodig:

```
<< Graphics`Colors`
<< Graphics`Graphics`
<< Statistics`DescriptiveStatistics`
```

▼ Commando's

▼ Sum

Het maken van de som $\sum_{i=\text{imin}}^{\text{imax}} f$ gaat als volgt: `Sum[f, {i, imin, imax}]`.

```
f[x_, i_] := xi
```

```
Sum[f[x, i], {i, 0, 4}]
```

$$1 + x + x^2 + x^3 + x^4$$

▼ Fit

Met **Fit** kun je uit een lijst gegevens met behulp van de kleinste-kwadratenmethode een fit maken. Als we uitgaan van een lijst gegevens van de vorm:

```
data = {{x1, y1}, {x2, y2}, ...}
```

en we zoeken het verband:

```
f = a var + b
```

dan doen we dat als volgt:

```
Sum[data, {1,var}, var]
```

▼ D

Met de operator **D** kun je de afgeleide van een bepaalde functie berekenen.

De eerste afgeleide naar x:

```
D[Sin[x] + x^2, x]
```

```
2 x + Cos[x]
```

De n-de afgeleide naar x:

```
D[Sin[x] + x^2, {x, n}]
```

```
Sin(n)[x] + Power(n,0)[x, 2]
```

```
n = 3;
D[Sin[x] + x^2, {x, n}]
```

```
-Cos[x]
```

Voorbeelden

▼ Golf functie

We proberen ons voor te stellen hoe een electron tegelijk een deeltje en een golf kan zijn. We beginnen met de meest simpele golf die we ons kunnen voorstellen: de cosinusfunctie. We weten dat het verband tussen golflengte en impuls gegeven wordt door de De Broglie relatie:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (22)$$

Het is handig het golfgetal $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ te introduceren en te schrijven:

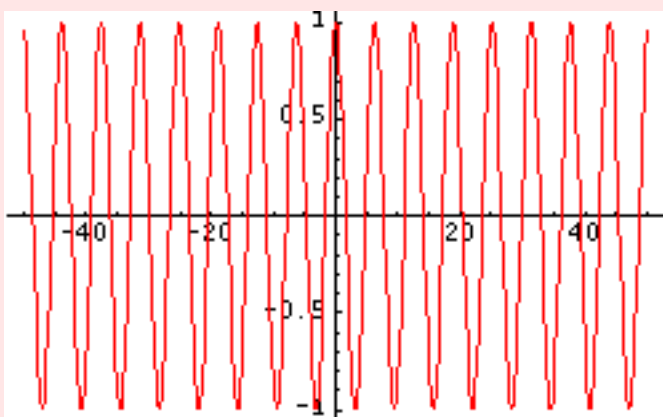
$$p = \frac{h k}{2\pi} \quad (23)$$

▼ Harmonische golf

```
<< Graphics`Colors`;  
phi[k_, x_] := Cos[k x]
```

Voor golfgetal $k = 1$; krijgen we

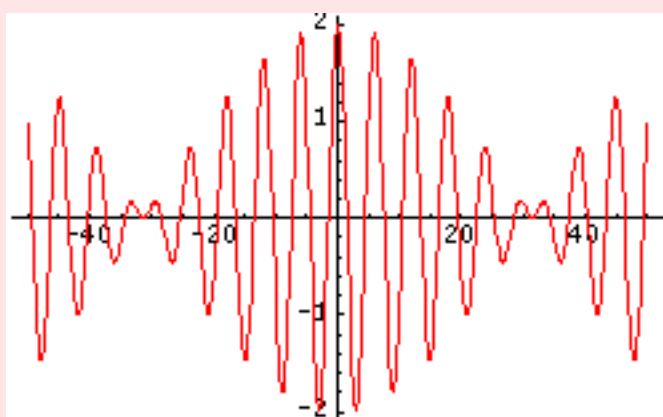
```
Plot[phi[1, x], {x, -50, 50}, PlotStyle -> Red];
```



- Denk na over de uitspraak dat voor een gegeven impuls de cosinus een oneindige uitgebreidheid heeft. Is dit in overeenstemming met de Heisenberg relatie?

▼ Superpositie

Laten we nu eens bekijken hoe de golfvunctie er uit ziet als twee cosinussen met enigszins verschillende golflengten bij elkaar worden opgeteld. Experimenteer met een aantal waarden van golflengte en probeer iets te maken dat op onderstaande figuur lijkt:



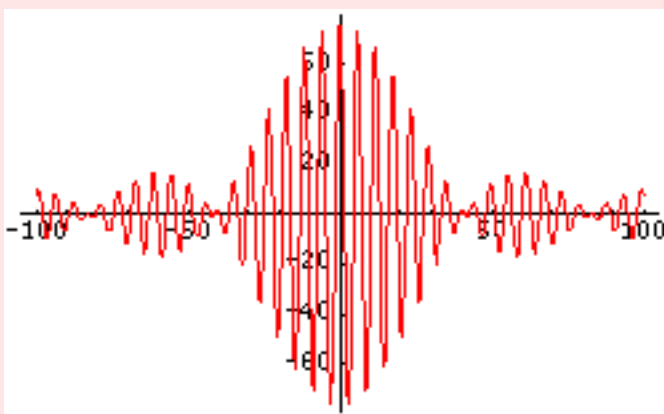
- Wat is de interpretatie van bovenstaande figuur?

▽ Golfpakket

Nu hetzelfde met veel golflengtes die net iets verschillen van elkaar. We noemen deze superpositie van golven een *golfpakket*.

```
golfpakket[x_] := Sum[phi[1 + 0.002 n, x], {n, 0, 75}]
```

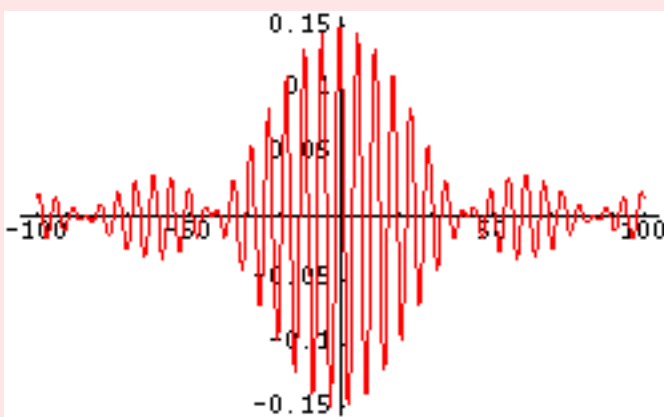
```
Plot[golfpakket[x], {x, -100, 100}, PlotStyle -> Red];
```



Omdat de stappen klein zijn kunnen we het golfpakket ook definiëren als een integraal:

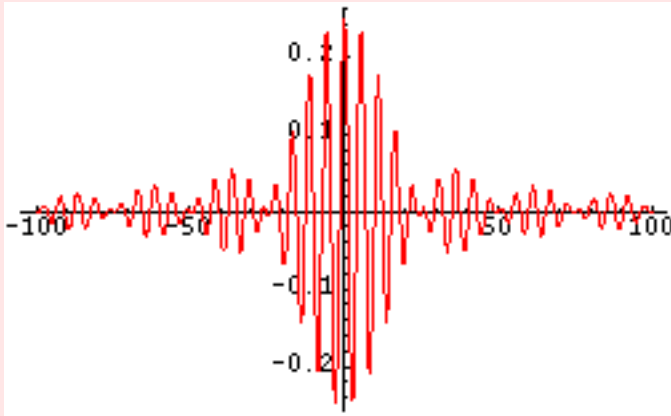
```
golfpakket[x_] := Integrate[phi[k, x], {k, 1, 1.15}]
```

```
Plot[golfpakket[x], {x, -100, 100}, PlotStyle -> Red];
```



```
golfpakket[x_] := Integrate[phi[k, x], {k, 1, 1.25}]
```

```
Plot[golfpakket[x], {x, -100, 100}, PlotStyle -> Red, PlotRange -> All];
```



- Haal uit bovenstaande figuren een schatting voor de spreiding in de plaats (Δx) en reken het product uit met de spreiding in golfgetal (Δk).

Geef dit het antwoord dat je verwacht?

▽ Fourier integraal

In de hierboven bestudeerde superposities van cosinusfuncties geeft ieder van de cosinussen dezelfde bijdrage aan het uiteindelijke golfpakket. Je kunt ook iedere golflengte een eigen bijdrage geven. Daartoe vermenigvuldigen we de cosinusfuncties met een functie $A(k)$ en schrijven:

$$\Psi(x) = \int_0^{\infty} A(k) \cos(kx) dk \quad (24)$$

- Een dergelijke uitdrukking wordt een Fourier-integraal genoemd.

In het algemeen kunnen we de functie $A(k)$ kiezen als een piek rond een zekere waarde k_0 . Door de breedte van de piek te variëren kunnen we de breedte van het golfpakket variëren. Er is een duidelijke relatie tussen het bereik van k -waarden waarvoor $A(k)$ van nul verschilt en de uitgebreidheid van de functienctie $\Psi(x)$, zie figuur 1 en 2:

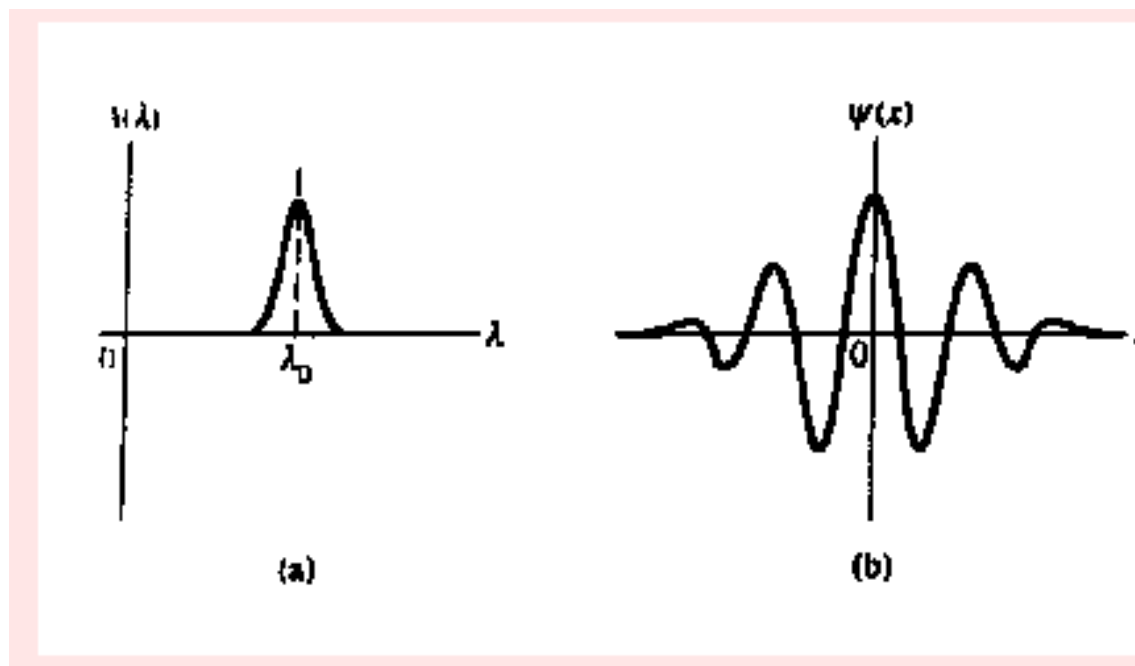


Figure 7

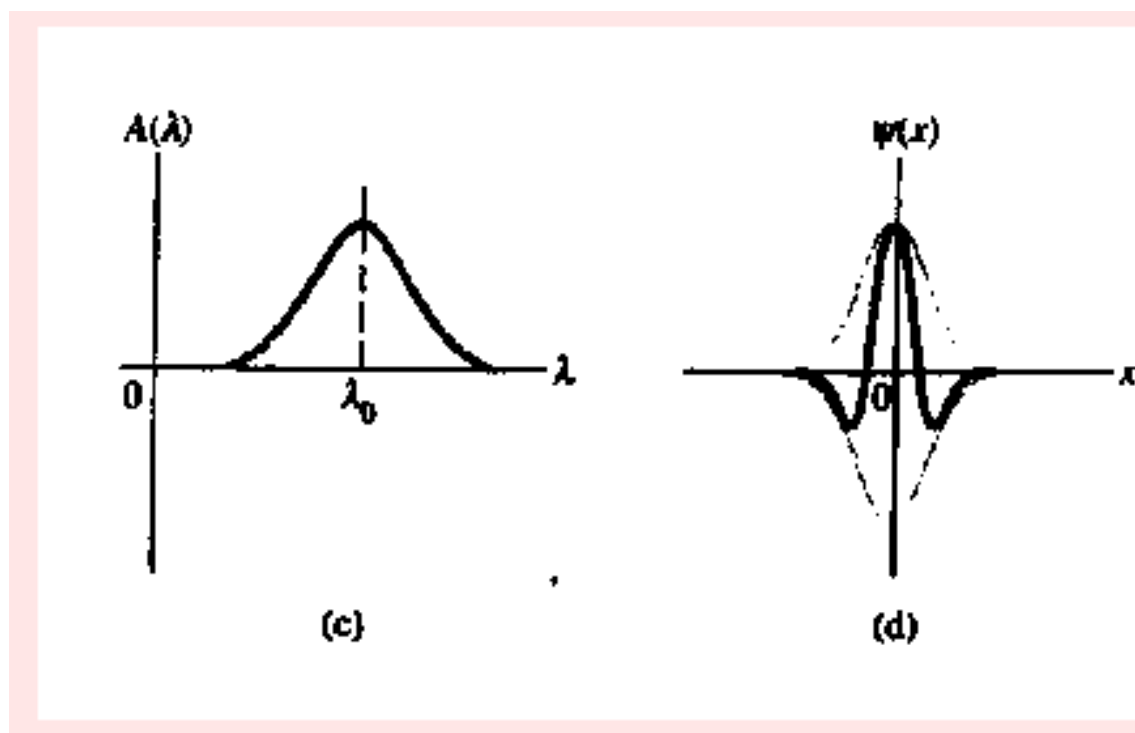


Figure 8

- de breedte van $\psi(x)$ is omgekeerd evenredig met die van $A(k)$.

De breedte van $A(k)$ hangt samen met de onzekerheid in de impuls, terwijl de breedte van de golffunctie $\psi(x)$ samenhangt met de onzekerheid in de plaats van het deeltje. Dit is een illustratie van de Heisenberg onzekerheidsrelatie.

Vraagstukken

Aanwijzingen voor het oplossen van vraagstukken..

Nothing beats thinking!

Voor het oplossen van natuurkundige vraagstukken bestaan geen vaste voorschriften. Toch is het verstandig een aantal regels te volgen:

Bezint eer gij begint:

Lees de vraagstelling zorgvuldig door. Probeer de natuurkunde van het probleem te begrijpen voordat je *Mathematica* erop los laat. Geef aan welke variabelen in het probleem gegeven zijn en welke gevraagd worden.

Probleemstelling:

Begin een uitwerking met een omschrijving van de probleemstelling in je eigen woorden en geef aan welke variabelen in het probleem gegeven zijn en welke gevraagd worden.

Teken figuur:

Teken voor jezelf een diagram om het probleem te verduidelijken.

Veronderstellingen:

Ga na wat de veronderstellingen zijn; wees niet bang zelf een veronderstelling te formuleren. Het is vaak mogelijk om een eerste schatting van de numerieke uitkomst te geven door vereenvoudigende veronderstellingen te maken.

Geef uitleg:

Geef in de uitwerking van een vraagstuk bij iedere stap steeds uitleg over wat je aan het doen bent en waarom. Je werk wordt daarop beoordeeld.

Dimensies:

Werk zoveel mogelijk met algebraïsche formules, met de numerieke constanten aangegeven door een symbool (h voor de constante van Planck, c voor de lichtsnelheid etc.). Dit heeft het voordeel dat de dimensies van de tussen-resultaten en het antwoord gecontroleerd kunnen worden.

Onderwerp alle belangrijke uitdrukkingen aan deze controle. Laat dit zien in de uitwerking.

Gebruik wat je weet:

Bekijk alle uitkomsten kritisch en vergelijk eventueel met een ander resultaat dat bekend is. Lijkt het antwoord plausibel? Schrijf je conclusie op.

Tenslotte, hou het ordelijk!

Bedenk dat je niet schrijft voor jezelf maar voor iemand anders.

1. Foto-elektrisch effect [4 pu]

Een cesiumkathode wordt bestraald met licht, waarbij de frekwentie wordt gevarieerd. Als gevolg hiervan treden er elektronen uit het metaaloppervlak, die op een evenwijdig daaraan geplaatste anode opgevangen kunnen worden.

- 1.1 Bereken het aantal fotonen dat per tijdseenheid op een eenheid van oppervlak valt, wanneer de intensiteit van het licht $I = 2.0 \text{ W m}^{-2}$ is en de frekwentie $f_0 = 6.00 \times 10^{14} \text{ Hz}$ bedraagt.

Antwoord

- 1.2 Bij het uittreden van een elektron geldt: $hf = W + E_k$. Leg uit wat deze vergelijking betekent.
Waarom bestaat er een grensfrekwentie f_{grens} ?

Antwoord

- 1.3 De uitgetreden elektronen kan men afremmen door tussen de elektroden een tegenspanning aan te leggen. Is deze gelijk aan de zogenaamde rempotential V_{rem} , dan kunnen de elektronen de anode juist niet meer bereiken. Laat zien dat geldt:

$$V_{\text{rem}} = \frac{h(f - f_{\text{grens}})}{e}$$

Antwoord

- 1.4 Voor een aantal frekwenties van opvallend licht meet men de rempotential en vindt daarbij de volgende resultaten.

f	(10^{14} Hz)	5.33	5.50	6.09	6.88	7.41	8.19
V_{rem}	(Volt)	0.24	0.36	0.60	0.93	1.15	1.48

Zet de meetwaarden uit in een grafiek en bepaal hieruit de grensfrekwentie, de grensgolflengte en de uittreearbeid.

Antwoord

- 1.5 Bepaal uit de grafiek $\frac{h}{e}$ en vergelijk met de literatuurwaarde.

Antwoord

- 1.6 Bepaal de snelheid die een elektron na interactie met een foton kan meekrijgen, als het opvallende licht de frekwentie $f_0 = 6.00 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ heeft.

Antwoord

2. Roodverschuiving [6 pu]

Tengevolge van gravitatie-effecten zal het licht dat door een ster wordt uitgezonden een verschuiving in de golflengte te zien geven (roodverschuiving). Deze verschuiving kunnen we berekenen. We weten dat de gravitatie-potentiaal voor een massa m op een afstand r tot het centrum van een ster met massa M gegeven wordt door:

$$V = - \frac{G m M}{r}$$

waarbij G de gravitatie-constante voorstelt:

$$G = 6.67 \cdot 10^{-11} \text{ N m}^{-2} \text{ kg}^{-2}$$

- 2.1 Het foton is weliswaar massaloos, maar volgens Einstein voelt een foton toch het zwaartekrachtsveld. Kun je daarvoor een reden geven? Beredeneer welke uitdrukking voor m we moeten nemen in het geval van het foton.

Antwoord

- 2.2 Wat is de totale energie van een foton met frequentie f op een afstand r van de ster?

Antwoord

- 2.3 Bekijk nu het geval van een foton dat met frequentie f wordt uitgezonden van het oppervlak van de ster. Hoe groot zal deze frequentie zijn als dit foton zeer ver weg van de ster is gekomen? Noem deze frequentie f_1 en geef een uitdrukking voor

$$\frac{\Delta f}{f} = \frac{f - f_1}{f}$$

Antwoord

- 2.4 Bereken de roodverschuiving voor een emissielijn in het geel, afkomstig van de zon, met een golflengte van 500 nm met de gegevens:

$$M_{\text{zon}} = 1.99 \cdot 10^{30} \text{ kg}$$

$$R_{\text{zon}} = 6.96 \cdot 10^8 \text{ m}$$

Antwoord

Helaas is dit niet meetbaar omdat deze roodverschuiving ten onder gaat in de Dopplerverbreiding die uit de omwentelingssnelheid van de zon berekend kan worden.

- 2.5 Bereken de roodverschuiving voor het geval dat de zon, aan het eind van zijn bestaan, ineens geschrompelt is tot een witte dwerg met een straal van $9 \cdot 10^6 \text{ m}$.

Antwoord

- 2.6 Kun je nu ook een criterium geven voor het verschijnen van een zwart gat ?

Antwoord

3. Omvang van het waterstof atoom [6 pu]

We weten dat het waterstofatoom bestaat uit een kern met daarom heen een electron wolk. Het electron is negatief geladen en de kern positief. Tengevolge hiervan trekken deze deeltjes elkaar aan met een Coulombkracht

$$F = - \frac{q^2}{r^2}$$

met

$$q^2 = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0}$$

We weten dat het waterstofatoom bestaat uit een kern met daarom heen een electron wolk. Het electron is negatief geladen en de kern positief. Tengevolge hiervan trekken deze deeltjes elkaar aan met een Coulombkracht

Hier is e de lading van het electron en ϵ_0 de dielectrische constante van het vacuum.

De vraag is nu: de kern heeft een afmeting van ongeveer 10^{-15} m . Dit is zeer veel kleiner dan de afmeting van het waterstofatoom met radius $R = 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Waarom is dit zo?

- 3.1 Verzin eerst een eigen verklaring.

Antwoord

- 3.2 Welke quantummechanische lengteschaal is karakteristiek voor atomaire systemen?

Antwoord

We gaan nu deze lengteschaal bepalen, uitgaande van de Heisenberg onzekerheidsrelatie en de veronderstelling dat voor de optimale grootte de energie van het waterstofatoom minimaal is.

- 3.3 Neem $r=\Delta x$ als variable, en bereken uit de Heisenbergrelatie de spreiding in de impuls en de bijbehorende kinetische energie.

Antwoord

- 3.4 Bereken nu ook de potentieële energie tengevolge van de Coulomb kracht die hierboven gegeven is. Maak een grafiek van de totale energie en geef een kwalitatieve beschrijving.

Antwoord

- 3.5 Bepaal het minimum van de gevonden uitdrukking en daaruit de straal r waarvoor de energie minimaal is.
Had je dit antwoord ook al bij voorbaat kunnen raden?

Antwoord

- 3.6 Controleer dat het antwoord de goede dimensie heeft en bereken de numerieke waarde.

Antwoord

4. Comptoneffect [8 pu]

In experimenten met Röntgen stralen door materie vond Compton dat een deel van de straling werd geëmitteerd met een grotere golflengte. Zijn verklaring in 1923 was gebaseerd op de veronderstelling dat een foton een deeltje is dat beweegt met de lichtsnelheid c , en een energie en impuls draagt die voldoen aan de relaties

$$\bullet \epsilon = h f \text{ en } p = \frac{h}{\lambda}, \text{ dus } \epsilon = c p$$

Stel nu dat een foton een elektron treft dat aanvankelijk in rust is. Dan treedt een 2-dimensionaal elastisch botsingsproces op (zie figuur 3).

Het foton arriveert met impuls p_1 in de richting van de x -as en vertrekt met impuls p_2 in een richting α . Het elektron vertrekt na de botsing met een impuls P in de richting β . Dit leidt tot de volgende tabel:

	voor botsing		na botsing	
	foton	elektron	foton	elektron
<i>impuls:</i>				
grootte	p_1	0	p_2	P
hoek	0	-	α	β
<i>energie</i>	$\epsilon_1 = p_1 c$	$E_0 = m_e c^2$	$\epsilon_2 = p_2 c$	$E = \sqrt{m_{ec}^2 c^4 + P^2 c^2}$

We gebruiken hier de relativistische formule voor de energie van een electron omdat voor hoge foton energie het electron een grote kinetische energie kan krijgen.

Bij de botsing zijn h , c en m_e theoretische gegevens, en p_1 en de verstrooiingshoek α tussen de twee richtingen van het foton experimentele gegevens. We willen nu de energie ϵ van het verstrooide foton berekenen, en daarmee de golflengte.

- 4.1 Schrijf de vergelijkingen voor impulsbehoud uit en bepaal hieruit de betrekking

$$P^2 = p_1^2 + p_2^2 - 2 p_1 p_2 \cos[\alpha] \quad (1)$$

Hint: doe dit met de hand door de vergelijkingen naar $(\cos \beta) P$ en $(\sin \beta) P$ op te lossen en het kwadraat van deze uitdrukkingen op te tellen.

Antwoord

- 4.2 Schrijf nu ook de vergelijking voor energiebehoud op en elimineer de impuls P van het electron m.b.v (1).

Antwoord

- 4.3 Ga na dat het verkregen resultaat in overeenstemming is met de in de theorie gegeven empirische formule voor het Comptoneffect.
Wat is dus de uitdrukking voor de Comptongolflengte λ_C van het elektron? Wat is de numerieke waarde?

Antwoord

- 4.4 Zet de het verschil $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$ uit tegen de verstrooiingshoek.
Wanneer is het effect maximaal?

Antwoord

Het effect is het best waarneembaar als de golflengte van de invallende straling vergelijkbaar is met λ_C , dus voor harde Röntgen- of gamma-straling.

- 4.5 Bij welke golflengte van de invallende gamma-straling neem je waar dat de gamma straling die onder een hoek van 90 graden wordt verstrooid een golflengte verschuiving te zien geeft van een factor twee ?

Antwoord

- 4.6 Hoeveel energie (in eV) wordt overgedragen op het elektron en wat is de maximale energie die kan worden overgedragen op het elektron bij deze golflengte ?

Antwoord

Natuurconstanten

lading van het electron	$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
rustmassa van het electron	$m_e = 9.110 \times 10^{-31} \text{ kg}$
rustmassa van het proton	$m_p = 1.672 \times 10^{-27} \text{ kg}$
rustmassa van het neutron	$m_n = 1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$
dielectrische constante vacuum	$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 / (\text{N m}^2)$
constante van Planck	$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J s}$
lichtsnelheid	$c = 2.998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
constante van Boltzmann	$k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
getal van Avogadro	$N_A = 6.02252 \times 10^{23}$
gasconstante ($R = N_A k_B$)	$R = 8.317 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

Literatuur

- [H] A. Hobson, Physics, *Concepts and Connections*, Prentice Hall, 1995. Ch 13, 14
 [YF] H.D.Young and R.A. Freedman, *University Physics*, Addison-Wesley 1996, Ch 40, 41
 [AF] M. Alonso and E.J. Finn, *Physics*, Addison-Wesley, 1992, Ch 36