Inleiding tot de kwantummechanica

Kees Koomen
V6B

1. Klassieke Mechanica

- Mechanica: Studie van plaats, snelheid, kracht en energie

- Een voorwerp waarop geen resulterende kracht werkt, is in rust of beweegt zich rechtlijnig met constante snelheid voort.

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a}$$

- De verandering van de beweging is recht evenredig met de resulterende kracht en volgt de rechte lijn waarin de kracht werkt.

$$\vec{p} = m \cdot \vec{v}$$

- Een kracht komt nooit in z'n eentje, maar is altijd de helft van een tweeling. Actie en reactie zijn even groot, maar tegengesteld van richting.

$$F_{actie} = -F_{reactie}$$

2. Elektromagnetisme

- Elektromagnetisme behandelt de verschijnselen die ontstaan bij wisselwerking tussen elektrische stromen en magnetische velden

$$\oiint \vec{E} \cdot d\vec{A} = \frac{Q}{\epsilon_0}$$

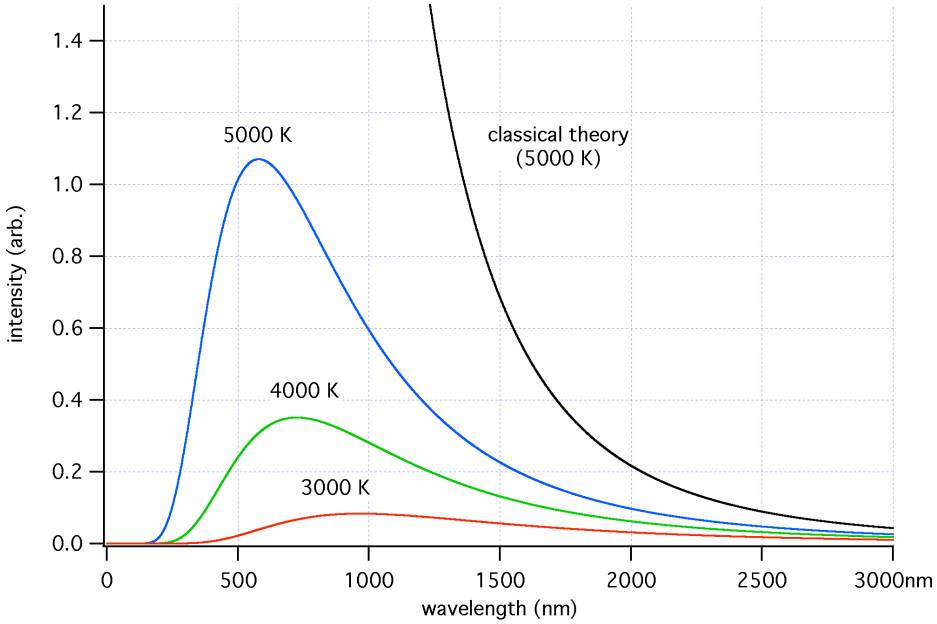
$$\oiint \vec{B} \cdot d\vec{A} = 0$$

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 I + \mu_0 \epsilon_0 \frac{d\Phi_E}{dt}$$

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\frac{d\Phi_B}{dt}$$

3. "Oude" kwantumtheorie

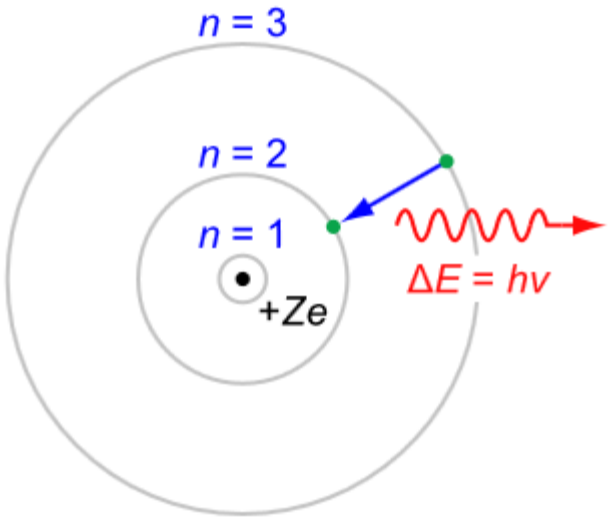
- Kwantisatie van energie en deeltje- golfdualiteit



$$E = h \cdot f$$

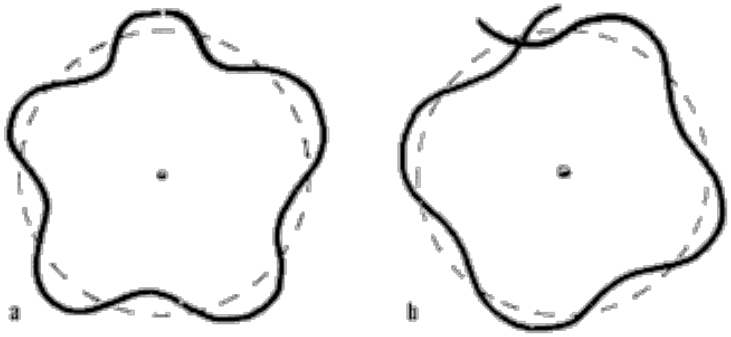
4. Het atoom

- Elektronen bevinden zich in zogeheten “orbitalen”. Verspringen van orbitaal is mogelijk door emissie of absorptie van een foton.



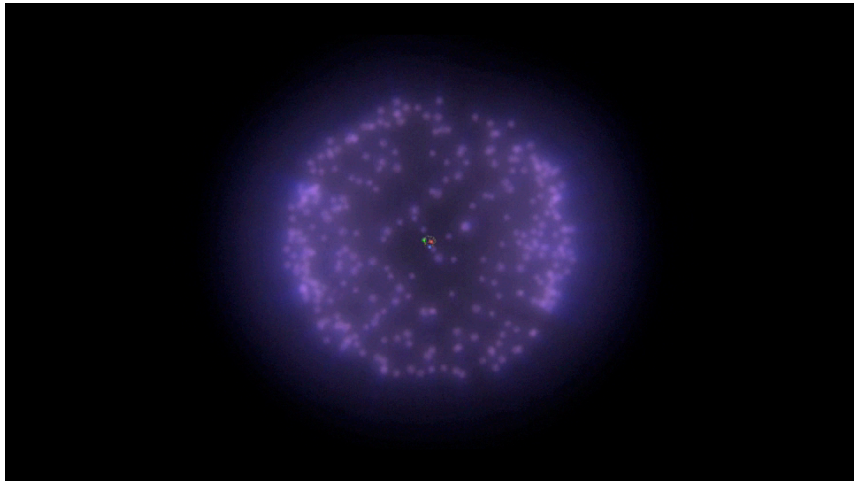
5. Materiegolven

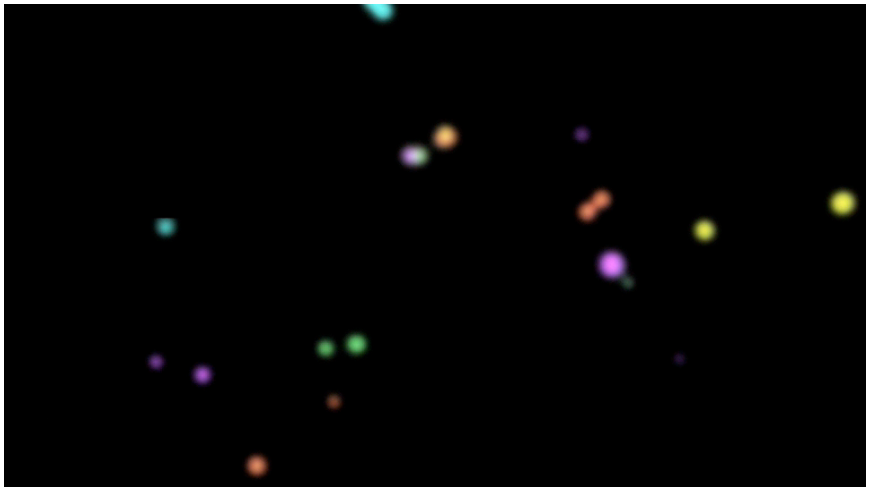
- Alle materie heeft karakteristieke eigenschappen van een golf waarvan de golflengte afhangt van de massa en de snelheid van het deeltje.

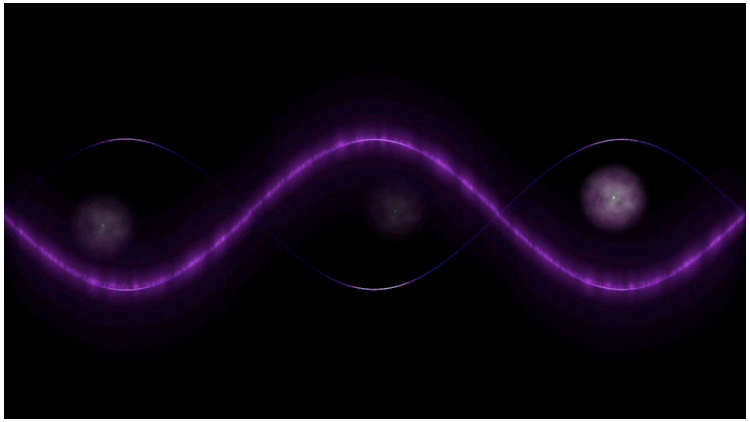


$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

6. Kan het nog gekker?







7. De Schrödingervergelijking

- De vergelijking voor het beschrijven van het gedrag van kwanta. De de heilige graal van de kwantummechanica.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi$$

$$=$$

$$E_{totaal} = E_{kinetisch} + E_{potentieel}$$

8. Het waterstofatoom

- Schrödingervergelijing omzetten naar bolcoördinaten

$$-\frac{\hbar}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2(\sin\theta)^2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x}\right)\right]-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi=E\psi$$

- Algebraisch oplossen voor ψ geeft

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+1)!}\left(\frac{2}{na}\right)^3}e^{-\frac{r}{na}}\left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)\sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}e^{im\phi}P_l^m(\cos\theta)$$

waar

$$P_l^m(x)=\left(1-x^2\right)^{\frac{|m|}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^m\left(\frac{1}{2^l l!}\right)\left(\frac{d}{dx}\right)^l\left(x^2-1\right)^l$$

$$L_{q-p}^p(x)\equiv(-1)^p\left(\frac{d}{dx}\right)^p e^x\left(\frac{d}{dx}\right)^q\left(e^{-x}x^q\right)$$

9. Uitvoering

- Wolfram Mathematica 8

```
Hydrogen[n_,l_,m_]:=
Sqrt[2^3/(n*a)^3] *
Sqrt[(n-l-1)!/(2*n*((n+1)!^3)] *
Exp[-r/(n*a)]*((2*r)/(n*a))^l *
LaguerreL[n-l-1, 2*l+1, (2*r)/(n*a)] *
SphericalHarmonicY[l,m,\[Theta], \[Phi]]
//FullSimplify
```

- `Hydrogen[1,0,0]` geeft `Ψ100 = Sqrt(1/a^3) * Exp(-r/a) / Sqrt(π)`
- $P_{\Psi nlm} = (\Psi_{nlm})^2 * 4\pi r^2$
- Transformatie van bolcoördinaten naar Cartesische coördinatenstelsel d.m.v. de volgende substitutie

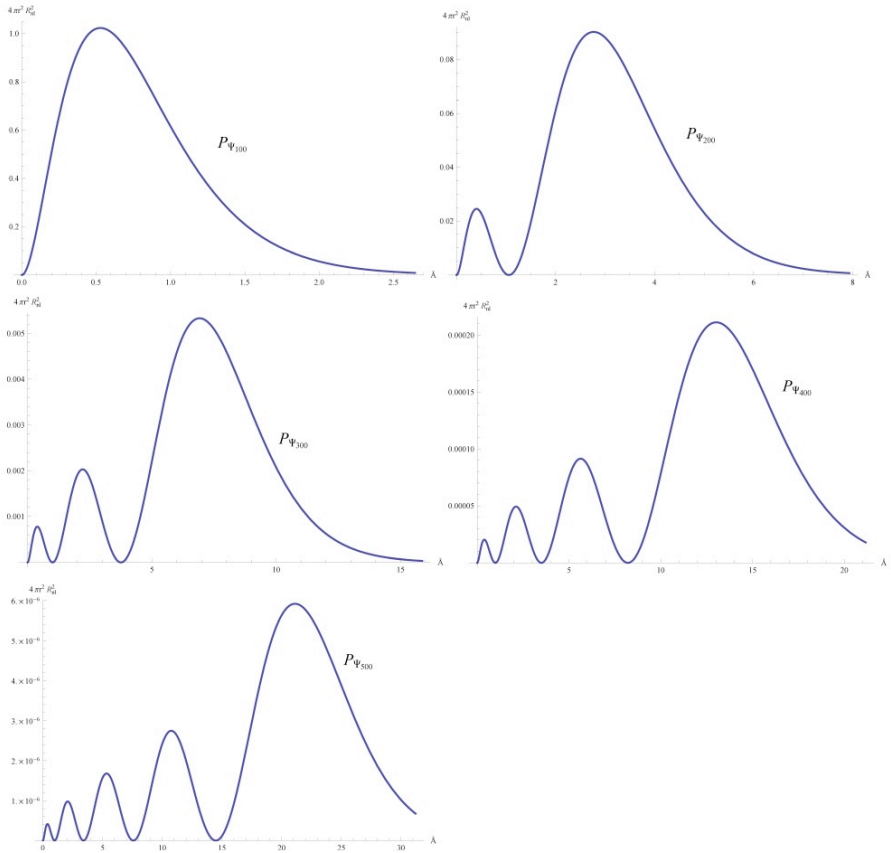
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \qquad \theta = \cos^{-1}\frac{z}{r} \qquad \phi = \tan^{-1}\frac{y}{x}$$

- Bohr radius gelijkstellen aan '1' en plotten

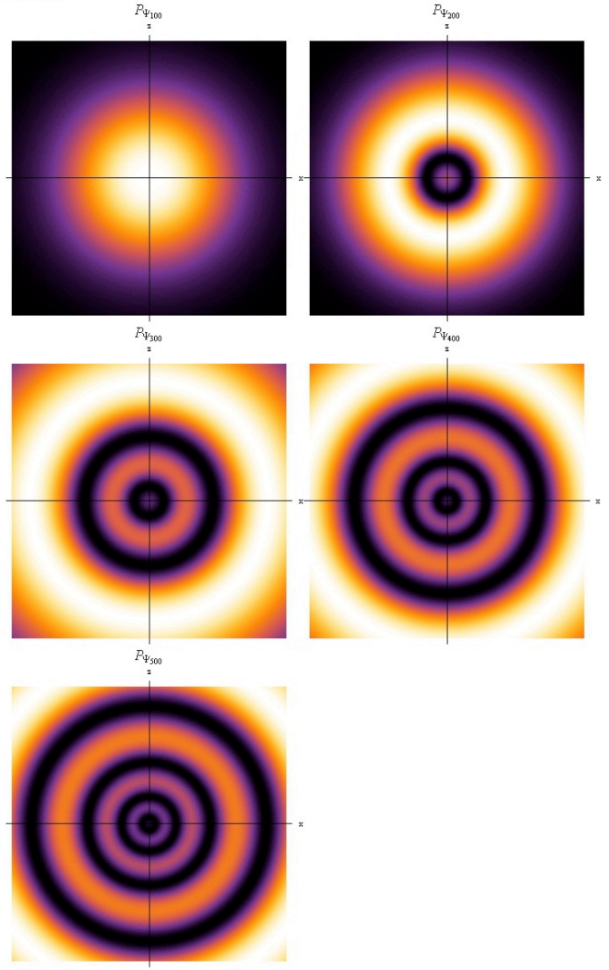
10. Waterstof golffunctie

$$\Psi_{nlm} = \Psi_{n00}$$

Figuur 12:



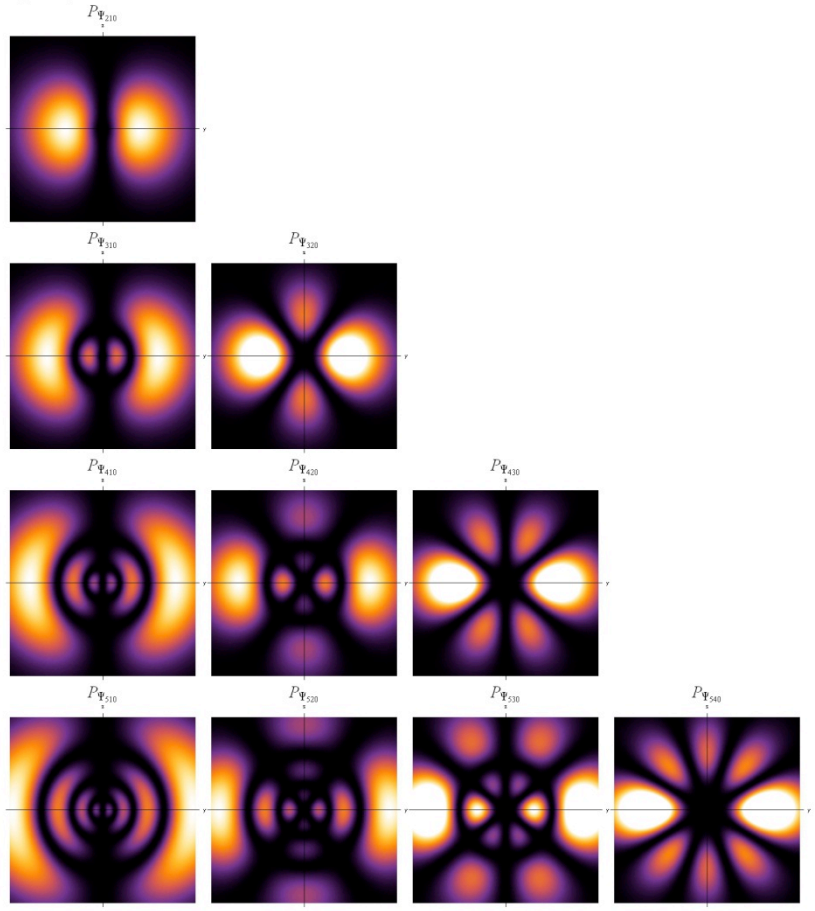
Figuur 13:



11. Waterstof golffunctie

$$\Psi_{nlm} = \Psi_{nl0}$$

Figuur 14:



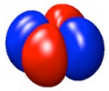
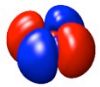
12. Waterstof golffunctie

$$\Psi_{nlm} = \Psi_{nlm}$$

	$s\ (l=0)$	$p\ (l=1)$		
	$m=0$	$m=0$	$m=\pm1$	
	s	p_z	p_x	p_y
$n=1$				
$n=2$				
$n=3$				
$n=4$				
$n=5$				

12. Waterstof golffunctie

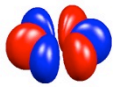
$$\Psi_{nlm} = \Psi_{nlm}$$

	$p\ (l = 2)$				
	$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$	
	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$
$n = 1$					
$n = 2$					
$n = 3$					
$n = 4$					
$n = 5$					

Tabel 2:

12. Waterstof golffunctie

$$\Psi_{nlm} = \Psi_{nlm}$$

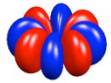
	$f\ (l=3)$						
	$m=0$	$m=\pm1$		$m=\pm2$		$m=\pm3$	
	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_{z(x^2-y^2)}$	$f_{x(x^2-3y^2)}$	$f_{y(3x^2-y^2)}$
$n=1$							
$n=2$							
$n=3$							
$n=4$							
$n=5$							

Tabel 3:

12. Waterstof golffunctie

$$\Psi_{nlm} = \Psi_{nlm}$$

	$g\ (l = 4)$				
	$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$	
$n = 1$					
$n = 2$					
$n = 3$					
$n = 4$					
$n = 5$					

	$g\ (l = 4)$			
	$m = \pm 3$		$m = \pm 4$	
$n = 1$				
$n = 2$				
$n = 3$				
$n = 4$				
$n = 5$				

The End