

**Kvanteteori
for gymnasiet**

1. LÆRERVEJLEDNING

PROJEKTRAPPORT AF:

Birger Lundgren

Henning Sten Hansen

John Johansson

Vejleder:

Torsten Meyer

TEKSTER fra

IMFUFA

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER

**INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES
FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER**

KVANTETEORI FOR GYMNASIET
1. lærervejledning

IMFUFA tekst nr. 91/85

35 sider

ISSN 0106-6242

Abstract:

Projektet er et undervisningsmateriale for gymnasiet, der introdukserer elementær kvanteteori.

Det er tænkt anvendt i fysikundervisningens valgfrie emner, og kan benyttes i sin helhed eller i uddrag.

Projektet indeholder 2 dele:

1. Lærervejledning:
2. Elevmateriale.

Lærervejledningen indeholder en begrundelse og beskrivelse af materialet, samt beskrivelse af de EDB-programmer, der medfølger materialet.

Elevmaterialet udgøres af kvanteteorien, der er fremstillet i et historisk perspektiv, herunder de fundamentale erkendelsesteoretiske problemer - primært fremstillet i 2 artikler af Niels Bohr.

Som appendix til dette materiale er vedlagt øvelsesvejledninger for henholdsvis EDB-øvelser og undervisningsforsøg.

Indholdsfortegnelse, lærervejledning.

1. Indledning.	side 1
1.1 Didaktikken i den eksisterende gymnasiefysik.	2
1.2 Oplæg til en alternativ didaktik.	4
2. Dette materiales indplacering i gymnasiefysikken,	6
2.1 Beskrivelse af materialet.	7
2.1.1 Formidling af matematik.	9
2.1.2 Computerprogrammer.	10
2.1.3 Undervisningsforsøg.	11
2.2 Lidt om materialets anvendelsesmuligheder.	12
3. EDB-programmer.	15
3.1 Super-programmet	15
3.2 Spalte-programmet	17
3.3 Brønd-programmet	20
3.4 Orbital-programmet	24
Litteraturliste	27

1. Indledning.

De senere års fagdidaktiske diskussioner har været præget af, at fysikundervisningen i gymnasiet er inde i en alvorlig krise - en krise, der har bidraget kollosalt til nedprioritering af faget udfra erfaringen "hvad kan vi overhovedet bruge det til?" Dette set i sammenhæng med, at faget sjældent indeholder samfundsmæssig perspektivering, hverken i forskningsmæssige, teknologiske, sociologiske eller historiske sammenhænge, og ikke mindst erkendelses- og videnskabsteoretisk.

Nogle vil måske mene, at fysikundervisningen ikke er andet end en mislykket indføring i isolerede begreber, der danner forståelse for den elementære fysik - og dette med god grund, for mange undersøgelser har med al tydelighed vist, at selv dette er slået fejl i fysikundervisningen (ref. 36 og 38).

Det medfølgende materiale skal derfor, ved at udgøre et eksempel, danne rammen for introduktion af en desværre ofte overset teoribygning i gymnasiefysikken - en teoribygning, der danner grundlaget for

- a) den moderne fysik,
- b) den teknologiske udvikling, som samfundet står i idag
- c) en af de største erkendelsesteoretiske diskussioner i fysikken.

Teoribygningen er selvsagt kvantemekanikken, som vi mener, nødvendigvis må inddrages i gymnasiefysikken, hvis faget skal overleve.

1.1 Didaktikken i den eksisterende gymnasiefysik.

Først må man gøre sig gymnasiets dobbelte funktion klart - dels den studieforberegende og dels den almindannende.

Tidligere har især gymnasiets studieforberegende funktion været dominerende, men med den store tilgang til gymnasiet, og de samtidig ændrede kvalifikationskrav i samfundet, er der sket en inddirekte drejning mod krav om mere almindannende gymnasieundervisning.

Dette sætter direkte krav til vedkommende og samfundsrelaterende fagligt indhold i undervisningen, hvilket igen betyder en nedbrydning af undervisningens strengt faglige struktur. Herigennem med det mål at nå en perspektivering af faget og en integrering af fagene - et mål, der dog endnu ligger overladt til fremtiden, men hvor erkendelsen af denne uddannelsessystemets elendighed har skabt grobund og interesse i at løse disse problemer.

I faget fysik ytrer målene sig i bekendtgørelsen for fysik. Heri fremgår formålet med fysikundervisningen "at give eleven en sikker forståelse af centrale områder af den klassiske og moderne fysik" samt "at give eleven en orientering i andre dele af fysikkens arbejdsområder".

Endvidere er det nævnt, at undervisningen skal sigte mod

- 1."at give eleven et grundlag, som eleven kan arbejde videre på inden for alle de områder, hvor den naturvidenskabelige arbejdsmetode anvendes",
- 2."at give eleven indsigt i den naturvidenskabelige tænkning og derigennem give en kritisk holdning til de fysiske problemer".

I formålsformuleringen for faget fysik fremstår derfor naturvidenskabelig arbejdsmetode, -tænkning og kritisk holdning som essentielle for områderne af den klassiske og moderne fysik.

Vender man sig derimod mod undervisningsvejledningen i faget fysik, ser man af emnelisten, at den klassiske fysik indtager langt den største plads, mens den moderne fysik, f.eks. ifølge bemærkningerne til emnelistens pkt.7 - atomfysik, kun antager et perifert og uforholdsmæssigt lille indhold - helt utilstrækkeligt i relation til gymnasiefysikkens formålsformulering - og som er et forhold, der kun kan opvejes gennem individuel indplacering i det valgfrie stof.

Samtidig afspejler emnelisten en klar tendens til, at fysikundervisningen skal lægge hovedvægten på det studieforberedende, hvor den almindelige funktion er svar at få øje på.

Det vil sige, at undervisningsvejledningen, der som bekendt er udslagsgivende for det eksisterende undervisningsindhold, for faget fysik står i håbløs modsætning til ikke alene gymnasieloven, men også samfundets kvalifikationskrav til gymnasiefysikken.

1.2 Oplæg til en alternativ didaktik.

Sammenfattende af foranstående, mener vi, at undervisningen i fysik nødvendigvis må tillempes et andet indhold, der i højere grad tilgodeser fagets almindannende funktion, men samtidig bibeholder et nødvendigt indhold af studieforberevende naturvidenskab.

I dette forsøg må der derfor stilles krav til at undervisningen perspektiveres især på det sociologiske og erkendelsesteoretiske område, og herunder lade de eksemplariske princip imødekomme stoftrængslen.

I Højgaard Jensen & Kjørup's bog "Om fysik" (ref. xx, p. 136) er der opstillet en alternativ emneliste for faget fysik, der tilgodeser netop disse krav.

<p><i>1. Natur:</i> Universets opbygning fra elementarpartikler til galakser. Makroskopisk og mikroskopisk naturbeskrivelse. Naturlove. Fysik i hverdagen. Fysik i produktionen.</p>	<p><i>3. Naturvidenskab – teknologi – samfund:</i> Fysik og religion, tro og viden. Menigmand og eksperterne. Fysik og teknisk-økonomiske fremskridt. Fysik og uddannelse, specialisering og arbejdsdeling. Fremtiden og muligheder for at påvirke den.</p>
<p><i>2. Eksakt naturvidenskab:</i> Modeller og modeltyper. Bogstavregningens betydning. Eksperimenters betydning. Forholdet mellem teori og praksis, fysik og teknik. Kontrol og troværdighed af teorier og modeller.</p>	

Emnerne skal belyses gennem fordybende elevarbejde med udvalgte eksempler, historiske og aktuelle.

fig. 1.1

Om denne emneliste eksakt udgør et ideelt alternativ, skal være usagt, men den indeholder generelt set, hvad der er nødvendigt for en progressiv didaktik i den al-

mene del af faget fysik.

Emnelistens 3 hovedafsnit:

1. Natur.

2. Eksakt naturvidenskab.

3. Naturvidenskab, teknologi og samfund.

er af så fundamental nødvendighed, at de ikke kan undgå at få en central placering, når læseplanerne bliver revideret.

Indtil da må undervisningen præges i den rigtige retning ved anvendt metodefrihed i undervisningen og specielt igennem fagets valgfrie emner.

Imidlertid er dette ofte forbundet med store vanskeligheder, idet det eksisterende materiale udbud er tilpasset den traditionelle og gældende emneliste, hvorfor den enkelte fysiklærer ofte er nødsaget til at udarbejde egne materialer, hvis han ønsker at perspektivere emner i faget. Dette er forbundet med en unødigt stor ekstra indsats, og bliver forståeligt nok forsømt af de fleste fysiklærere.

2. Dette materiales indplacering i gymnasiefysikken.

Med disse overvejelser har vi udarbejdet materialet "kvanteteori for gymnasiet", der i sin helhed introducerer kvanteteorien i naturvidenskabelig, historisk og erkendelsesteoretisk sammenhæng.

Netop kvanteteorien, der er intimt forbundet med den moderne fysiks arbejdsmetode og tænkning, danner et udmærket eksempel for ånden i gymnasieloven. Samtidig udgør teoribygnings eksterne aspekter et vigtigt element i forståelsen af samfundets teknologiske og erkendelsesteoretiske strukturer.

Vi har således søgt at skabe et produkt, der dels opfylder de gældende institutionsmål, og dels tilgodeser udvalgte eksempler i en mere almenorienteret undervisning.

Materialet er tænkt anvendt i gymnasiets fysikundervisning, og som generelle forudsætninger i fysik kræver gennemført mekanik 1 og 2, bølgelære og evt. atomfysik. De matematiske forudsætninger kræver især punkterne elementære funktioner (6), infinitesimalregning (7) og anvendelser af infinitesimalregningen (8), jfr. gymnasiebekendtgørelsens §18-matematik, gennemført.

Dette betyder, at materialet er rettet til den senere del i gymnasieforløbet, specielt 3.g'ere, samt det, som følge af gældende undervisningsvejledning, primært må anvendes i fagets valgfrie emner.

2.1 Beskrivelse af materialet.

Indholdet i materialet består af 6 hovedkapitler:

- Kap.1. De historiske forudsætninger for Bohr-atomet.
- Kap.2. Bohr-Sommerfeld's kvanteteori.
- Kap.3. Mod en konsistent kvanteteori.
- Kap.4. Kvantemekanikkens afrunding.
- Kap.5. Anvendt kvantemekanik.
- Kap.6. Erkendelsesteoretiske problemer i kvantemekanikken.

Ad 1. Heri redegøres for fysikkens situation før århundredeskiftet, især for spektralfysikken og Planck's opdagelse af virkningskvantet. Dette fører til de indledende skridt mod en gamle kvanteteori, hvor især Einsteins arbejde med den fotoelektriske effekt og Rutherford's atommodel behandles.

Ad 2. Dette kapitel indeholder Bohr-Sommerfeld atomteorien, hvor især fremstilles de 4 kvantetal, Pauliprincippet og spin, atomernes elektronkonfiguration samt korrespondensprincippet.

Ad 3. De Broglie's ideer og Schrødingerteorien er fundamentet i dette kapitel. Heri præsenteres stofbølger og bølgepakker. Der introdukseres kompleks, eksponentielle bølgefunktioner og operatorer for energi og impuls, og med dette udledes Schrødingertiligningen.

Ad 4. Herunder præsenteres sandsynlighedsfortolkningen og ubestemthedsrelationerne. Endvidere gives middelværdier og spredning af en fysisk størrelse ved operatoranvendelse, og dette fører til Ehrenfest's sætning, der korresponderer den klassiske mekaniks bevægelsesligninger.

Ad 5. Anvendelsen af kvantemekanikken er begrænset til stationære tilstande. I et eksempel behandles den 1 dimensionale potentialbrønd med uendelig høje vægge, og af dette sluttes nogle kvantemekaniske resultater om dobbeltbrønden og Kronig-Penney modellen. I det andet eksempel behandles brintatomet, der som det simpleste fysiske system i naturen, udgjorde testen for Schrödinger-teoriens rigtighed.

Behandlingen er selvsagt i 3 dimensioner, og der introdukeres polære koordinater, hvilket fører til energiens og impulsmomentets kvantisering i overensstemmelse med Bohr-Sommerfeld atomteorien.

Sluttelig gives radialbølge- og kuglefunktioner til bestemmelse af elektronfordelingen i brintatoms stationære tilstande.

Ad 6. I dette kapitel rejses de fundamentale erkendelsesteoretiske problemer, der fulgte med kvantemekanikkens afrunding. Heri fremstilles komplementaritetsprincippet og Bohr-Einstein diskussionen, især ved 2 artikler af Bohr.

Materialet er søgt fremstillet i en historisk sammenhæng med formålet dels at give et indblik i, hvordan kvantemekanikken blev til, udfra dens betydning for moderne fysisk grundforskning og samfundets teknostrukturer, og dels at give et indblik i de fysiske miljøer og dermed den kaotiske situation, der igennem 30 års revolution skabte et nyt verdensbillede.

Heri udgør den erkendelsesteoretiske diskussion et centralt element, og dette skaber samtidig modsætning til de klassiske forestillinger, der traditionelt er dominerende ikke alene i faget fysik, men i alle gymnasiets fag.

Som en sidebemærkning kan det også nævnes, at i 1985 ville Bohr være fyldt 100 år, og materialet giver derfor også af den grund anledning til at markere denne historiske periode, som Bohr var en vigtig del af.

2.1.1 Formidling af matematik.

Hensynet til formidling er bl.a. tilgodeset ved anvendelse af "ståltrådsmatematik". I erkendelsen af den relativt svære matematiske formalisme, som kvantemekanikken bygger på, har vi skønnet det hensigtsmæssigt at postulere forskellige matematiske redskaber, herunder især den komplekse, eksponentielle bølgefunktion, operatorer for energi og impuls, middelværdi og spredning af en fysisk størrelse, samt radialbølge- og kuglefunktioner.

Det har vi gjort, fordi en regulær indføring i disse ting er forbundet med overordentlig store vanskeligheder - ikke mindst tidsmæssige - og fordi de alle udgør et sæt af redskaber, der kun kræver en forståelse for deres anvendelsesfunktioner, for at tilvejebringe kvantemekaniske resultater.

Materialet er således opbygget, at det ydermere giver nogle metodiske færdigheder i løsning af et begrænset antal kvantemekaniske problemer.

2.1.2 Computerprogrammer.

Som en formidlingsmæssig støtte til undervisningen har vi udarbejdet et sæt af 4 computerprogrammer, der alle har til formål at anskueliggøre og underbygge forståelsen af centrale kvantemekaniske effekter.

Det drejer sig her om følgende programmer:

1. Dobbeltspalteeksperimentet
(klassiske partikler og bølger, samt elektroner).
2. Superposition af bølger
(bølgepakkens udstrækning og impulsfordeling).
3. Potentialbrønden
(energispakter og bølgefunktioner for enkelt- og dobbeltbrønden).
4. Elektronorbitaler for brintatomet
(elektronfordelingen med kvantetal (n, l, m)).

1. og 4. er tænkt anvendt som demonstration, mens 2. og 3. udmærker sig til elevøvelse. Iøvrigt henvises til beskrivelse af computerprogrammerne og tilhørende øvelsesvejledninger i henholdsvis lærervejledningens kap. 3 og i øvelsesvejledningerne, appendix 1.

Det skal også bemærkes, at der efter de nye retningslinier for datalære i gymnasiet, efter 30 timers introduktionskursus i 1.g, skal integreres i 2.g og 3.g i de enkelte fag. Vi har derfor også af den grund set det som en nødvendig udfordring at inddrage dette som led i undervisningsmaterialet.

2.1.3 Undervisningsforsøg.

Tilsvarende har vi også udarbejdet et sæt af 3 undervisningsforsøg:

1. Planck's konstant.

2. Elektronens bølgelængde.

3. Planck's konstant, bestemt ved sortlegemestråling.

hvilket er beskrevet i øvelsesvejledningerne, *appendix 2*.

Disse er alle beregnet som elevøvelser, og de udgør et værdifuldt supplement til undervisningen.

2.2 Lidt om materialets anvendelsesmuligheder.

I sin helhed vil materialet kræve mindst 30 undervisningstimer, og hertil kommer så elevøvelser med forsøg og computer.

Timefordelingen på de enkelte kapitler vil således kunne se ud som følgende:

Kap. 1 , p. 1-19	3 timer
Kap. 2 , p. 20-43	4 timer
Kap. 3 , p. 44-76	6 timer
Kap. 4 , p. 77-96	4 timer
Kap. 5 , p. 97-138	9 timer
Kap. 6 , p. 139-212	<u>4 timer</u>
ialt	30 timer

Eftersom store dele af kap. 1 og 2 i forevejen er obligatorisk pensum, nærmer man sig omfanget på de 20 timer for de gældende valgfrie emner. Kombineres dette med elevøvelserne i undervisningsforsøgene og computersimuleringerne, så er disse's utraditionelle karakter velegnet til at udgøre det eksperimentelle 10 timers valgfrie emne.

Materialet egner sig imidlertid også til anvendelse i mindre selvstændige dele, der evt. udgør fundamentet for andre interesseområder, eksempelvis dele af faststoffysikken eller erkendelsesteorien.

I det følgende vil vi derfor give nogle overordnede kommentarer til forskellige, men langt fra udtømmende, forslag til sådanne delvise anvendelser.

A) Er atomfysikken i forevejen gennemgået, kan kap. 1 og 2. med fordel springes over, dog undtaget kap. 2.1.5 om

Bohr's korrespondensprincip, der er vigtig for at forstå sammenhængen til den klassiske teori. Hvis kap. 5.2 om brintatomet senere skal gennemgås, kan det dog være nødvendigt også at introdukere Sommerfeld atommodellen, kap. 2.2, for at få de 2 kvantetal (l, m) præsenteret og anskueliggjort klassisk.

B) Sigter formålet mod en faststoffysisk anvendelse, f.eks. med materialet anvendt som forudsætning for halvlederfysik, kan især kap. 5.2, brintatomet, og kap. 6, erkendelsesteorien, udelades. Endvidere er kap. 4 om kvantemekanikkens afrunding ikke strengt nødvendig, og kan derfor springes over, helt eller delvist - dette gælder specielt for den sidste halvdel om middelværdier og spredning samt Ehrenfest's sætning.

C) Et andet videregående formål, med materialet som grundlag, kan være erkendelsesteoretiske problemer, f.eks. EPR-paradokset, Aspect-forsøget eller blot indeterminismen i kvanteteorien. Heri er især kap. 5, anvendt kvantemekanik, overflødig.

Det vil iøvrigt her være nemt at fortsætte den historiske linie, som materialet indeholder.

D) Af andre oplagte muligheder for anvendelse af materialet i en videregående sammenhæng, er som forudsætning for molekylærfysik, atom- og kernefysik, og af eksempler kan nævnes molekylspektre, spin-teorien og finstrukturen kernemodeller og henfald.

Disse kan alle bygge på det i B) nævnte grundlag. Det vil dog specielt i atom- og molekylærfysiske sammenhænge være nødvendigt også at medtage kap. 5.2, brintatomet.

Som afsluttende bemærkning bør det nævnes, at dette materiale vil danne grundlag for en afprøvning overfor en 3.g mat.fys. gymnasieklasse i Frederiksborg Statsskole, hvor vi i perioden jan. - apr. 85 skal gennemføre en 30 timers undervisning, der skal udgøre et 20 timers teoretisk og et 10 timers eksperimentelt valgfrit emne.

3. EDB-programmer.

I tilknytning til elevhæftet er der udarbejdet 4 edb-programmer, hvis formål, som nævnt tidligere, er at lette elevernes tilegnelse af kvantemekanik. Dette søges opnået ved dels at anvende computeren til løsning af vanskelige matematiske problemer og dels ved computersimulation af forskellige kvantemekaniske effekter. De fire edb-programmer (SUPER, SPALTE, BRØND, & ORBITAL) er skrevet i programmeringssproget pascal og kører under operativsystemet Concurrent CP/M. Desuden anvendes grafiksystemet GSX. Programmerne er udviklet til brug på Regnecentralens Partner og Piccoline. Nedenfor følger en detaljeret beskrivelse af de enkelte programmer. Disse startes ved blot at indtaste programmets navn.

3.1 SUPER-programmet.

Dette program superponerer sinusbølger af formen:

$$A \sin(2\pi(x/\lambda - \nu t) + \Phi) \quad (3.1)$$

hvor

A = amplitude
x = sted
 λ = bølgelængde
 ν = frekvens
t = tid
 Φ = faseforskydning

Brugeren angiver tid, amplitude, bølgelængde, frekvens og faseforskydning, hvorefter programmet ved simpel summation udregner den resulterende bølge som funktion af stedet (x), der gennemløber intervallet fra 0 til 100.

Ved hjælp af SUPER er det muligt at superponere indtil 20 brugerspecificerede sinusbølger. Den resulterende bølge udtegnes på computerens skærm.

Desuden udtegnes den resulterende bølge som funktion af bølgelængden (λ), og denne figur er ækvivalent med den spektret for den resulterende bølge. Hensigten med at introducere spektret er at give eleverne en mulighed for at erkende sammenhængen mellem sted og bølgelængde (som er proportional med impulsen for stofbølger). Dette skulle lette forståelsen af Heisenbergs usikkerhedsrelation.

I appendix angives en række eksempler på brugen af de fire edb-programmer. Nedenfor følger et eksempel på en programkørsel med SUPER.

Eksempel:

SUPERPOSITION AF SINUSBØLGER

Programmet superponerer sinusbølger af formen $A \sin(2\pi(x/\lambda - t))$ og udtegner den resulterende funktion. Brugeren specificerer tid, amplitude, frekvens, bølgelængde og fase for et antal bølger. Desuden udtegnes funktionens spektrum.

```
anta) sinusbølger(1 - 20) ->2  
tid ->0
```

```
amplitude(1) ->1  
frekvens(1) ->0  
bølgelængde(1) ->6  
fase(1) ->0
```

```
amplitude(2) ->1  
frekvens(2) ->3  
bølgelængde(2) ->5  
fase(2) ->3.1415
```

3.2 SPALTE-programmet.

Dette program, der simulerer det kendte dobbeltspaltereksperiment (se elevbøftet kap. 3.1), tænkes i første række brugt til demonstrationsforsøg vedrørende elektronens bølgeegenskaber.

Udover at bestemme partikeltype (makroskopiske kugler eller elektroner) har brugeren mulighed for at angive om de enkelte spalter skal være åbne eller lukkede.

Ekperimentet består af en partikelkanon, som ikke kan ses på computeren-skærmen. Til højre for denne er anbragt en væg med to huller, hvorigennem de emitterede partikler kan passere enkeltvis. Partiklerne stoppes af en skærm, der samtidig registrerer hvor på skærmen partiklerne rammer. Desuden udtegnes et histogram, der illustrerer hyppigheden med hvilken partiklerne rammer forskellige områder af skærmen. Histogrammet opbygges successivt sideløbende med partiklernes registrering på skærmen.

I det efterfølgende gives en beskrivelse af principperne bag programmet SPALTE.

Partikelintensiteten, som den registreres på skærmen er kendt på forhånd og er grundlaget for hele simulationen. Hvis index 1 og 2 betegner henholdsvis øvre og nedre spalte i forsøgsopstillingen kan den samlede intensitet for elektroner I_{12} udtrykkes som

$$I_{12} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos\left(\frac{2\pi d y}{D \lambda}\right) \quad (3.2)$$

hvor

$$I_1 = (D^2 + (y - \frac{1}{2}d)^2) \quad (3.3)$$

$$I_2 = (D^2 + (y + \frac{1}{2}d)^2) \quad (3.4)$$

d angiver spalternes indbyrdes afstand, medens D betegner distancen fra spalterne til skærmen. y angiver hvor på skærmen partiklerne rammer. Det bør bemærkes, at interferencen (sidste led i 3.2) forsvinder, såfremt en af spalterne lukkes. Elektronens de Broglie-bølgelængde er af størrelsesorden 10^{-10} m, hvilket medfører en forsøgsopstilling i nano-målestok. Det dobbeltspaltereksperiment, som fremtræder på computerens skærm, er derfor en forstørrelse af selve eksperimentet på ca 10milliarder gange. I den aktuelle simulation er $\lambda = 0.25$ nm, $d = 0.2$ nm, $D = 0.4$ nm. Skærmen hvorpå partiklerne registreres er 1.0 nm lang. I forsøget med makroskopiske kugler findes den samlede partikelintensitet ved simpel addition af I_1 og I_2 :

Det på computerens skærm viste eksperiment har i dette tilfælde realistiske dimensioner.

De enkelte partiklers bane bestemmes af en ret linie mellem en af spalterne og et punkt på skærmen. Såfremt begge spalter er åbne bestemmes den aktuelle udmundingsspalte ved hjælp af en uniform tilfældighedsgenerator. Det punkt på skærmen, hvor partiklerne rammer, er givet ved tilfældigt fordelte y -værdier, hvis sandsynlighedsfordeling er i overensstemmelse med ligningerne (3.2) eller (3.5) alt eftersom, der er tale om elektroner eller makroskopiske kugler.

Idet (3.2) og (3.5) betragtes som sandsynlighedsfordelinger for y -værdierne udvikles en algoritme, som genererer tilfældige tal (y -værdier) i overensstemmelse med den givne fordeling.

Intervaller mellem $y = -5$ og $y = +5$ inddeles i 101 delintervaller, og for hvert af disse beregnes

fordelingsfunktionens værdi. Ved successiv summation af disse værdier opnås den kumulerede fordelingsfunktion, der endelig normeres. Resultatet heraf er en tabel, der giver relationen mellem en given y-værdi og det tilsvarende punkt på den kumulerede fordelingsfunktion. Uniformt fordelte tilfældige tal (0.0 - 1.0) anvendes som indgange i den kumulerede sandsynlighedsfordeling, og via tabellen findes de tilsvarende y. Herved genereres tilfældige y-værdier, hvis fordeling er i overensstemmelse med den givne intensitetsfordeling (3.2) eller (3.5). Simulationen foregår ved 500 partikler sendes fra en af spalterne til skærmen, hvor y-koodinaten registreres til brug for udtegningen af histogrammet.

Eksempel:

DOBBELTSPALTE EKSPERIMENT

Programmet simulerer dobbeltspalteeksperimentet (se elevhæftet). Brugeren har mulighed for at vælge at udføre forsøget med makroskopiske kugler eller elektroner. Desuden kan hullerne åbnes og lukkes efter brugerens ønske.

Partikeltype (1=kugle,2=elektron) ->2
Øverste hul (1=åben,2=lukket) ->1
Nederste hul (1=åben,2=lukket) ->1

3.3 BRØND-programmet.

I modsætning til potentialboksen er det ydenst vanskeligt at bestemme de tilladte energiniveauer og de dertil hørende bølgefunktioner for et brøndpotential. For at afhjælpe dette problem har vi udviklet programmet BRØND, der beregner og udtegner energispektret samt de stationære bølgefunktioner for en en-dimendional enkelt- eller dobbeltbrønd.

Brugeren angiver potentialbrøndens dybde(eV), brøndens bredde (målt i bohradier) samt (såfremt der er flere brønde) bredden mellem de enkelte brønde (ligeledes målt i bohradier). Desuden angives for hvilket energiniveau bølgefunktionen ønskes udtegnet.

Nedenfor følger dels en gennemgang af programmets matematiske og fysiske grundlag og dels et eksempel på en kørsel af programmet.

Da potentialbrøndens energispektrum er kontinuert for $E > 0$, søger nærværende program kun at finde de diskrete energiværdier for $E < 0$. De generelle løsninger til den tidsuafhængige schrødingergligning kan skrives som

$$u(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad \text{indenfor brønden (3.5)}$$

$$u(x) = C \exp(\beta x) + D \exp(-\beta x) \quad \text{udenfor brønden (3.6)}$$

hvor

$$k = \left(\frac{2m(\phi_0 - E)}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.7)$$

og

$$\beta = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.8)$$

Enkeltbrønden:

Hvis a og b betegner henholdsvis brøndens bredde og afstanden mellem brøndene kan enkeltbrøndens potential udtrykkes ved

$$V(x) = \begin{cases} \Phi & \text{for } x \leq -\frac{a}{2} \\ 0 & \text{for } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \Phi & \text{for } x > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (3.9)$$

Ud fra ligningerne (3.6) og (3.7) samt kontinuitetsbetingelserne fås følgende udtryk til bestemmelse af brøndens energispektrum:

$$\tan(ka/2) - \beta/k = 0 \quad (3.10)$$

$$\cot(ka/2) + \beta/k = 0 \quad (3.11)$$

Dobbeltbrønden:

For at simplificere beregningerne antages dobbeltbrøndens ydervægge at være uendelig høje. Potentialet får derfor følgende udseende

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x \leq -(a + \frac{b}{2}) \\ 0 & \text{for } -(a + \frac{b}{2}) < x < -\frac{b}{2} \\ \Phi & \text{for } -\frac{b}{2} \leq x \leq \frac{b}{2} \\ 0 & \text{for } \frac{b}{2} < x < (a + \frac{b}{2}) \\ \infty & \text{for } x \geq (a + \frac{b}{2}) \end{cases} \quad (3.12)$$

Efter løsning af schrödingerligningen for dette potential fås:

$$\cot(ka) + \beta/k \tanh(\beta b) = 0 \quad (3.13)$$

$$\cot(ka) + \beta/k \coth(\beta b) = 0 \quad (3.14)$$

der muliggør en bestemmelse af dobbeltbrøndens

energisppektrum.

Energispektrerne svarende til potentialerne (3.10) og (3.13) bestemmes ved at løse ligningerne (3.11), (3.12), (3.14) og (3.15). Disse ligninger løses numerisk ved hjælp af følgende iterative procedure (Newton-Raphsons metode). På basis af passende initialværdier (løsningsgæt) samt formlen

$$(3.15)$$

findes successivt bedre approksimationer y^* til den sande løsning (f betegner funktionen, hvis nulpunkter, man søger at finde). Som konvergenzkriterium anvendes $\text{abs}(y - y^*) \leq 0.001$. De acceptable energiværdier findes herefter ved at substituere de fundne løsninger (k-værdier) i udtrykket for k (3.8).

De til de individuelle energiniveauer hørende stationære bølgefunktioner bestemmes ved numerisk integration af den tidsuafhængige Schrödingerligning, der forinden omskrives til

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = - \frac{2m}{\hbar^2} (\Phi_0 - E) u \quad (3.16)$$

I det konkrete tilfælde løses (3.17) ved hjælp af Runge-Kuttas metode (af tredje orden) til løsning af anden ordens ordinære differentialligninger ($y'' = f(x, y)$). Princippet heri fremgår af følgende ligninger

$$y_{n+1} = y_n + h \left(y'_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2) \right) \quad (3.17)$$

$$y'_{n+1} = y'_n + \frac{1}{6} k_1 + \frac{2}{3} k_2 + \frac{1}{6} k_3 \quad (3.18)$$

hvor

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}y'_n + \frac{h}{2}k_1\right) \quad (3.19)$$

$$k_3 = hf\left(x_n + h, y_n + hy'_n + \frac{h}{2}k_2\right)$$

h er den størrelse, hvormed den uafhængige variabel (x) inkrementeres. h er ligeledes bestemmende for løsningens nøjagtighed, der for den anvendte metode kan sættes til h^4 for hvert trin i integrationen. I BRØND-programmet vælges $h = 0.01$.

Eksempel:

Programmet beregner og udtegner energispektrum samt bølgefunktioner for en en-dimensional kvadratisk potentialbrønd samt en tilsvarende dobbeltbrønd. Brugeren forskæller brønd karakteristika.

Antal brønde (1-2)	->2
Brøndens bredde (Bohr-radier)	->2
Brøndens potential (eU)	->300
Afstand mellem brøndene	->0.5

Brøndens energiniveauer:

energi-niveau(1)	=	21.09
energi-niveau(2)	=	24.29
energi-niveau(3)	=	82.53
energi-niveau(4)	=	96.81
energi-niveau(5)	=	178.73
energi-niveau(6)	=	218.58

Programmet beregner og udtegner bølgefunktioner for den første brønd ->

3.4 ORBITAL-programmet.

Dette program udtegner prikkort over brintatomets elektronfordeling i x-z-planen. Formålet hermed er at anskueliggøre bølgefunktionen for et coulombpotential.

Brugeren angiver hovedkvantetallet ($n = 1 - 3$), banequantallet ($l = 0 - 2$) samt det magnetiske kvantetal ($m = 0 - +/- 2$), hvorefter programmet udtegner et prikkort over atomets elektronfordeling. Punkttætheden er direkte proportional med sandsynligheden for at finde elektronen.

I det følgende gives en præsentation af principperne bag ORBITAL-programmet samt et eksempel på brugen af dette. Det fysiske grundlag for programmet er de komplette løsninger til schrødingergligningen for en partikel i et coulombfelt. Disse løsninger kan skrives på formen:

$$u_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.20)$$

hvor

$$R_{nl}(r) = N_n (2Z_0 r / na_0)^l \exp[-2Z_0 r / 2a_0 n] L_{n-l}^{2l+1}(2Z_0 r / na_0) \quad (3.21)$$

og

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos\theta) \exp(im\varphi) \quad (3.22)$$

$L_{n-l}^{2l+1}(r)$ og $P_l^m(\cos\theta)$ er henholdsvis de associerede laguerre- og legendrepolynomier, medens N_n er en normeringskonstant:

$$N_n = - \left[\left(\frac{2Z_0}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.23)$$

Ud fra bølgefunktionens radialdel (1) fås den radiale fordelingsfunktion

$$D(r) = (r^2 |R(r)|^2) \quad (3.24)$$

som er således defineret, at $r^2 R(r)^2 dr$ angiver sandsynligheden for at finde partiklen i afstande mellem r og $(r + dr)$. Med ligning (5) som udgangspunkt udvikles en algoritme, som genererer tilfældige tal (radier), hvis fordeling approksimerer den radiale fordelingsfunktion.

Først vælges (lidt arbitrært) "cut-off"-radius uden for hvilken der kun er ringe sandsynlighed for at træffe elektronen. Intervallet mellem $r = 0$ og "cut-off"-radius inddeles i 51 delintervaller, og for hvert af disse beregnes fordelingsfunktionens værdi. Ved successiv summation af disse værdier opnås den kumulerede fordelingsfunktion, der endelig normeres. Resultatet heraf er en tabel, der giver relationen mellem en given radius og det tilsvarende punkt på den kumulerede fordelingsfunktion. Uniformt fordelte tilfældige tal (0.0 - 1.0) anvendes som indgange i den kumulerede sandsynlighedsfordeling, og via tabellen findes de tilsvarende radier. Herved genereres tilfældige radier, hvis fordeling er i overensstemmelse med den radiale fordelingsfunktion (5).

Bølgefunktionens (1) rumlige fordeling bestemmes af kugelfunktionerne $Y_{lm}(\dots)$, hvis kvadrat angiver sandsynligheden for at træffe elektronen i et givet numvinklelement. Programmet ORBITAL begrænser sig til brintatomets elektronfordeling i x-z-planen. Koordinaterne kan derfor udtrykkes som

$$X = r |Y(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta$$

$$Z = r |Y(\theta, \varphi)|^2 \cos \theta$$

hvor θ er uniformt fordelte tilfældige vinkler, og på basis heraf udtegnes prikkort over elektronfordelingen i et brintatom.

Eksempel:

ORBITAL

Programmet udregner og udtegner elektronfordelingen i brintlignende atomer i såvel grundtilstanden som eksciterede tilstande. Plottet viser fordelingen i x-z - planet. Punkttætheden er direkte proportional med sandsynligheden for at finde elektronen et givet sted. Atomets aktuelle tilstand bestemmes af brugeren, som indtaster hovedkvantetal, banequantetal og magnetisk kvantetal.

Hovedkvantetal (1-3) ->3
Banequantetal (0-2) ->2
Magn.kvantetal (0-2) ->0

Litteraturliste.

1. Bekendtgørelse af lov om gymnasieskoler og studenterkursus (nr.370 af 28. juni 1977).
2. Bekendtgørelse om undervisning i gymnasiet og om fordringerne ved og eksamensopgivelserne til studentereksamen, §17. Fysik (nr.332 af 12 juni 1981).
3. Niels Bohr: Atomernes bygning og stoffernes fysiske og kemiske egenskaber.
(Fysisk Tidsskrift, 19 (1921), p.153-220)
4. - : Om brintspektret.
(Fysisk Tidsskrift, 61 (1962), p.185-202)
5. - : On the constitution of atoms and molecules.
(Philosophical Magazine, 26 (1913), p.1-25, 476-402 og 857-875)
6. - : Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete.
(Physical Review, 48 (1935), p.696-702)
7. - : Atomfysik og menneskelig erkendelse.
(Schultz, 1957)
8. - : Atomfysik og menneskelig erkendelse, II.
(Schultz, 1964)
9. - : Atomteori og naturbeskrivelse.
(Schultz, 1958)

10. Max Born: Zur Quantenmechanik der stossvorgänge.
(Zeitschrift für Physik, 37 (1926), p.863-867)
11. - : Zur Quantenmechanik der stossvorgänge.
(Zeitschrift für Physik, 38 (1926), p.803-827)
12. A. Einstein: Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete
(Physical Review, 47 (1935), p.777-780)
13. B. Elbæk et. al.: Atomkennens mikro makro verden.
(NBI, 1971)
14. F. Elvekjør et. al.: Fysik for gymnasiet og hf, 2.
(G.E.C. GAD, 1982)
15. R. Feynman et al.: The Feynman lectures on physics - quantum mechanics, VOL. III.
(Addison-Wesley, 1966)
16. G. Gamow et. al.: Den store fysikbog, 1 + 2.
(Grafisk forlag,)
17. G. Gamow: 30 år, der rystede fysikken.
(Gyldendal, 1968)
18. S. Gasiorowicz: Quantum Physics.
(John Wiley & Sons, 1974)
19. W. Hansen et. al.: Elementær kvantemekanik.
(Systime, 1981)

20. W. Heisenberg: Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik.
(Zeitschrift für Physik, 43 (1927), p.172-198)
21. J. Heilbron et. al.: The genesis of the Bohr atom.
(Historical Studies in the physical sciences, 1 (1969), p.211-290)
22. J. Heilbron: The Kossel-Sommerfeld theory and the ring atom.
(ISIS, 58 (1967), p.451-482)
23. W.R. Hindmarch: Atomic spectra.
(Pergamon Press, 1967)
24. T. Hirose et. al.: Formation of Bohr's theory of atomic constitution.
(Japanese Studies in the History of Sciences, 3 (1964), p.6-29)
25. Friedrich Hund: The history of quantum theory.
(William Clowes & Sons, 1974)
26. Max Jammer: The conceptual development of quantum mechanics.
(McGraw-Hill, 1966)
27. - : The philosophy of quantum mechanics.
(John Wiley & Sons, 1974)

28. J. Højgaard Jensen et. al.: Om fysik 1.
(Reitzel, 1983)
29. J. H. Jensen: Matematik- og fysikundervisningen i
det automatiserede samfund.
(IMFUFA-tekst nr. 82, 1984)
30. - : Nogle artikler om matematik, fysik og
almendannelse.
(IMFUFA-tekst nr. 84, 1984)
31. M. Klein: Einstein and the wave-partikel duality.
(The natural Philosopher, 3 (1964), p.3-49)
32. Helge Kragh: Bibliografisk vejledning til studiet af
den moderne fysiks historie.
(IMFUFA-tekst nr. 5, 1978)
33. - : On the history of early wave mechanics.
(IMFUFA-tekst nr. 23, 1979)
34. - : Historiske studier i den nyere atom-
fysiks udvikling.
(IMFUFA-tekst nr. 35, 1980)
35. - : Af Schrödingerligningens historie.
(Fysisk Tidsskrift, 74 (1975) p.
145-160)
36. Ingvar Lindgren et al : Fysik 3 - kvantfysik
Almqvist & Wiksell, 1970.
37. Jagdish Mehra : The Solvay Conferences on Physics.
(D. Riedel, 1975).

38. Henry Nielsen & Poul Thomsen : GF-rapport nr. 1 & 2.
(Fysisk Inst.AU,1983)
39. S. Nisio : The formation of the Sommerfeld quantum theory of 1916. (Jap. Stud. Hist. Sci., 12 (1973), p. 117-134)
40. Carl Nordling : Fysik, Handbok. Almqvist & Wiksell, 1973
41. Albert Chr. Paulsen : Elevforudsætninger i fysik. (Imfufa-tekst nr. 69, 1983)
42. V.V. Raman et al.: Why was it Schrödinger who developed de Broglies ideas. (Hist. Stud. Phys. Sci., 1 (1969), p. 291-314.
43. Morten Scharff : Elementær kvantemekanik. Akademisk Forlag, 1977.
44. Erwin Schrödinger : Quantisierung als Eigenwertproblem. Annalen der Physik, 80 (1926), p. 361-376, 79 (1926), p. 489-527
45. Murray R. Spiegel : Mathematical Handbook. McGraw-Hill, 1968.
46. Georg L. Trigg : Landmark Experiments in twentieth Century Physics. Crane Russac Comp. 1975.
47. Erling Veje : Skuffe 201 - grundlæggende kvantefænomener. (KU/Fysik 73, 1978)

48. - : Skuffe 202 - partikler og bølger (KU/
Fysik 73, 1979)
49. - : Skuffe 203 - Elementær kvantemekanik
(KU/Fysik 73, 1978)
50. - : Skuffe 205 - partikel i centralfelt
(KU/Fysik 73, 1978)
51. Vejledning og retningslinier for undervisning i
gymnasiet, § 17. fysik og § 18. matematik (juli
1971)
52. Jurg Waser et al. : Chem One. (Mc Graw-Hill, 1976)