

Plancks strålingslov

- Utgangspunkt: Akselererte ladninger emitterer elektromagnetisk stråling; dette følger av Maxwells ligninger. Mer om det i TFY4240 E.m.teori.

- Kvantehypotesen (Planck, 1900): Energien i EM stråling er kvantisert,

$$E_n = n \cdot h\nu \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

ν = frekvensen

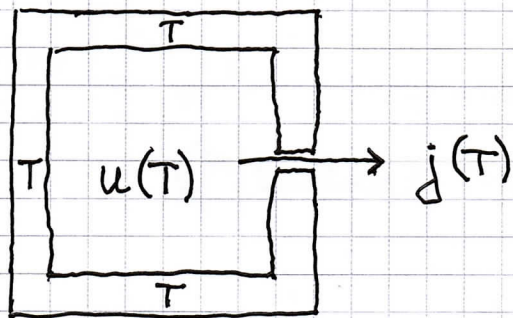
$$h \approx 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad ; \quad \text{i dag eksakt:}$$

$$h \equiv 6.62607015 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (\text{siden 20.05.2019})$$

- Sort legeme absorberer all innkommende stråling.

Emitterer like mye energi som det absorberer i termisk likevekt, dvs $T = \text{konstant}$.

- Modellsystem: Metallboks med hulrom og liten åpning, i termisk likevekt.



$u(T)$ = strålingsenergi pr volumenhett i hulrommet (J/m^3)

$j(T)$ = utstrålt energi pr tids- og pr flateenhet (W/m^2)

$$[j(T) = \frac{c}{4} \cdot u(T)]$$

- Frekvens- og bølglængdefordeling:

$$j(\nu) = \int dj = \int_0^{\infty} d\nu \frac{dj}{d\nu}$$

evt. $j(\nu) = \int_0^{\infty} d\lambda \frac{dj}{d\lambda}$

Resultat:

$$\frac{dj}{d\nu} = \frac{2\pi h \nu^3 / c^2}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}$$

$$\frac{dj}{d\lambda} = \frac{2\pi h c^2 / \lambda^5}{\exp(hc / \lambda k_B T) - 1}$$

$$c \equiv 299\,792\,458 \text{ m/s} \quad (\text{siden 1983})$$

$$k_B \equiv 1.380\,649 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \quad (\text{Boltzmanns konstant})$$

- Ingredienser i udledningen:

$$\frac{du}{d\nu} = \frac{1}{V} \frac{dU}{d\nu} = \frac{1}{V} \cdot \langle E \rangle \cdot \frac{dN}{d\nu}$$

$\langle E \rangle$ = midlere energi pr svingemode

$\frac{dN}{d\nu}$ = antall svingemoder pr frekvensenhet
("tilstandstettheten")

(3)

- Svingemoder i kubisk h lrom ($V = L^3$)
er st ende EM b lger som oppf ller

$$FY1003 \left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ Maxwells ligninger (f.eks. } \nabla \cdot \vec{E} = 0) \\ \bullet \text{ Grensebetingelser for el. felt } \vec{E} \text{ og magn.felt } \vec{B} \\ \text{ p  de 6 metallveggene (f.eks. } \vec{E}_{||} = 0) \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow \frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi \nu^2 V}{c^3}$$

- Midlere energi pr svingemode:

$$\text{Klassisk: } \langle E \rangle = 2 \cdot \frac{1}{2} k_B T = k_B T$$

pga ekvipartisjonspriippet: Hvert kvadratiske ~~ledd~~ ledd i energifunksjonen bidrar med $\frac{1}{2} k_B T$ til midlere energi.

$$\text{Her: } u = u_E + u_B = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2$$

$\Rightarrow$ Rayleigh - Jeans lov:

$$\frac{du}{d\nu} = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} \cdot k_B T$$

OK for lave frekvenser, men gir "ultrafiolett-katastrofen":

$$u(T) = \frac{8\pi k_B T}{c^3} \int_0^\infty d\nu \nu^2 = \infty \quad !!$$

Eknipartisjonsprinsippet: (TFY4165? TFY4230)

Anta energi $E(s) = A \cdot s^2$ (dvs kvadratisk i s)

Da er $dP = G \cdot \exp(-E/k_B T) \cdot ds$ sannsynligheten for at energien (til en partikkel eller svingemode) ligger mellom $E(s)$ og $E(s+ds)$.

Normering av P , dvs $\int dP = 1$: $\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \right)$

$$G \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{A \cdot s^2}{k_B T}\right) ds = 1$$

$$= \sqrt{\pi k_B T / A}$$

$$\Rightarrow G = \sqrt{\frac{A}{\pi k_B T}}$$

$$\langle E \rangle = \int E \cdot dP = \int_{-\infty}^{\infty} A s^2 \sqrt{\frac{A}{\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{A s^2}{k_B T}\right) ds$$

$$= \frac{k_B T}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx}_{= \sqrt{\pi} / 2}$$

$$\text{dvs: } \langle E \rangle = \langle A s^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

• $\langle E \rangle$ når $E_n = n h \nu$; $n = 0, 1, 2, \dots$

(5)

Vi må summere (over mulige n -verdier) i stedet for å integrere (over kontinuerlige frihetsgrader).

$$\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \cdot p_n ; p_n \sim \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right)$$

Normering av sannsynlighet : $\sum_n p_n = 1$

$\Rightarrow$ Skriver $p_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$; $\beta = 1/k_B T$

og regner ut normeringsfaktoren $1/Z$:

$$\sum_n p_n = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} = 1$$

$\Rightarrow Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \text{partisjonsfunksjonen}$

Med $E_n = n \cdot h \nu$:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-h \nu \beta n} = 1 + e^{-h \nu \beta} + e^{-2 h \nu \beta} + \dots$$

$$= 1 + x + x^2 + \dots \quad (\text{med } x = e^{-h \nu \beta})$$

$$= \frac{1}{1-x} = [1 - \exp(-h \nu \beta)]^{-1}$$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z} \left(-\frac{d}{d\beta}\right) \sum_n e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{Z} \frac{dZ}{d\beta}$$

$$= -\frac{1}{Z} \frac{dZ}{dx} \frac{dx}{d\beta} = -(1-x) \cdot \frac{1}{(1-x)^2} \cdot (-h \nu) x$$

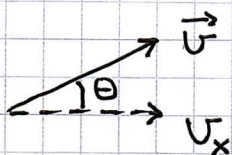
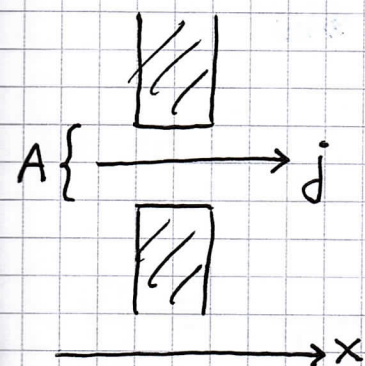
$$= \frac{h \nu x}{1-x} = \frac{h \nu}{\frac{1}{x} - 1} = \frac{h \nu}{\exp(h \nu \beta) - 1}$$

$$\Rightarrow \frac{du}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \langle E \rangle = \frac{8\pi h \nu^3 / c^3}{\exp(h\nu/k_B T) - 1} \quad (6)$$

• Fra u til j :

$$j = \frac{1}{2} \left\langle \frac{dU}{A \cdot dt} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{u \cdot dV}{A \cdot dt} \right\rangle$$

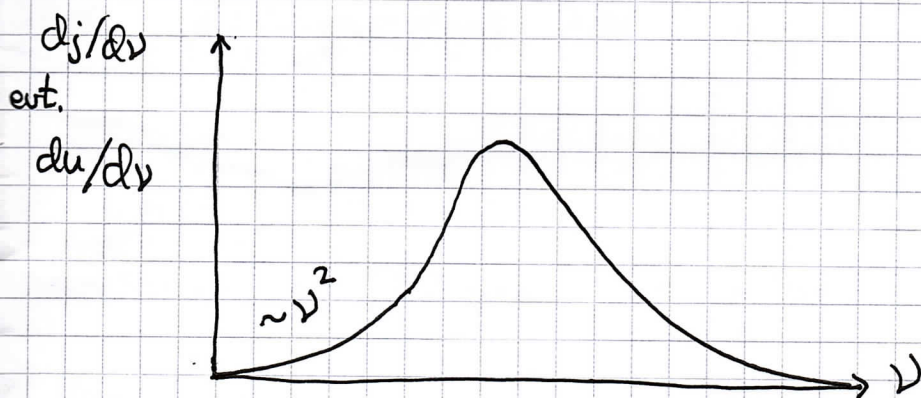
$$= \frac{1}{2} \left\langle \frac{u \cdot A \cdot dx}{A \cdot dt} \right\rangle = \frac{1}{2} u \cdot \langle v_x \rangle$$



$$|\vec{u}| = c$$

$$v_x = c \cdot \cos \theta$$

$$\Rightarrow \langle v_x \rangle = \frac{c}{2} \Rightarrow j = \frac{c}{4} u \quad \text{og} \quad \frac{dj}{d\nu} = \frac{c}{4} \frac{du}{d\nu}$$



- Klassisk grense av Plancks strålingslov:

$$k_B T \gg h\nu$$

dvs: Termisk energi mye større enn oppsplittingen mellom de kvantiserte energiene. (Dvs: Essensielt kontinuerlig energifordeling.)

Da er $\exp(h\nu/k_B T) \approx 1 + \frac{h\nu}{k_B T}$ slik at

$$\frac{d_j}{d\nu} \approx \frac{2\pi h \nu^3 / c^2}{1 + \frac{h\nu}{k_B T} - 1} = \frac{2\pi k_B T}{c^2} \cdot \nu^2$$

$$\text{evt. } \frac{du}{d\nu} = \frac{4}{c} \frac{d_j}{d\nu} = \frac{8\pi k_B T}{c^3} \cdot \nu^2$$

dvs Rayleigh-Jeans lov!

- Eksamen og Plancks strålingslov:

Kun 1 oppgave i "nyere tid"!

(Som egentlig handler om Wiens forskyvningslov...!)

Kanskje noe mer i år...?

(8)

- Oppg: Vis at $j(T) = \sigma T^4$ og bestem σ .
(Stefan - Boltzmanns lov)

Løsn: $j(T) = \int_0^\infty d\lambda \frac{dj}{d\lambda}$; $\frac{dj}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2/\lambda^5}{\exp(hc/\lambda k_B T) - 1}$

$$x = \frac{hc}{\lambda k_B T} ; \quad dx = \frac{hc}{k_B T} \cdot \left(-\frac{d\lambda}{\lambda^2}\right)$$

$$\Rightarrow j(T) = \int_0^\infty \underbrace{dx \cdot \left(-\frac{k_B T}{hc}\right) \cdot \left(\frac{hc}{k_B T x}\right)^2}_{= d\lambda} \cdot \frac{2\pi hc^2 \cdot (k_B T x / hc)^5}{\exp(x) - 1}$$

$$= 2\pi hc^2 \cdot \left(\frac{k_B T}{hc}\right)^4 \cdot \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}}_{= \pi^4/15}$$

$$= \underbrace{\frac{2\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^2}} \cdot T^4$$

$$= \sigma \approx 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$$

- Oppg: Vis at $dj/d\lambda$ er maksimal når $(x-5)e^x + 5 = 0$

Løsn: $dj/d\lambda = \text{konst.} \cdot f(y)$; $f(y) = y^{-5} (e^{1/y} - 1)^{-1}$; $y = \frac{\lambda k_B T}{hc}$

$$\frac{df}{dy} = 0 \Rightarrow -5y^{-6} (e^{1/y} - 1)^{-1} + y^{-5} (-1) (e^{1/y} - 1)^{-2} \cdot e^{1/y} \cdot \left(-\frac{1}{y^2}\right) = 0$$

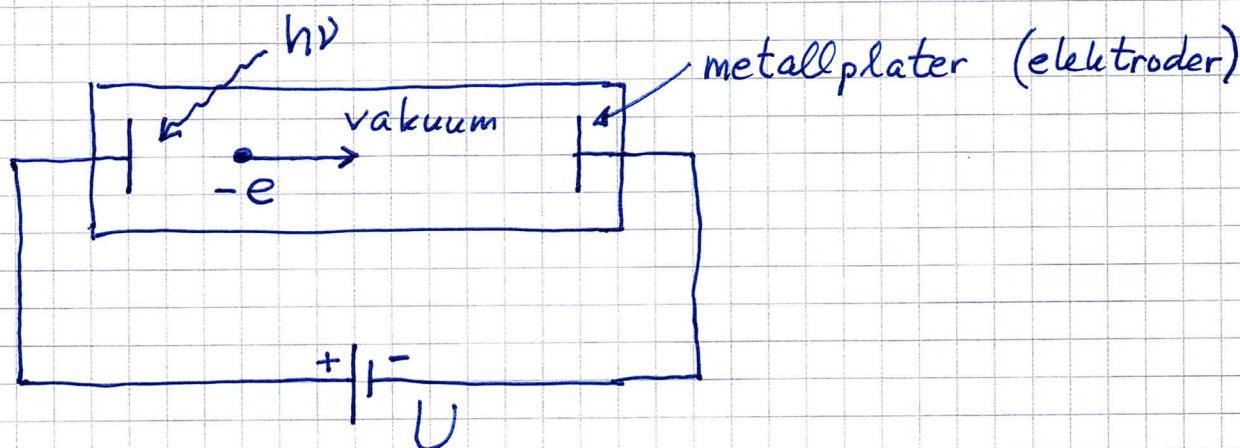
$$\Rightarrow y^{-6} (e^{1/y} - 1)^{-2} \left\{ \frac{1}{y} e^{1/y} - 5 e^{1/y} + 5 \right\} = 0$$

$$\stackrel{x=1/y}{\Rightarrow} (x-5)e^x + 5 = 0 ; \quad x = hc/\lambda k_B T$$

$$\Rightarrow x \approx 4.965 \Rightarrow \lambda_m \cdot T = \frac{hc}{k_B x} \approx 2898 \mu\text{m} \cdot \text{K}$$

Wien's forskyvn. lov

Fotoelektrisk effekt (1905)



W = minste energi påkrevd for å løsrive elektroner fra metallelektroderne

= frigjøringsarbeid (work function)

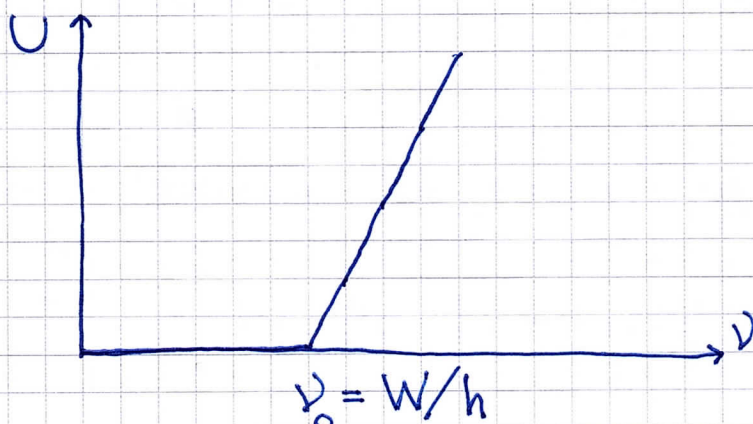
$h\nu < W \Rightarrow$ ingen elektroner rives løs

$h\nu > W \Rightarrow$ elektroner med kin. energi $K = h\nu - W$

Motspenning (Terskelspanning) $U = K/e$

for å hindre strøm i kretsen

$$U(\nu) = \frac{K}{e} = \frac{h\nu - W}{e} = \frac{h}{e} (\nu - \nu_0)$$



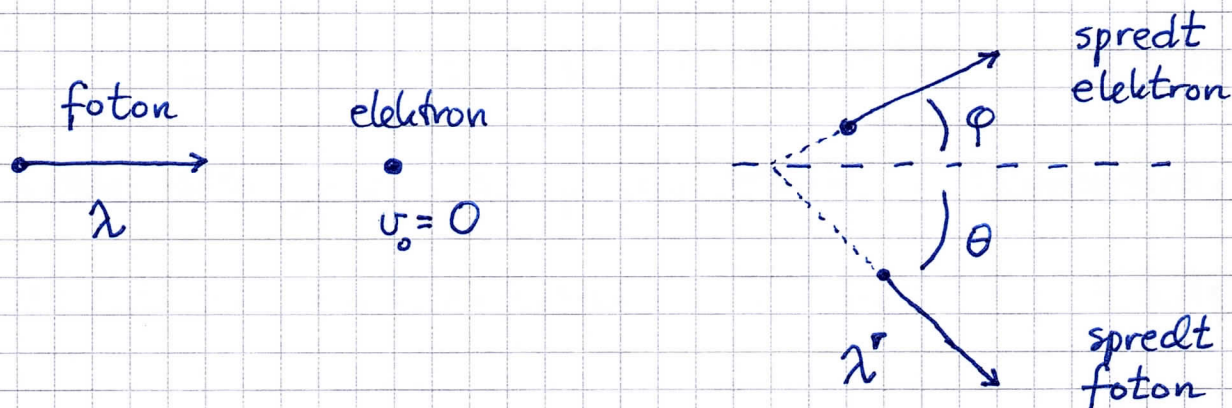
Comptoneffekt

(1923)

(10)

Kollisjon mellom foton og partikkel med masse

(massiv partikkel; f.eks. elektron)



Relativistisk mekanikk:

$$\vec{p} = \gamma m \vec{v} ; \quad E = \gamma mc^2 = E_0 + K$$

$$\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} ; \quad E_0 = mc^2$$

$$K = E - E_0 = (\gamma - 1)mc^2 \quad \left(\begin{array}{l} v \ll c \\ \approx \frac{1}{2}mv^2 \end{array} \right)$$

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$$

Foton:

$$m = 0 ; \quad E = h\nu \quad \text{og} \quad E = pc \quad \Rightarrow \quad p = \frac{h\nu}{c}$$

$$\text{Bølge: } c = \lambda \cdot \nu \quad \Rightarrow \quad p = h/\lambda$$

~~~~~  
Bruker bevaring av energi og impuls og får

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta)$$



## Bohrs atommodell (1913)

(11)

Bohr kjente til:

- Balmer-serien for H-atomet:

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right); \quad n=3,4,5,6; \quad R \approx 10^7 \text{ m}^{-1}$$

- Liten atomkjerne med positiv ladning (Rutherford, 1911)
- Kvantisert strålingsenergi (Planck 1900; Einstein 1905)

Bohr antok derfor:

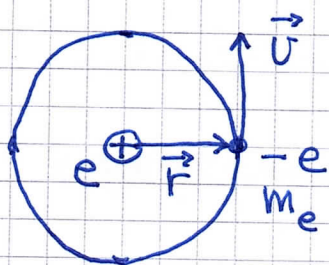
- Elektronet i H-atomet beveger seg i klassiske baner rundt kjernen, med bestemte energier, i såkalte stasjonære tilstander.
- Elektronet kan gjøre kvantesprang mellom de stasjonære tilstandene via absorpsjon eller emisjon av et strålingskvant (foton).
- Måtte anta kvantisert dreieimpuls (for å få energiverdier i samsvar med Balmer-serien, og Lyman-serien  $\lambda_n^{-1} = R (1/1^2 - 1/n^2); n=2,3,4,\dots$ )

$$L = |\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = n\hbar; \quad n=1,2,3,4,\dots$$

$$\hbar \equiv h/2\pi \approx 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$



(12)



$$F = m_e a$$

$$a = v^2 / r$$

$$F = e^2 / 4\pi\epsilon_0 r^2 ; \quad V = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 r$$

$$\Rightarrow K = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad \Rightarrow E = K + V = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Antagelsen  $L_n = r \cdot m_e v = n\hbar$  gir nå

$$r_n = n^2 \cdot 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2 = n^2 \cdot a_0 \approx n^2 \cdot 0.529 \text{ Å}$$

$$E_n = -m_e e^4 / 32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2 \approx -13.6 \text{ eV} / n^2$$

$$= -\frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 / n^2$$

$$\alpha = e^2 / 4\pi\epsilon_0 \hbar c \approx 1/137 \quad (\text{finstrukturkonstanten})$$

Ioner med ett elektron:  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{3+}$ , .....

$$\Rightarrow e \rightarrow Ze \Rightarrow F = Ze^2 / 4\pi\epsilon_0 r^2 \text{ etc.}$$

$$\Rightarrow e^2 \rightarrow Ze^2 ; \quad e^4 \rightarrow (Ze^2)^2 = Z^2 e^4$$

$$\Rightarrow r_n = n^2 a_0 / Z$$

$$E_n = -13.6 \text{ eV} \cdot Z^2 / n^2 = -\frac{1}{2} (Z\alpha)^2 m_e c^2 / n^2$$

Dvs: Ikke-relativistisk OK for små  $Z$ -verdier



Partikkelbølger (1923)

Bølgeegenskaper :  $\lambda$  og  $\nu$

Sammenhenger for EM bølger / fotoner :

$$E = pc = h\nu \quad ; \quad c = \lambda\nu \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} \quad \text{og} \quad \nu = \frac{E}{h}$$

de Broglie : "Må (!?) også gjelde for massive partikler!"

Senere grundig verifisert eksperimentelt.

(Interferens, diffraksjon.)

Ideell gass : Fordeling av impulsverdier; naturlig valg for "karakteristisk" impuls

$$\begin{aligned} p_{\text{rms}} &= \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \sqrt{\langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \rangle} \\ &= \sqrt{2m \cdot \langle K_{\text{trans}} \rangle} \\ &= \sqrt{2m \cdot 3 \cdot \frac{1}{2} k_B T} \quad (\text{EPP}) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{p_{\text{rms}}} = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}$$

= partiklenes termiske de Broglie - bølgelengde



Eks (30.05.18/5)

(14)

Elektronmikroskop (TEM).  $K = 300 \text{ keV}$ .  $p = ?$

Løsning: Ikke-relativistisk først.

$$p \cdot c = \sqrt{2m_e K} c = 8.9 \cdot 10^{-14} \text{ J} = 554 \text{ keV}$$

Men: Siden  $E_0 = m_e c^2 \approx 511 \text{ keV}$ , har vi her ikke  $K \ll E_0$ , så vi bør nok regne relativistisk.

$$\begin{aligned} pc &= \sqrt{E^2 - E_0^2} = \sqrt{(m_e c^2 + K)^2 - (m_e c^2)^2} \\ &= \sqrt{(511 + 300)^2 - 511^2} \text{ keV} = \underline{\underline{630 \text{ keV}}} \end{aligned}$$

Gir elektroner med kort bølgelengde,

$$\lambda = h/p = 1.96 \text{ pm}$$

og mulighet for avbildning på atomær skala.

Eks (30.05.18/2)

Gass med  $\text{Na}_2$ -molekyler (dimere) ved  $770^\circ\text{C}$ ;  $\lambda = ?$

Løsning:  $m \approx 2 \cdot 23u = 46 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ;  $T = 1043 \text{ K}$

$$\Rightarrow \lambda = h / \sqrt{3mk_B T} = 1.1 \cdot 10^{-11} \text{ m} = \underline{\underline{0.11 \text{ \AA}}}$$

Eks (03.06.19/1)

H-atom, overgang fra  $n=9$  til  $n=6$ ,  $\lambda$  for emittert foton?

$$\text{Løsning: } \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{hc}{E_9 - E_6}$$

Lurt med  $hc = 1237 \text{ eV} \cdot \text{nm}$  her;

$$\lambda = \frac{1237 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{-13.6 \text{ eV}/81 + 13.6 \text{ eV}/36} = 5894 \text{ nm} \approx 6 \mu\text{m}$$



# Schrödinger ligningen (SL)

= (ikke-relativistisk) bølgeligning for partikler (med masse)

Minner om klassisk bølgeligning, for mek. og E.M. bølger:

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} \quad (\text{evt } \nabla^2 \xi = \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} \text{ i 3D})$$

Harmoniske ("monokromatiske") løsninger:

$$\begin{aligned} \xi(x,t) &= \xi_0 \sin(kx - \omega t) \\ &= \xi_0 \operatorname{Re} e^{i(kx - \omega t)} \quad (i = \sqrt{-1}) \end{aligned}$$

"Bølgerelationer":

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}, \quad v = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{T},$$

$$v_f = \lambda/T = \lambda v = \omega/k = \text{fasefart}$$

$$v_g = d\omega/dk = \text{gruppefart}$$

For fri partikkel, masse  $m$ , potensial  $V=0$ :

$$E = K = \frac{1}{2}mv^2 = p^2/2m$$

Prøver harmonisk bølge  $\Psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)}$

I følge de Broglie:  $\lambda = h/p$  og  $v = E/h$

$$\Rightarrow k = 2\pi/\lambda = p/h; \quad \omega = 2\pi v = E/h$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = e^{i(px - Et)/h}$$



(16)

Finner "passende" diff.ligning ved inspeksjon:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} \Psi; \quad E = p^2/2m$$

$$\Rightarrow \underline{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}} \quad (\text{SL i 1D; } V=0)$$

For partikkel i konstant potensial  $V_0 \neq 0$ :

$$\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar} \quad (\text{som for } V=0)$$

$$i\hbar \partial \Psi / \partial t = E\Psi = (K+V)\Psi = (p^2/2m + V_0)\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial^2 \Psi / \partial x^2 = \frac{p^2}{2m} \Psi$$

$$\Rightarrow \underline{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right) \Psi} \quad (\text{SL i 1D; } V_0 = \text{konst})$$

Problem dersom  $V(x) \neq \text{konstant}$ :  $\vec{F} = -\nabla V \neq 0$ ,  
og  $\vec{p}$  er ikke konstant.

Men samme diff.lign. viser seg å fungere:

$$\underline{i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})\right] \Psi(\vec{r},t)} \quad (\text{SL i 3D})$$

ga faktoren i på venstre side:  $\Psi$  alltid kompleks,  
er ikke direkte målbar.



## Tolkning av bølgefunksjonen

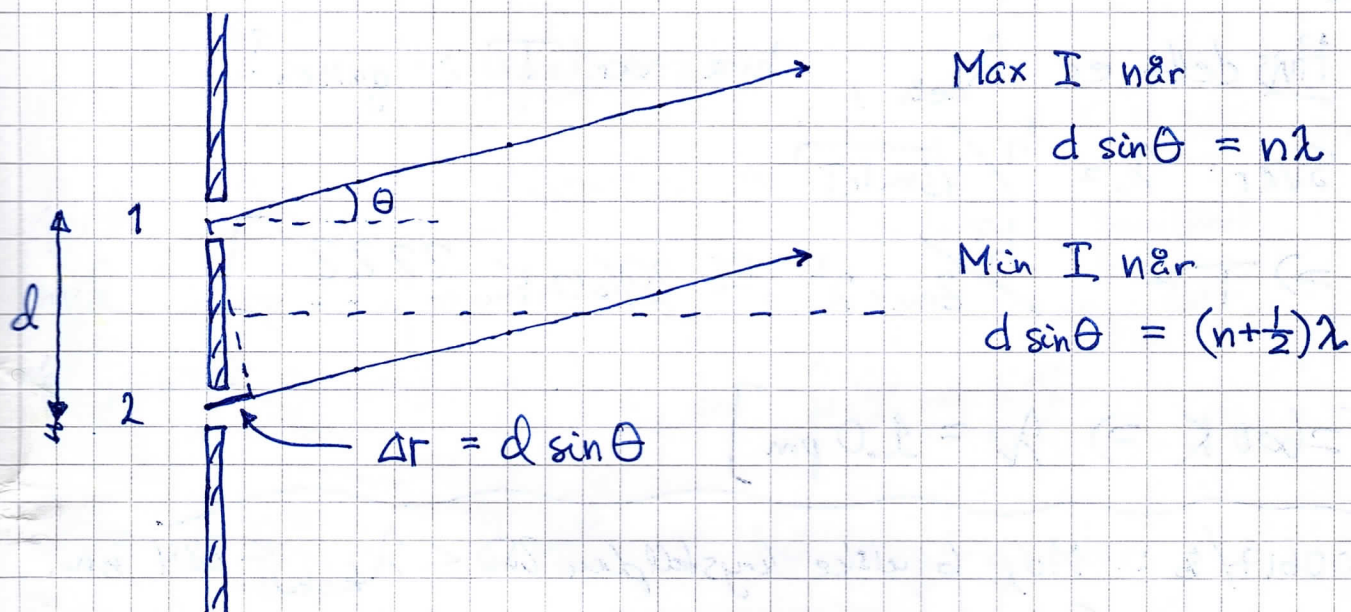
(17)

Send ett og ett foton, eller ett og ett elektron (evt atom, molekyl) inn mot dobbeltspalte (eller diffraksjonsgitter).

⇒ Interferensmønster på detektor/skjerm bak spaltene.

EM / fotoner:  $I \sim |\vec{E}|^2 = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$

Elektroner etc:  $I \sim |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$



⇒ Tolker  $|\Psi|^2$  som sannsynligheten for å detektere partikkelen i en gitt retning  $\theta$ .

Mer presist:

$dP = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$  = sanns. for å måle partikkelens posisjon i volum  $d^3r$  omkring  $\vec{r}$  ved tid  $t$

Normering:  $\int_{\text{hele rommet}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$



Operator. Eigenfunksjon. Eigenverdi

(TMA4115, MA1201, MA1202)

$$\boxed{\hat{A} f(x) = A f(x)}$$

← Eigenverdiligning  
 ↑ Operator    ↑ Eigenfunksjon    ↑ Eigenverdi    ← Samme funk. som  $\hat{A}$  virker på

•  $\hat{p}(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \underline{\text{impulsoperator}}$

fordi  $\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar}$  beskriver partikkel med "skarp" impuls  $p$  og er egenfunksjon til  $\hat{p}$ , med eigenverdi  $p$ ; dvs  $\hat{p}\Psi = p\Psi$

•  $\hat{K} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \underline{\text{kin. energi-operator}}$

fordi  $\Psi(x,t)$  beskriver partikkel med skarp  $K$  og er egenfunk. til  $K$ , med egenr.  $K = p^2/2m$

•  $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 = \text{Hamilton-operator}$

= op. for total energi  $E = K + V_0$ , fordi  $\Psi$

beskriver part. med skarp  $E$  og er egenfunk.

til  $\hat{H}$ , med egenr.  $E = K + V = p^2/2m + V_0$



Hvæ med  $V(x) \neq \text{konst.}$ ? Da er  $p$  ikke konstant, men  $E = K + V$  er fortsat konstant (konservativt system!)

$\Rightarrow$  Andre typer  $\Psi(x,t)$  vil være egenfun. til  $\hat{H} = \hat{K} + V(x)$

$$3D: x \rightarrow \vec{r}; \quad \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \nabla; \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla; \quad \hat{K} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$$

$$SL: \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

### Stationære tilstande. TUSL

$V$  uafh. af  $t$  ("altid" i TFY4215!)

$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot T(t)$  sættes inn i SL:

$$i\hbar \psi \frac{\partial T}{\partial t} = T \hat{H} \psi \quad / \cdot 1/\psi T$$

$$\Rightarrow \underbrace{i\hbar \frac{\partial T/\partial t}{T}}_{\text{kun } t} = \underbrace{\frac{\hat{H}\psi}{\psi}}_{\text{kun } x} = \text{konst.} \stackrel{\text{kaller vi}}{=} E$$

må være ...

$$\Rightarrow \frac{dT}{T} = \frac{E}{i\hbar} dt \Rightarrow \boxed{T(t) = e^{-iEt/\hbar}}$$

"en gang for alle"!

$$\text{eg: } \boxed{\hat{H}\psi = E\psi} \quad \text{TUSL}$$

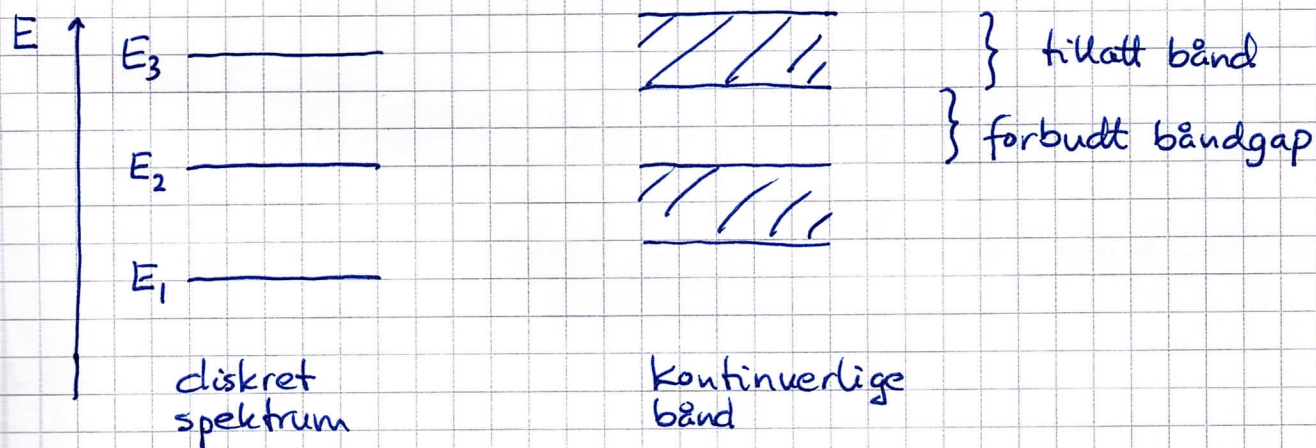
$|\Psi|^2 = |\psi(x)|^2$  uafh. af  $t \Rightarrow$  "Stationær tilstand"

Tolker:  $E$  = mulige energieigenr.;  $\psi$  = mulige energiegentilst.



Bundne tilstander  $\left[ \lim_{|x| \rightarrow \infty} \Psi_n(x) = 0 \right]$  har  
diskrete energier  $E_n$ .

Ubundne tilstander  $[\Psi(\pm\infty) \neq 0]$  tilsvarende  
kontinuierlige energibånd.

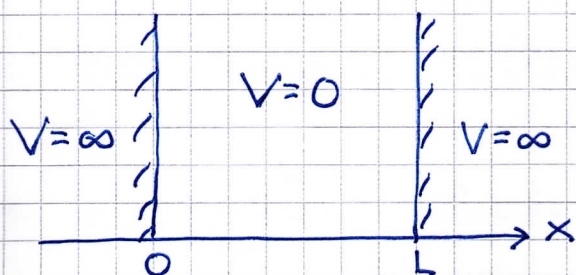


Hvis TUSL har bundne løsninger  $\{\Psi_n\}$  og  
 ubundne løsninger  $\{\Psi_E\}$  er generell løsning av SL:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \Psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int c_E \Psi_E(x) e^{-iEt/\hbar} dE$$



Partikkel i boks: Fint eksempel som illustrerer diverse generelle egenskaper og sammenhenger.



$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; \quad 0 < x < L \\ \infty & ; \quad \text{ellers} \end{cases}$$

Stasjonære tilstander:  $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$  (inne i boksen)

$\Psi = 0$  der  $V = \infty$ : Null sanns.  $|\psi|^2$  for å finne part. der

Løsn. av TUSL:

$$\psi'' + k^2 \psi = 0 \quad ; \quad k^2 = 2mE/\hbar^2$$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$\psi(0) = 0 \quad (\text{krever kontinuerlig } \psi) \Rightarrow B = 0$$

$$\begin{aligned} \psi(L) = 0 & \Rightarrow \sin kL = 0 \Rightarrow k_n \cdot L = n \cdot \pi \quad (n=1,2,3,\dots) \\ & \Rightarrow E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m = n^2 \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2 \end{aligned}$$

Bundne tilstander  $\{\psi_n\}$  og diskret spektrum  $\{E_n\}$ , som sagt!

[Kontrollspørsmål: Hva er sammenhengen mellom  $p$  og  $k$  ?]

Vi normerer  $\psi_n(x)$  ved å anta at partikkelen har energi  $E_n$ .  
(Kan tenke oss at vi har målt energien, men ikke posisjonen.)

$$\Rightarrow 1 = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = A_n^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = A_n^2 \cdot \frac{1}{2} L$$

$$\Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$



Egenskaper, som gjelder (stort sett) generelt:

(22)

- Symmetri: Symmetrisk  $V(x) \Rightarrow \text{symm. } |\Psi_n|^2 \Rightarrow \text{symm. eller antisymm. } \Psi_n(x)$ . [Mhp hvilken x-verdi her?] S:  $\psi_1, \psi_3, \dots$ ; AS:  $\psi_2, \psi_4, \dots$
- Nullpunkter: Økende antall nullpunkter med økende energi. Grunntilstanden har lavest mulig energi; og ingen nullpunkter. (Nodelinjer i 2D; nodeplan i 3D.)
- Grensebetingelser: Inspeksjon av TUSL,  $\frac{\Psi''}{\Psi} = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$ , gir  $\Psi(x)$  kontinuerlig overalt  
 $\Psi'(x)$  ——— " ———, unntatt der  $V(x)$  gjør et uendelig sprang: der gjør  $\Psi''$  et  $\infty$  sprang  $\Rightarrow \Psi'$  er diskontinuerlig  $\Rightarrow \Psi$  har en "knekk"
- Krumningsegenskaper:  
Klassisk tillatt område:  $E \geq V \Rightarrow \frac{\Psi''}{\Psi} \leq 0 \Rightarrow \Psi$  krummer mot x-aksen  
Klassisk forbudt område:  $E < V \Rightarrow \frac{\Psi''}{\Psi} > 0 \Rightarrow \Psi$  krummer fra x-aksen
- Ortonormert funksjonssett (ortogonale og normerte):  
$$\langle \Psi_n, \Psi_j \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) \Psi_j(x) dx = \delta_{nj} = \begin{cases} 1 & ; n=j \\ 0 & ; n \neq j \end{cases}$$
  
Gjelder (kjemelig) generelt for løsninger av TUSL.



- Starttilstand og dens tidsutvikling:  
Anta diskret spektrum.

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x) = \text{gitt bølgefunk. ved } t=0$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}$$

Utnytter at  $\{\psi_n\}$  er ortonormert og finner

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) dx$$

Hvis  $\Psi(x, 0)$  er normert, forblir  $\Psi(x, t)$  normert, og

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

og

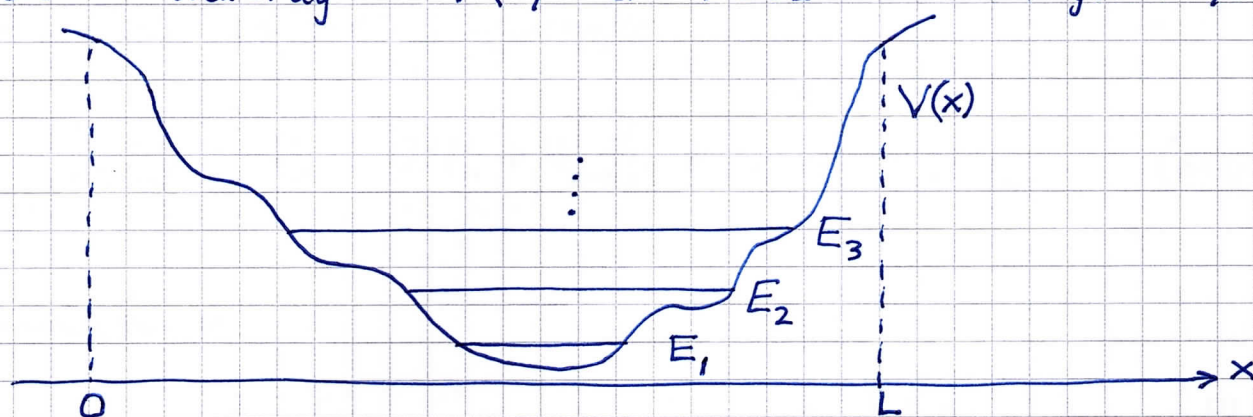
$|c_n|^2 =$  sanns. for å måle at partikkelen har energi  $E_n$

(Målepostulatet)



# Nummerisk løsning av TUSL

Med "vilkaarlig"  $V(x)$  er TUSL ikke analytisk løsbart.

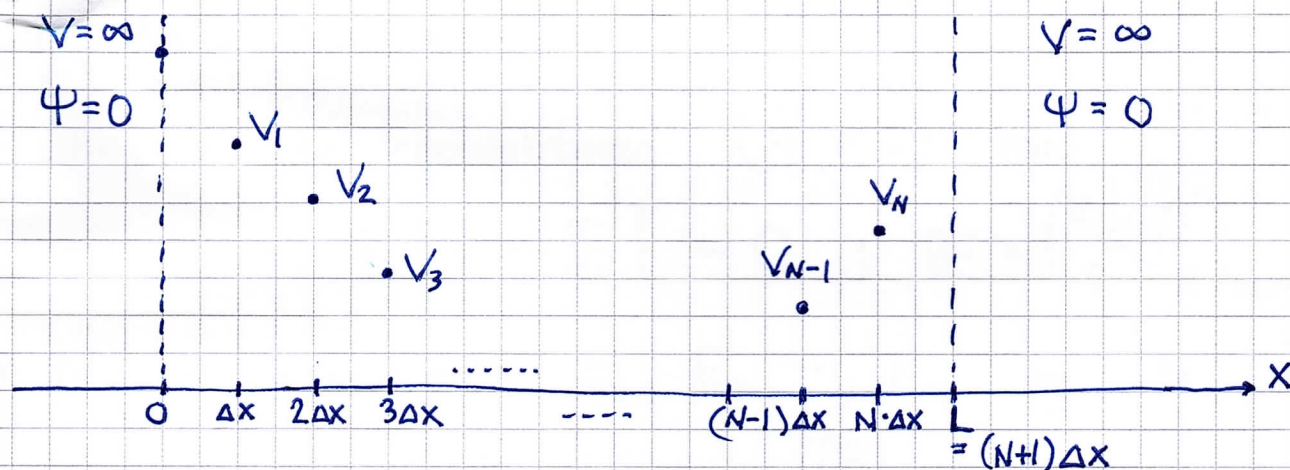


Vi "vet" at vi har bundne tilstander og diskret spektrum  $E_1, E_2, E_3, \dots$  så lenge  $E_j < V(\pm \infty)$ .

For tilstander med  $E_j \ll V(0)$  og  $V(L)$  er  $\Psi(x) \approx 0$  utenfor  $(0, L)$

$\Rightarrow V \approx \infty$  for  $x \leq 0$  og  $x \geq L$

Diskretisering:



$$\Delta x = \frac{L}{N+1} ; \quad x_n = n \Delta x ; \quad V_n = V(x_n) ; \quad \Psi_n = \Psi(x_n)$$

Grensebet:  $V_0 = V_{N+1} = \infty \Rightarrow \Psi_0 = \Psi_{N+1} = 0$



$$\psi_n'' \approx \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta x)^2}$$

TUSL blir "differanseligninger":

$$-\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \{ \psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1} \} + V_n \psi_n = E \psi_n \quad (n=1, 2, \dots, N)$$

Matriseform:

$$\begin{bmatrix} \epsilon + V_1 & -\frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{\epsilon}{2} & \epsilon + V_2 & -\frac{\epsilon}{2} & 0 & & \\ 0 & -\frac{\epsilon}{2} & \epsilon + V_3 & -\frac{\epsilon}{2} & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & 0 & -\frac{\epsilon}{2} & \epsilon + V_{N-1} & -\frac{\epsilon}{2} \\ & & & & 0 & -\frac{\epsilon}{2} & \epsilon + V_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix}$$

der  $\epsilon = \hbar^2 / m (\Delta x)^2$

Dvs:  $H \vec{\psi} = E \vec{\psi}$  med triagonal, reell, symmetrisk Hamiltonmatrise  $H$ .

Ikke-trivielle egenvektorer ( $\vec{\psi} \neq 0$ ) hvis

$$\det \{ H - E \} = 0 ; E = \begin{pmatrix} E & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & E \end{pmatrix}_{N \times N}$$

$\Rightarrow N$  energieigenverdier  $E_1, E_2, \dots, E_N$  og  $N$  egenvektorer  $\vec{\psi}^{(1)}, \vec{\psi}^{(2)}, \dots, \vec{\psi}^{(N)}$



Se [docs.scipy.org/doc/scipy/reference/linalg.html](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/linalg.html)  
 og `eigh_tridiagonal` ("Solve eigenvalue problem for a  
 real symmetric tridiagonal matrix").

$\Rightarrow$  egenverdier  $E_1 < E_2 < \dots < E_N$

egenvektorene er <sup>reelle og</sup> normerte og ortogonale ("ortonormert"):

$$\sum_{n=1}^N \psi_n^{(j)} \psi_n^{(k)} = \delta_{jk} ; \quad \psi_n^{(j)} = \psi^{(j)}(x_n)$$

$$[cf \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x) \psi_k(x) dx = \delta_{jk}]$$

og de danner et fullstendig sett:

$$\sum_{j=1}^N \psi_n^{(j)} \psi_l^{(j)} = \delta_{nl}$$

$$[ \sum_j \psi_j^*(x') \psi_j(x) = \delta(x' - x) ; \text{ Diracs } \delta\text{-funksjon,} \\ \text{mer om den senere!} ]$$

Starttilstand:

$$\Psi_k(0) = \sum_{j=1}^N c^{(j)} \psi_k^{(j)} ; \quad k = 1, 2, \dots, N ; \quad c^{(j)} = \sum_{k=1}^N \psi_k^{(j)} \Psi_k(0)$$

$$[cf \Psi(x, 0) = \sum_j c_j \psi_j(x)]$$

Tidsutvikling:

$$\Psi_k(t) = \sum_{j=1}^N c^{(j)} \psi_k^{(j)} e^{-iE_j t/\hbar}$$

$$[cf \Psi(x, t) = \sum_j c_j \psi_j(x) e^{-iE_j t/\hbar}]$$



Forventningsverdier:

$$\langle x \rangle(t) = \sum_{k=1}^N \Psi_k^*(t) x_k \Psi_k(t)$$

$$\langle p \rangle(t) = \sum_{k=1}^N \Psi_k^*(t) \hat{p} \Psi_k(t)$$

$$\hat{p} \Psi_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_k \approx \frac{\hbar}{i} \frac{\Psi_{k+1} - \Psi_k}{\Delta x} \quad (\text{f.eks})$$

### Hartree Atomic Units

Vi setter  $\hbar = e = a_0 = m_e = 1$ .

Siden  $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \cdot (\hbar^2/m_e e^2)$ , er også  $4\pi\epsilon_0 = 1$ .

Energi:  $E_h = \hbar^2/m_e a_0^2 = 1$  ( $= 1$  hartree)

( $=$  pot. energi  $|V_1|$  i grunntilst. i H-atomet)

Eks: Hva er dybde og bredde i atomære enheter for en potensialbrønn med dybde 5 eV og bredde 40 nm?

Svar:  $E_h = 1$  hartree tilsvarer 27.2 eV slik at

dybden er  $\frac{5}{27.2} \approx \underline{0.184 \text{ hartree}}$ .

$a_0 = 1$  tilsvarer  $0.529 \text{ \AA} = 0.0529 \text{ nm}$  slik at

bredden er  $\frac{40}{0.0529} \approx \underline{756}$



Postulatene : Basis for kvantemekanikken,  
 slik Newtons lover er for klassisk mekanikk!

• Operatorpostulat:

Målbare størrelser i klassisk mekanikk representeres i QM av lineære operatører, som "konstrueres" ved at impulskoordinater  $p_j$  erstattes av operatører

$$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}$$

$$q_j = \text{posisjonskoordinat} \quad (\hat{q}_j = q_j)$$

Eks: Finn operatorene for kinetisk energi og dreieimpuls for en partikkel med masse  $m$  som beveger seg i  $yz$ -planet.

$$\text{Løsn: } K = \frac{1}{2m} (p_y^2 + p_z^2) \rightarrow \hat{K} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)$$

$$\text{med } \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad \text{og} \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\Rightarrow \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$\text{Her har } \vec{L} \text{ kun en x-komp. } L_x = (\vec{r} \times \vec{p})_x$$

$$\Rightarrow L_x = y p_z - z p_y$$

$$\Rightarrow \hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$



- Tilstandspostulat:

$\Psi(\vec{r}, t)$  beskriver partikkelens tilstand og er bestemt av

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

$$\text{med } \hat{H} = \hat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

- Forventningsverdi-postulat:

$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d^3r$  er middelværdien av  $F$  for mange målinger av  $F$  på identisk preparerte systemer

Eks: Partikkel i boks, "preparert" i en stasjonær tilst.  $\Psi_n(x, t)$ .  
Hva er  $\langle x \rangle$  og  $\langle p \rangle$ ?

$$\text{Løsn: } \langle x \rangle = \int_0^L x |\Psi_n(x, t)|^2 dx = \int_0^L x |\Psi_n(x)|^2 dx = \underline{\underline{L/2}}$$

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_0^L \Psi_n^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n(x, t) dx \\ &\sim \int_0^L \underbrace{\sin \frac{n\pi x}{L}}_S \cdot \underbrace{\cos \frac{n\pi x}{L}}_{AS} dx = \underline{\underline{0}} \end{aligned}$$

- Målepostulat:

Måling av  $F$  gir en av egenverdiene  $f_j$ , der

$$\hat{F} \Psi_j = f_j \Psi_j ; \Psi_j \text{ er egenfunkt. til } \hat{F}$$

Etter måling av  $F$ , med resultat  $f_j$ , har partikkelen i tilstanden  $\Psi_j$ ; dvs målingen påvirker systemet.



Eks: Anta starttilstand

(30)

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{3}} \Psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{6}} \Psi_2(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_3(x)$$

Hva er sanns. for å måle energi  $E_1$  ved  $t_1 \geq 0$ ?

Hva er " " " "  $E_3$  ved  $t_3 > t_1$ ?

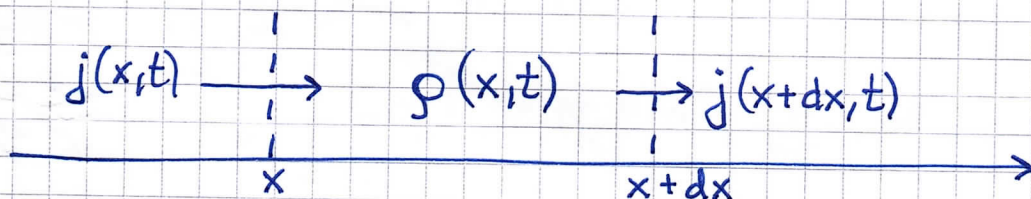
Svar:  $P(E_1) = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2 = \underline{\underline{\frac{1}{3}}}$ , ved tid  $t_1$ .

Etter  $t_1$  er  $\Psi(x,t) = \Psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar}$ , slik at

$$P(E_3) = 0, \text{ ved tid } t_3 > t_1$$

---

Sannsynlighetsstrøm Bevning av sannsynlighet



$\rho$  øker hvis  $j(x) > j(x+dx)$ :  $(\rho = \frac{dP}{dx} = |\Psi|^2)$

$$j(x) - j(x+dx) = \frac{\partial}{\partial t} \{ \rho(x) dx \}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial j}{\partial x} \Rightarrow \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0}$$

Kont.lign. for  
sanns. i 1D

3D:  $\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0}$



Bråk SL og skriv om  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  til  $\frac{\partial}{\partial x}$  av "noe"  
 $\Rightarrow$  dette "noe" må være  $-j$ , i følge kont.lign.

(31)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \{ \Psi^* \Psi \} = \dots \text{ se video H20...}$$

$$= - \frac{\partial}{\partial x} j$$

med  $j = \text{Re} \left\{ \Psi^* \frac{\hat{p}}{m} \Psi \right\}$

Eks: Hva er  $j$  for

1) fri partikkel?

2) partikkel i stasjonær (bundet) tilstand?

Løsn: 1)  $\Psi = e^{i(px - Et)/\hbar}$

$$\Rightarrow j = \text{Re} \left\{ e^{-i(px - Et)/\hbar} \frac{\hbar}{mi} \cdot \frac{ip}{\hbar} \cdot e^{+i(px - Et)/\hbar} \right\}$$

$$= p/m = \underline{\underline{v}}$$

Som ventet: Med  $\rho = \Psi^* \Psi = 1$  overalt blir

$$j = \rho \cdot v = v$$

2)  $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$ , <sup>alltid</sup> med mulighet for å velge reell løsning  $\psi(x)$  av TUSL

$$\Rightarrow j = \text{Re} \{ i * \text{reell størrelse} \} = \underline{\underline{0}}$$

Som ventet for stasjonær tilstand!



(32)

Noen flere generelle resultater og sammenhenger  
fra kap. 2 og 4 i PCH ("Fundamentale  
prinsipper" og "Viktige teoremer")

---

Sist:

- Postulatene
  - Sannsynlighetsstrøm(-tetthet)
- 

### Kommutatorer

$$[\hat{A}, \hat{B}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Hvis  $[\hat{A}, \hat{B}]f = 0$  :  $\hat{A}$  og  $\hat{B}$  kommuterer

$[\hat{A}, \hat{B}]f \neq 0$  : — " — — " — ikke

Eks 1:  $[x, x] = ?$

Løsning 1:  $[x, x]f(x) = x^2 f(x) - x^2 f(x) = 0$

$$\Rightarrow [x, x] = 0$$

Eks 2:  $[x, y] = ?$

Løsning 2:  $[x, y]f(x, y) = xy f(x, y) - yx f(x, y) = 0$

$$\Rightarrow [x, y] = 0$$



Eks 3:  $[q_i, q_j] = ?$  ( $q_i, q_j = \text{pos. koord.}$ )

(33)

Løs 3: Fra Eks 1 og 2 følger  $[q_i, q_j] = 0$

Eks 4:  $[x, \hat{p}_x] = ?$

Løs 4:  $[x, \hat{p}_x] f(x) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x f(x) = i\hbar f(x)$   
 $= \frac{\hbar}{i} (\cancel{\frac{\partial f}{\partial x}} + f)$

$\Rightarrow [x, \hat{p}_x] = i\hbar$

Eks 5:  $[\hat{p}_x, x] = ?$

Løs 5: Åpenbart er  $[\hat{B}, \hat{A}] = -[\hat{A}, \hat{B}] \Rightarrow [\hat{p}_x, x] = -i\hbar$

Eks 6:  $[y, \hat{p}_y] = ?$

Løs 6: Navnet skjemmer ingen, så  $[y, \hat{p}_y] = i\hbar$

Eks 7:  $[x, \hat{p}_y] = ?$

Løs 7:  $[x, \hat{p}_y] f(x, y) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} f - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} x f = 0$

$\Rightarrow [x, \hat{p}_y] = 0$

Eks 8:  $[q_i, \hat{p}_j] = ?$

Løs 8: Innser nå at  $[q_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$



Eks 9:  $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = ?$

(34)

Løsn 9:  $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] f(x, y) = -\hbar^2 \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} f - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} f \right) = 0$

$$\Rightarrow [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$$

Eks 10:  $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = ?$

Løsn 10: Innser at  $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$

Eks 11:  $[V(x), \hat{p}_x] = ?$

Løsn 11:  $[V(x), \hat{p}_x] f(x) = V(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(x) f(x)$

$$= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \cdot f(x)$$

$$\Rightarrow [V(x), \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

Eks 12:  $[\hat{K}, x] = ?$

Løsn 12:  $[\hat{K}, x] f(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} x f - x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right\}$

$$\frac{\partial^2 (x f)}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left( x \frac{\partial f}{\partial x} + f \right) = x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\Rightarrow [\hat{K}, x] f(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} f(x)$$

$$\Rightarrow [\hat{K}, x] = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} = -\frac{i\hbar}{m} \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{im} \hat{p}_x$$

Dermed:  $[\hat{H}, x] = \frac{\hbar}{im} \hat{p}_x$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$



## Adjungert av en operator

(35)

Dersom

$$\int (\hat{A} \Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* (\hat{B} \Psi_2) dx$$

er operatoren  $\hat{B}$  den adjungerte av  $\hat{A}$ .

Notasjon:  $\hat{A}^\dagger$  ("A-dagger") er adjungert av  $\hat{A}$

Dermed: 
$$\int (\hat{A} \Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* (\hat{A}^\dagger \Psi_2) dx \quad (\text{PCH } 2.9)$$

## Hermiteiske operatoren

$F$  = fysisk størrelse

$\hat{F}$  = QM operator som repr.  $F$

$\langle F \rangle$  = forv.verdi av  $F$ , må være reell

$$\Rightarrow \langle F \rangle = \langle F \rangle^*$$

$$\Rightarrow \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx = \left\{ \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx \right\}^* = \int \Psi (\hat{F} \Psi)^* dx \quad (\text{PCH } 2.7)$$

Mer generelt (se H20 for bevis):

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dx = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dx \quad (\text{PCH } 2.8)$$

Da er  $\hat{F}$  hermitesk, og selvadjungert, siden  $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$ .



Eks 1: Er  $\frac{\partial}{\partial x}$  en hermitesk operator?

(36)

Løsn 1: Nei, da den ikke er selvadjungert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1\right)^* \Psi_2 dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_2 dx}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi_2\right) dx$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$$

Eks 2: Hva er den adjungerte av en (generelt kompleks) konstant  $c$ ?

$$\text{Løsn 2: } \int (c \Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* c^* \Psi_2 dx$$

$$\Rightarrow c^\dagger = c^*$$

Eks 3: Hva er  $[f(x)]^\dagger$  for (kompleks) funksjon  $f(x)$ ?

$$\text{Løsn 3: } \int (f(x) \Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* f^*(x) \Psi_2 dx$$

$$\Rightarrow [f(x)]^\dagger = [f(x)]^*$$

Eks 4: Hva er adjungert av et produkt?

$$\text{Løsn 4: } \int \Psi_1^* (AB)^\dagger \Psi_2 dx \stackrel{2.9}{=} \int (AB \Psi_1)^* \Psi_2 dx$$

$$\stackrel{2.9}{=} \int (B \Psi_1)^* A^\dagger \Psi_2 dx \stackrel{2.9}{=} \int \Psi_1^* B^\dagger A^\dagger \Psi_2 dx$$

$$\Rightarrow (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$



Eks 5: Vis at  $\hat{p}_x$  er hermitesk.

(37)

Løsn 5:  $(\hat{p}_x)^\dagger = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger \left(\frac{\hbar}{i}\right)^\dagger = \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right) \left(-\frac{\hbar}{i}\right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$   
 $\Rightarrow \hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x$ , dvs selvadjungert og hermitesk

Eks 6: Er  $\hat{K}$  hermitesk?

Løsn 6:  $\hat{K}^\dagger = \frac{1}{2m} (\hat{p} \hat{p})^\dagger = \frac{1}{2m} \hat{p}^\dagger \hat{p}^\dagger = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{K}$ ; så ja!

Eks 7: Er  $\hat{H}$  hermitesk?

Løsn 7: Ja. Fra Eks 6 er  $\hat{K}$  hermitesk. Siden  $V(x)$  er en reell funksjon, er  $V^\dagger = V^* = V$ .  
Dermed er  $\hat{H}^\dagger = (\hat{K} + V)^\dagger = \hat{K} + V = \hat{H}$ .



## Usikkerhet i fysiske størrelser

(38)

Standardavvik:

$$\Delta F = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle}$$

= Root Mean Square Deviation

$$\begin{aligned}\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle &= \langle F^2 - 2F\langle F \rangle + \langle F \rangle^2 \rangle \\ &= \langle F^2 \rangle - 2\langle F \rangle^2 + \langle F \rangle^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta F = \sqrt{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}$$

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx$$

$$\langle F^2 \rangle = \int \Psi^* \hat{F}^2 \Psi dx$$

Eks: Grunntilst. for partikkel i boks.  $\Delta x = ?$   $\Delta p = ?$  ( $0 < x < L$ )

Løs: Fra før er  $\langle x \rangle = L/2$  og  $\langle p \rangle = 0$ .

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x^2 \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx = L^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$$

$$\Rightarrow \Delta x = \sqrt{L^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} - \frac{1}{4} \right)} \approx \underline{0.18 L}$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{\pi x}{L} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \sin \frac{\pi x}{L} dx$$

$$= \frac{2}{L} \cdot (-\hbar^2) \cdot \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 \cdot \frac{L}{\pi} \cdot \underbrace{\int_0^\pi (-\sin^2 z) dz}_{= \pi/2 \cdot (-1)} = \left( \frac{\pi \hbar}{L} \right)^2$$

$$\Rightarrow \Delta p = \underline{\pi \hbar / L}$$

$$\Rightarrow \underline{\Delta x \cdot \Delta p \approx 0.57 \hbar}$$



## Uskarphetsprodukt

(39)

For to målbare fysiske størrelser  $A$  og  $B$  er

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right| \quad (\text{PCH 4.35})$$

(Se H20 for bevis)

Dvs at  $\hat{A}$  og  $\hat{B}$  må kommutere for at  $A$  og  $B$  skal kunne ha skarpe verdier samtidig.

Eks: Heisenbergs uskarphetsrelasjon

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

En gaussisk bølgefunksjon

$$\Psi(x, t=0) = G \cdot \exp\left\{-\frac{(x - \langle x \rangle_0)^2}{2\Delta x_0^2} + ikx\right\}$$

har minimalt uskarphetsprodukt  $\Delta x_0 \cdot \Delta p_0 = \frac{\hbar}{2}$ ,

tyngdepunkt i  $\langle x \rangle_0$  og  $\langle p \rangle_0 = \hbar k$ .

Hvis  $V=0$  (fri partikkel):

$$\langle x \rangle(t) = \langle x \rangle_0 + \frac{\langle p \rangle_0}{m} \cdot t$$

$$\langle p \rangle(t) = \langle p \rangle_0 = \hbar k$$

$\Delta x(t)$  øker med  $t$  (dispersjon)

$$\Delta p(t) = \Delta p_0 = \hbar/2\Delta x_0 \text{ uendret}$$

(Se øving, og notater/video H20.)



Tidsutvikling av forventningsverdier

Ser på  $\hat{F}$  der  $\partial \hat{F} / \partial t = 0$

(Eks:  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}_x$ ,  $V(x)$ ,  $\hat{K}$ ,  $\hat{L}$ )

$$\text{Utg.punkt: } \frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{d}{dt} \left\{ \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx \right\}$$

Bruk produktregel for derivasjon, skriv om

$$\partial \Psi^* / \partial t \text{ og } \partial \Psi / \partial t \text{ rha SL, i\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi,$$

og bruk PCH 2.8 for hermiteske operator

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle}$$

Ehrenfests teorem:

De klassiske bevegelsesligningene gjelder for  $\langle x \rangle$  og  $\langle p \rangle$  i kvantemekanikken:

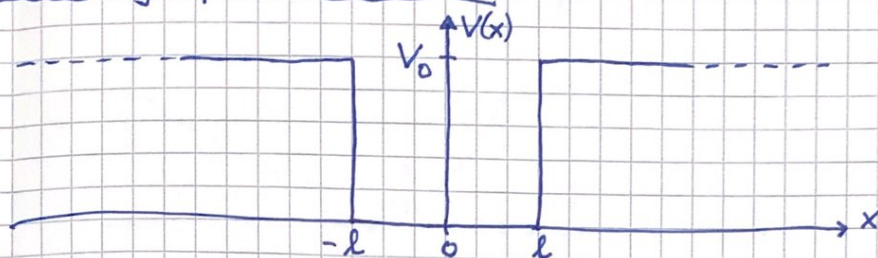
$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, x] \rangle = \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{im} \langle \hat{p} \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad \left[ \begin{array}{l} \text{Eks 12} \\ \text{s 34} \end{array} \right]$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \cdot i\hbar \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad \left[ \begin{array}{l} \text{Eks 11} \\ \text{s 34} \end{array} \right]$$

Kombinert gir disse

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$



Endelig potensialbrønn

$$\Psi''(x) = \begin{cases} -k^2 \Psi(x) & ; |x| < l & ; k^2 = 2mE/\hbar^2 \\ \kappa^2 \Psi(x) & ; |x| \geq l & ; \kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2 \end{cases}$$

$E < V_0$  : Bundne tilstander

$$\Psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} & (x \leq -l) \\ C \sin kx + D \cos kx & (|x| < l) \\ B e^{-\kappa x} & (x \geq l) \end{cases}$$

Kontinuerlige  $\Psi$  og  $\Psi'$  i  $x = \pm l$  og normering av  $\Psi$

$\Rightarrow$  5 lign.  $\Rightarrow$  Fastlegger  $A, B, C, D$  og mulige  $E$ .

Symm. tilst:  $D \cos kx$

Antisymm. tilst:  $C \sin kx$

Tillatte  $E$  bestemt av

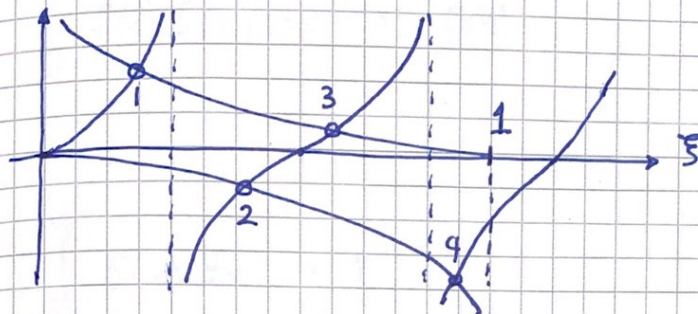
$$\tan kl = \begin{cases} \kappa l / k & (\text{symm } \Psi) \\ -k / \kappa & (\text{antisymm } \Psi) \end{cases}$$

eller med  $k_0^2 = 2mV_0/\hbar^2$  og  $\xi = k/k_0$  :

$$\tan k_0 l \xi = \begin{cases} \sqrt{1 - \xi^2} / \xi & (\text{symm}) \\ -\xi / \sqrt{1 - \xi^2} & (\text{antisymm}) \end{cases}$$



Plotting av  $V(x)$  og de to  $H(x)$  gir  $\xi$ -verdier, dvs mulige  $E$  (42)

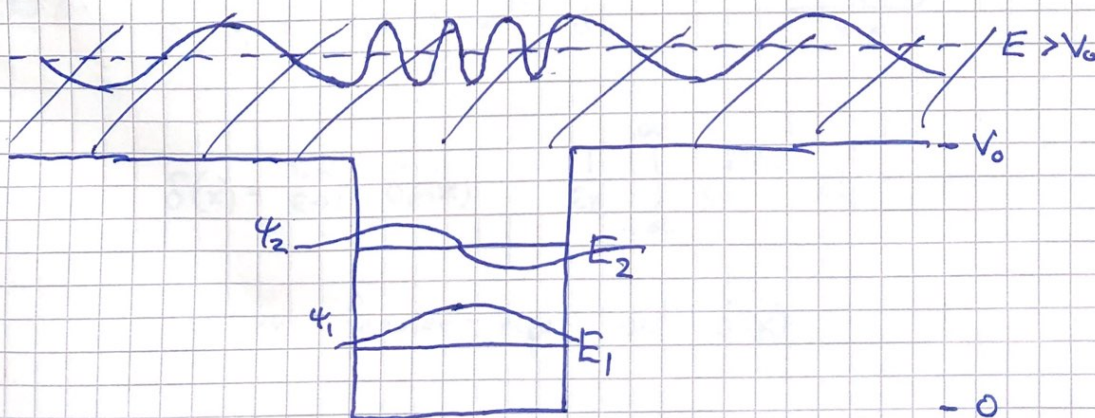


- Minst 1 bundet tilstand
- Antall bundne tilstander:  $N = 1 + \left[ \frac{2\sqrt{2mV_0}l}{\pi\hbar} \right]$  ↑ Heltallsverdien
- $\Psi(x) \sim e^{-\xi|x|}$  i det klassisk forbudte området.

Inntrengningsdybde  $\xi^{-1}$ , def. ved  $\left| \frac{\Psi(l + \frac{1}{2}\pi)}{\Psi(l)} \right| = e^{-1}$

$E > V_0$ : Ubundne tilstander

$\Psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx$  for  $|x| > l$ ; ingen refleksjoner på  $K = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \Rightarrow$  kontinuum





## Diracs deltafunksjon

(43)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \quad ; \quad \begin{array}{l} \text{kontinuerlig } f(x) \\ \text{ i } x=0 \end{array}$$

$$\Rightarrow \bullet \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

$$\bullet \delta(x) = 0 \quad \text{for } x \neq 0$$

$$\bullet \delta(0) = \infty$$

Representasjoner:

$$\text{Eks 1: } \delta_{\varepsilon}(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon & |x| \leq \varepsilon/2 \\ 0 & |x| > \varepsilon/2 \end{cases}$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_{\varepsilon}(x)$$

$$\text{Eks 2: } \delta_{\varepsilon}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} e^{ikx} dk = \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_{\varepsilon}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk$$

altså en fourier-repr. av  $\delta(x)$



- $\delta(-x) = \delta(x)$
- $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$
- $\delta(\vec{r}) = \delta(x) \cdot \delta(y) \cdot \delta(z)$
- Enhet:  $[\delta(x)] = \frac{1}{[x]}$

### $\delta$ -funksjonsnormering

En partikkel har plan bølge  $\Psi_k(x) = A e^{ikx}$  som løsning av TUSL. Kan ikke normeres på ordinært vis, men ortonormering kan uttrykkes ved hjelp av  $\delta$ -funksjonen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{k'}^*(x) \Psi_k(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx = |A|^2 \cdot 2\pi \cdot \delta(k-k')$$

$\Rightarrow$  Velger  $A = 1/\sqrt{2\pi}$  og får

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{k'}^*(x) \Psi_k(x) dx = \delta(k-k')$$

Erst. uttrykt ved impulsen  $p = \hbar k$ :

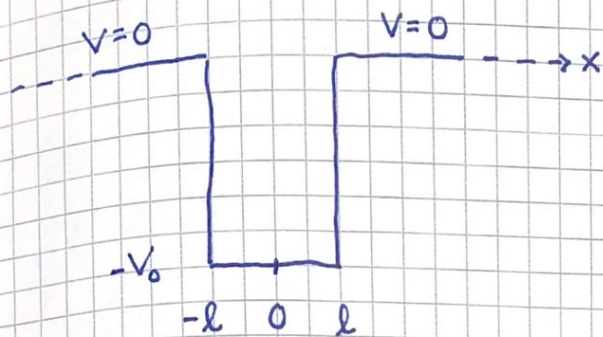
$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p'}^*(x) \Psi_p(x) dx &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = \frac{1}{\hbar} \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{\hbar} \cdot \hbar \delta(p-p') = \delta(p-p') \end{aligned}$$



## Deltafunksjonsbrønn

(45)



Ta grensene

$$V_0 \rightarrow \infty \quad \text{og} \quad l \rightarrow 0$$

slik at

$$\beta = 2l \cdot V_0 \quad \text{er} \quad \text{endelig}$$

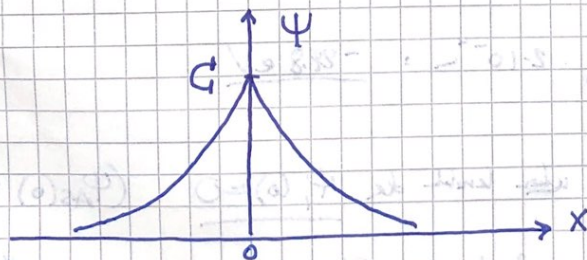
$$\Rightarrow V(x) = -\beta \delta(x) = \begin{cases} -\infty & (x=0) \\ 0 & (x \neq 0) \end{cases}$$

Anta  $E < 0$  (bundet tilstand):

TUSL for  $x \neq 0$ :

$$\psi'' = \kappa^2 \psi \quad ; \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} > 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = C e^{\mp \kappa x} \quad ; \quad x \gtrless 0$$



$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 2|C|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|C|^2}{\kappa}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}$$



Finnes mulig(e) E-verdi(er) med "fiks" : (46)  
 Integrer TUSL fra  $-\epsilon$  til  $\epsilon$  :

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \Psi' - \beta \delta(x) \Psi \right\} dx = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} E \Psi dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi'(\epsilon) - \Psi'(-\epsilon)] - \beta \Psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \Psi(x) dx$$

Tar så grensen  $\epsilon \rightarrow 0$  :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [-\hbar\sqrt{\kappa} - \hbar\sqrt{\kappa}] - \beta\sqrt{\kappa} = E \cdot 0 = 0$$

$$\Rightarrow \kappa = m\beta/\hbar^2$$

$$\Rightarrow E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m = -m\beta^2 / 2\hbar^2$$

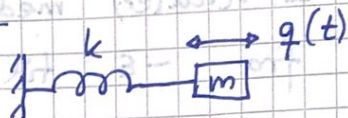
Dvs en bundet tilstand.

Alle  $E > 0$  er tillatt, dvs kontinuum av ubundne tilstander.



## Harmonisk oscillator

Klassisk, f.eks.



Hooke's law:  $F(q) = -kq \Rightarrow V(q) = \frac{1}{2}kq^2$

N2:  $\ddot{q} + \omega^2 q = 0$ ;  $\omega^2 = k/m$

Med f.eks.  $q(0) = A$  og  $\dot{q}(0) = 0$ :

$$q(t) = A \cos \omega t, \quad \dot{q}(t) = -\omega A \sin \omega t$$

$$E = K + V = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

Klassiske vendepunkter der  $E = V$  og  $K = 0$ :  $q = \pm A$

Kvantemekanisk: TUSL med  $V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \psi = E\psi$$

Deler TUSL med  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  og innfører  
dimensjonsløs energi  $\varepsilon = 2E/\hbar\omega$  og

— " — koordinat  $x = q/\sqrt{\hbar/m\omega}$ :

$$\psi''(x) + (\varepsilon - x^2)\psi = 0 \quad ; \quad \psi'' = \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

Asymptotisk, for  $|x| \gg \sqrt{\varepsilon}$ :  $\psi'' - x^2\psi \approx 0$

"Gjetter" at grunntilstanden (symmetrisk uten nullpunkter)  
kan være

$$\psi_0(x) = G_0 e^{-x^2/2}$$

Innsetting i TUSL gir



$$G_0(x^2-1)e^{-x^2/2} + G_0(\epsilon_0-x^2)e^{-x^2/2} = 0$$

(48)

dvs  $\psi_0(x)$  er løsning (og grunntilstanden), med tilhørende energieigenverdi  $\epsilon_0 = 1$ , dvs  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$

Normering:  $\int_{-\infty}^{\infty} G_0^2 e^{-m\omega q^2/\hbar} dq = 1 \Rightarrow G_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$

F25+F26  
06.10.21

Asymptotisk, for  $|x| \gg \sqrt{\epsilon_n}$ , får vi samme ligning,

$$\psi_n'' - x^2 \psi_n \approx 0$$

$\Rightarrow$  Faktoren  $\exp(-x^2/2)$  inngår i alle løsninger  $\psi_n(x)$

Trenger faktor  $x$  i  $\psi_1(x)$ , for å få antisymmetrisk løsning med 1 nullpunkt, osv.

$$\Rightarrow \text{Prøver } \psi(x) = v(x)e^{-x^2/2} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k\right) e^{-x^2/2}$$

dvs potensrekkeметоден.

Vi vet at  $v_0(x) = a_0 = G_0$ .

Vi forventer (pga symmetri og antall nullpunkter):

$$v_1(x) = a_1 x; \quad v_2(x) = a_0 + a_2 x^2; \quad \text{etc}$$

Innsetting av  $\psi = v \cdot e^{-x^2/2}$  i TUSL gir

$$v'' - 2xv' + (\epsilon - 1)v = 0$$

hvoretter innsetting av  $v(x) = \sum_k a_k x^k$  gir rekursjonsformelen

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\epsilon}{(k+1)(k+2)} \cdot a_k; \quad k = 0, 1, 2, \dots$$



- Potensrekka må bryte av. Hvis ikke, er  $a_{k+2} \approx a_k \cdot 2/k$  for  $k \gg 1$ ; dvs  $\psi(x) \sim \exp(x^2)$ ; dvs  $\Psi(x) \sim \exp(x^2/2)$ ; ikke fysisk akseptabelt.

- Kun like potenser av  $x$  inngår i  $\Psi_0, \Psi_2, \Psi_4, \dots$  og kun odde i  $\Psi_1, \Psi_3, \Psi_5, \dots$ . Hvis ikke, bryter potensrekka ikke av.

- Endelig polynom dersom  $a_{n+2} = 0 \cdot a_n$ ; dvs  $2n+1 - \epsilon_n = 0$ ; dvs kvantisert energi:  $\epsilon_n = 2n+1$ ;  $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ ;  $n=0,1,2,\dots$

- Tilhørende normerte og ortogonale bølgefunksjoner:

$$\Psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{\exp(-m\omega q^2/2\hbar)}{\sqrt{2^n \cdot n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q\right)$$

Hermite-polynomer:

$$H_0(x) = 1; \quad H_1(x) = 2x; \quad H_2(x) = 4x^2 - 2;$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x; \quad H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_j(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nj}$$

$$H_n(x) = e^{x^2} \left(-\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2}; \quad \text{Rodrigues' formel}$$

(Se f.eks. wikipedia)



- Sannsynlighetsfordeling, klassisk og kvantemekanisk:

Med QM:  $g_n(q) = \frac{dP_n}{dq} = |\psi_n(q)|^2$ ;  $n=0,1,2,\dots$

Klassisk:  $dP = \frac{dt}{T}$  = andel av tida tilbrakt mellom  $q$  og  $q+dq$ ;  $T = 2\pi/\omega$  = perioden;  $dt = 2 \cdot dq/v$

$q(t) = A \cos \omega t$ ;  $v(q) = \sqrt{2K/m} = \sqrt{2E/m - 2V/m}$

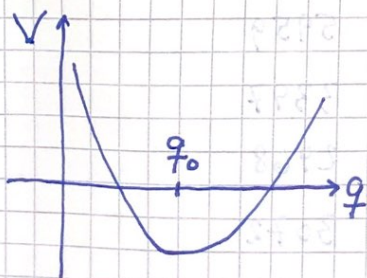
Her er  $2E/m = \omega^2 A^2$  og  $2V/m = \omega^2 q^2$  slik at

$v(q) = \omega \sqrt{A^2 - q^2}$ ; dermed er  $g(q) = \frac{dP}{dq} = \frac{1}{\pi \sqrt{A^2 - q^2}}$

Programmet `harmosc_2021.py` (eller ditt eget program) viser hvordan den kvantemekaniske  $g_n(q)$  - midtst over de raskte oscillasjonene - ligner mer og mer på den klassiske  $g(q)$ , for økende verdier av  $n$ .

- Hvorfor er harmonisk oscillator så viktig?

Pga utallige anvendelser: Svingninger omkring likevekt av atomer i molekyler og faste stoffer.  $\vec{E}(t)$  og  $\vec{B}(t)$  i e.m. bølge. Nær likevekt er de fleste potensialer med god tilnærming harmoniske:



$$V(q) \approx V(q_0) + \frac{1}{2}(q-q_0)^2 V''(q_0)$$

dvs harm. osc. med "fjærkonstant"

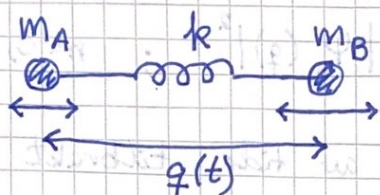
$$k = m\omega^2 = V''(q_0)$$

$$\Rightarrow \text{energivåver } E_n = V(q_0) + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots)$$



Eks: Toatomige molekyler



$q_0$  = bindingslengde i likevekt  
 $q(t)$  = " " ved tid  $t$

$$F_A = \pm k(q - q_0) \xrightarrow{N_2} m \frac{d^2}{dt^2}(q - q_0) = -k(q - q_0)$$

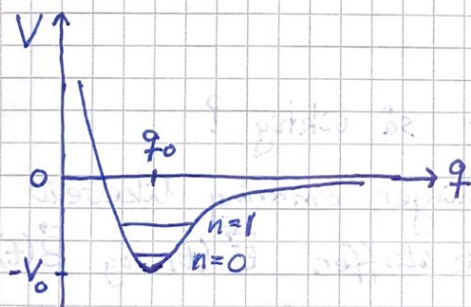
$\Rightarrow$  Harm. osc. med "reduisert masse"

gitt ved  $1/m = 1/m_A + 1/m_B$

Et mer realistisk potensial er (f.eks) Morse-potensialet

$$V(q) = V_0 \{ [1 - e^{-\alpha(q - q_0)}]^2 - 1 \}$$

med sterk frastøtning mellom atomene for  $q < q_0$   
 og svakere tiltrekning for  $q > q_0$



Nær likevekt:

$$V(q) \approx -V_0 + \frac{1}{2} \alpha^2 V_0 (q - q_0)^2$$

$$\Rightarrow E_n = -V_0 + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$

med  $\omega = \alpha \sqrt{2V_0/m}$

| Molekyl | $m$ (u) | $k$ (N/m) | $\hbar \omega$ (meV) | $\hbar \omega / k_B$ (K) |
|---------|---------|-----------|----------------------|--------------------------|
| $H_2$   | 0.5     | 520       | 514                  | 5959                     |
| $N_2$   | 7       | 2316      | 293                  | 3397                     |
| $O_2$   | 8       | 2021      | 256                  | 2968                     |
| CO      | 6.86    | 1870      | 265                  | 3072                     |
| HCl     | 0.97    | 482       | 357                  | 4139                     |

.... mens  $k_B T \approx 26$  meV ved 300 K.



$C_V$  for toatomig gass

Midlere energi pr molekyl:

$$\langle E \rangle = \langle K_{\text{trans}} \rangle + \langle K_{\text{rot}} \rangle + \langle E_{\text{vib}} \rangle$$

Ekipartisjonsprinsippet (EPP) gir

$$\langle K_{\text{trans}} \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

$$\langle K_{\text{rot}} \rangle = \frac{2}{2} k_B T \quad \left[ \text{Men se QM rotator senere!} \right]$$

pga hhv 3 og 2 kvadratiske frihetsgrader.

$$\langle E_{\text{vib}} \rangle = \langle (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega + \langle n \rangle \hbar \omega$$

Fra før (se Plancks strålingslov):

$$\langle n \hbar \omega \rangle = \langle n \rangle \hbar \omega = \frac{1}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} \cdot \hbar \omega$$

Varmekapasitet pr molekyl:

$$C_V = \frac{d \langle E \rangle}{dT} = \frac{3}{2} k_B + \frac{2}{2} k_B + \hbar \omega \frac{d}{dT} \left\{ e^{\hbar \omega / k_B T} - 1 \right\}^{-1}$$

Klassisk grense:  $k_B T \gg \hbar \omega$

Da er  $e^{\hbar \omega / k_B T} - 1 \approx \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ , og  $C_V^{\text{vib}} \approx k_B$ ,

dvs  $C_V \approx \frac{7}{2} k_B$  pr molekyl; dvs

molar varmekap.  $\frac{7}{2} R$  ( $R = k_B N_A$ )



(53)

Men  $\hbar\omega$  er typisk noen hundre meV for de fleste toatomige molekyler, mens  $k_B T \approx 25$  meV ved 300 K.

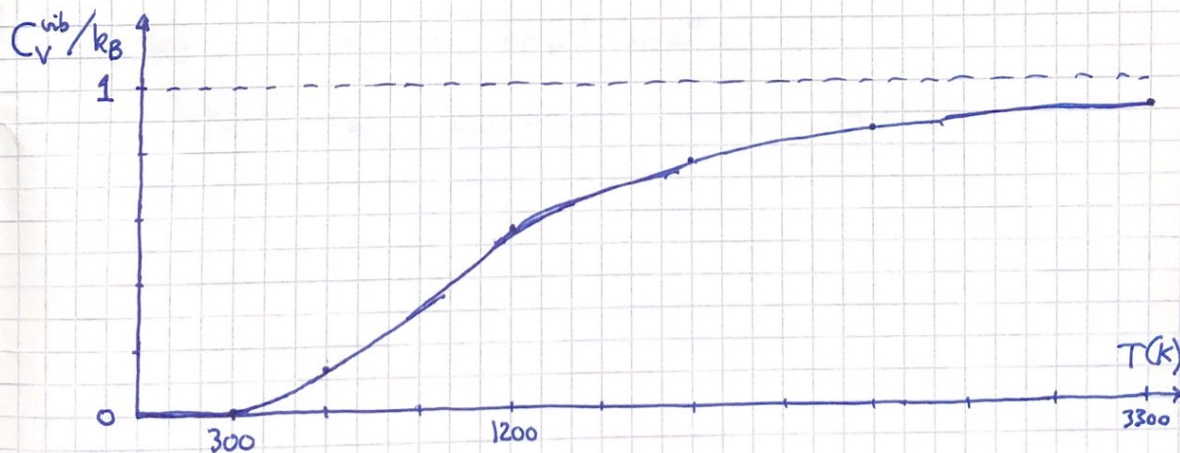
$$\frac{d}{dT} \left\{ e^{\hbar\omega/k_B T} - 1 \right\}^{-1} = - \left\{ e^{\hbar\omega/k_B T} - 1 \right\}^{-2} \cdot e^{\hbar\omega/k_B T} \cdot \left( - \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \right)$$

$$\frac{e^x}{[e^x - 1]^2} = \frac{e^x}{[e^{x/2} (e^{x/2} - e^{-x/2})]^2} = \frac{1}{[2 \sinh(x/2)]^2}$$

$$\Rightarrow C_v^{vib} = k_B \cdot \left\{ \frac{\hbar\omega/k_B T}{2 \sinh(\hbar\omega/2k_B T)} \right\}^2$$

Eks: For luft ( $N_2$ ,  $O_2$ ) er  $\hbar\omega/k_B$  ca 3300 K.

Da er  $C_v^{vib} = 0.002 k_B$  ved 300 K, 0.552 ved 1200 K og 0.921 ved 3300 K.



Ved lav temperatur (f.eks. romtemp. 300 K) er de aller fleste molekylene i luft i grunntilstanden mht vibrasjonsenergien ( $\langle n \rangle \approx 0$ ;  $\langle E_{vib} \rangle \approx \frac{1}{2} \hbar\omega$ ). En liten økning i  $T$  endrer praktisk telt ikke på dette;  $C_v^{vib} \approx 0$ .



09.08.17

- (16) Partikkel med masse  $m$  i  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ .  
Hva er  $E$  i 3. eksiterte tilstand?

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega ; n=3 \Rightarrow \underline{\underline{\frac{7}{2}\hbar\omega}}$$

- (17) Hva er klassisk tillatt område i 2. eksiterte tilstand?

$$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega \geq \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \Rightarrow \underline{\underline{|x| \leq \sqrt{\frac{5\hbar}{m\omega}}}}$$

- (18)  $S_n(x) = |\psi_n(x)|^2 \sim e^{-x^2/\xi^2}$  i klassisk forbudt område. Hva er  $\xi$  i 2. eksiterte tilstand?

For alle stasjonære tilstander er  $\psi_n(x)$  prop. med den samme faktoren  $\exp(-m\omega^2 x^2/2\hbar)$ , dvs

$$|\psi_n(x)|^2 \sim \exp(-m\omega^2 x^2/\hbar) \Rightarrow \underline{\underline{\xi = \sqrt{\hbar/m\omega}}}$$



06.08.18

(55)

11-14:  ${}^7\text{Li} {}^{133}\text{Cs}$  oppgis å vibrere med frekvens 5.54 THz

(11) Hva er fjærkonstanten?

$$k = m\omega^2 \text{ med } \omega = 2\pi f \text{ og } m = \left(\frac{1}{7u} + \frac{1}{133u}\right)^{-1} = 6.65u$$

[m var oppgitt her; blir kanskje ikke oppgitt i 2021...]

$$\text{Dermed: } k = 6.65 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \cdot 4\pi^2 \cdot (5.54 \cdot 10^{12})^2 \frac{\text{N}}{\text{m}} = \underline{\underline{13.4 \text{ N/m}}}$$

(12) Hva er energien til et foton som eksiterer LiCs fra grunntilstanden til 1. eksiterte vibrasjonstilstand?

$$\Delta E = \hbar\omega = 1.05 \cdot 10^{-34} \cdot 2\pi \cdot 5.54 \cdot 10^{12} / 1.6 \cdot 10^{-22} \text{ meV} = \underline{\underline{23 \text{ meV}}}$$

(13) Hva er  $P(n=1)/P(n=0) = \exp(-\hbar\omega/k_B T)$  ved 300 K?

$$\exp(-23 \text{ meV} / 25 \text{ meV}) \approx \underline{\underline{0.4}} \quad (\text{Så for en gass av slike}$$

molekyler er  $C_v^{\text{vib}} \approx k_B$  pr molekyl.)

(14) Dissosiasjon  $\text{LiCs} \rightarrow \text{Li} + \text{Cs}$  beskrives godt med

$$\text{Morse-pot. } V(R) = V_0 [1 - \exp[-\alpha(R-R_0)]]^2.$$

Dissosiasjonsenergien er 1.1 eV ( $= V_0 - \frac{1}{2}\hbar\omega \approx V_0$ )

Hvilken verdi for  $\alpha$  vil gi  $f = 5.54 \text{ THz}$ ?

$$V(R) \approx V_0 [1 - 1 + \alpha(R-R_0)]^2 = \alpha^2 V_0 (R-R_0)^2 \text{ nær likevekt,}$$

dvs for små utsving. Må da ha  $\alpha^2 V_0 = \frac{1}{2}m\omega^2 = 2\pi^2 m f^2$

slik at

$$\alpha = \pi f \sqrt{2m/V_0} = \pi \cdot 5.54 \cdot 10^{12} \sqrt{2 \cdot 6.65 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} / 1.1 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} \text{ m}^{-1}$$

$$= 6.16 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} \approx \underline{\underline{6.2 \text{ nm}^{-1}}}$$



25-26: Fri partikkel på diskretisert  $x$ -akse.

$$V_n = 0 \text{ overalt } (-\infty < n < \infty).$$

TUSL:

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} (\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}) = E\psi_n ; a = \Delta x = x_{n+1} - x_n$$

(25) Anta prøveløsning  $\psi_n = e^{ikx_n} = e^{ikna}$  og bestem dispersjonsrelasjonen  $E(k)$ .

Innsetting av  $\psi_n = e^{ikna}$  gir

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} (e^{ika} - 2 + e^{-ika}) e^{ikna} = E(k) e^{ikna}$$

$$\Rightarrow E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} (1 - \cos ka) = E_0 (1 - \cos ka)$$

[Det var oppgitt at  $E(k) = E_0(1 - \cos ka)$ ]

Hvis  $E_0 = 1.0 \text{ eV}$  og  $a = 4.0 \text{ \AA}$ , hva er partikkelens masse  $m$ ?

$$m = \hbar^2 / E_0 a^2 = (1.05 \cdot 10^{-34})^2 / (1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 4.0^2 \cdot 10^{-20}) \text{ kg}$$

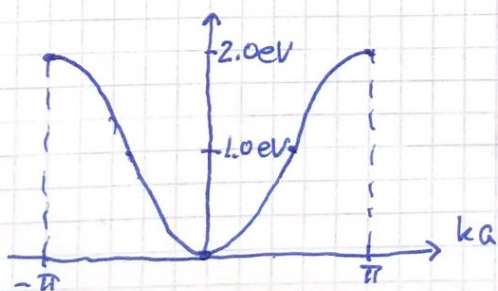
$$= 4.31 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = \underline{\underline{0.47 m_e}}$$

(26) Hva er båndbredden  $E_{\max} - E_{\min}$ ?

$$E_{\max} = E_0 \cdot (1+1) = 2E_0 \text{ for } ka = \pm\pi, \text{ dvs } k = \pm\pi/a$$

$$E_{\min} = E_0 \cdot (1-1) = 0 \text{ for } k = 0$$

$$\Rightarrow \text{båndbredde } 2E_0 = \underline{\underline{2.0 \text{ eV}}}$$

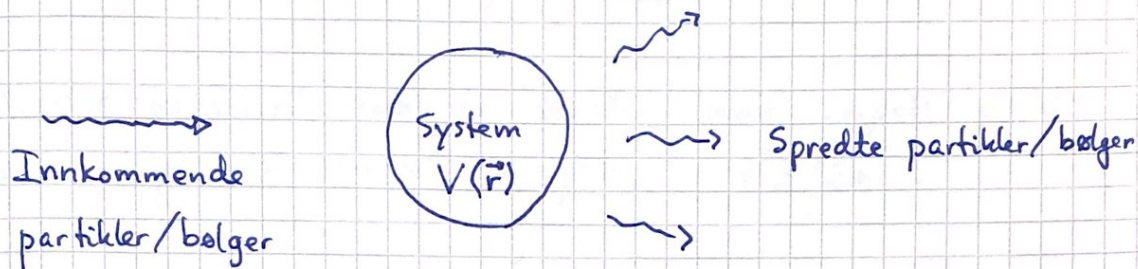


Nær  $k=0$  er  $\cos ka \approx 1 - \frac{1}{2}(ka)^2$   
 slik at  $E(k) \approx \hbar^2 k^2 / 2m$ , dvs  
 fri partikkel med masse  $m$  og  
 impuls  $p = \hbar k$ .



## Spredning i én dimensjon

Spredning har mange anvendelser:



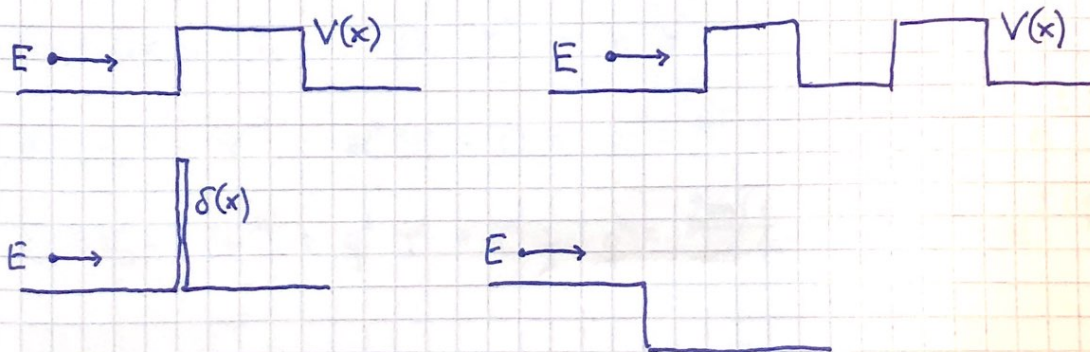
Røntgen (fotoner), ultralyd (lydbølger), TEM (elektronmikroskop), ARPES (angle resolved photo-emission spectroscopy; fotoelektrisk effekt), SANS (small-angle neutron scattering),...

Spredning i fysikkemner:

|          |                             |      |
|----------|-----------------------------|------|
| TFY 4345 | Klassisk mekanikk           | (3H) |
| TFY 4220 | Faste stoffers fysikk       | (3V) |
| TFY 4205 | Kvantemekanikk 2            | (4H) |
| TFY 4320 | Fysikk i medisinsk bildning |      |

⋮

TFY 4215: Enkle modellpotensialer i 1D; elastisk spredning.





Bruker firkantbarriere som konkret eksempel, dvs

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & ; \quad 0 < x < L \\ 0 & ; \quad \text{ellers} \end{cases}$$

Sender partikkel inn fra venstre, med impuls  $p = \hbar k$  og energi  $E (=K) = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$ :



Spredning med to mulige utfall,  
refleksjon med sanns.  $R$

transmisjon med sanns  $T = 1 - R$

Bølge inn:  $\psi_i(x) = e^{ikx}$

Bølge refl.:  $\psi_r(x) = r e^{-ikx}$

$\Rightarrow$  Bølgefunksjon for  $x < 0$ :

$$\psi(x) = \psi_i(x) + \psi_r(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}$$

Bølge transm.:  $\psi_t(x) = t e^{ikx} \quad (x > L)$

$$\text{For } 0 < x < L: -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V_0 \psi = E \psi$$

$$E < V_0: \psi'' - \kappa^2 \psi = 0; \quad \kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}; \quad \psi \sim e^{\pm \kappa x}$$

$$E > V_0: \psi'' + q^2 \psi = 0; \quad q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}; \quad \psi \sim e^{\pm i q x}$$



Bevaring av sannsynlighet :

$$\text{Sanns. strøm inn} = \text{Sanns. strøm ut}$$

$$j_i = |j_r| + j_t \quad (j_r < 0, \text{ mot venstre})$$

$$\text{med } j = \text{Re} \left\{ \psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} \psi \right\}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Transm. sanns. : } T = j_t / j_i \\ \text{Refl. sanns. : } R = |j_r| / j_i \end{array} \right\} T + R = 1$$

De ulike sanns. strømmene :

$$j_i = \text{Re} \left\{ e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik e^{ikx} \right\} = \frac{\hbar k}{m}$$

$$j_r = \text{Re} \left\{ r^* e^{ikx} \frac{\hbar}{im} (-ik) r e^{-ikx} \right\} = -|r|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

$$j_t = \text{Re} \left\{ t^* e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik t e^{ikx} \right\} = |t|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

$$\Rightarrow R = |r|^2, \quad T = |t|^2$$

Skarp energi E innebærer stasjonær (sprednings-) tilstand med tidsuavhengig  $\rho$  og posisjonsuavhengig  $j$  :

$$\begin{aligned} j(x < 0) &= \text{Re} \left\{ (\bar{e}^{-ikx} + r^* e^{ikx}) \frac{\hbar}{im} ik (e^{ikx} - r e^{-ikx}) \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2) + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \{ r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \} \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - R) + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \{ 2i \text{Im}(r^* e^{2ikx}) \} \\ &= \frac{\hbar k}{m} \cdot T = j(x > L) \quad ; \quad \text{OK!} \end{aligned}$$



Anta, for  $0 < x < L$ ,  $\Psi(x)$  på formen

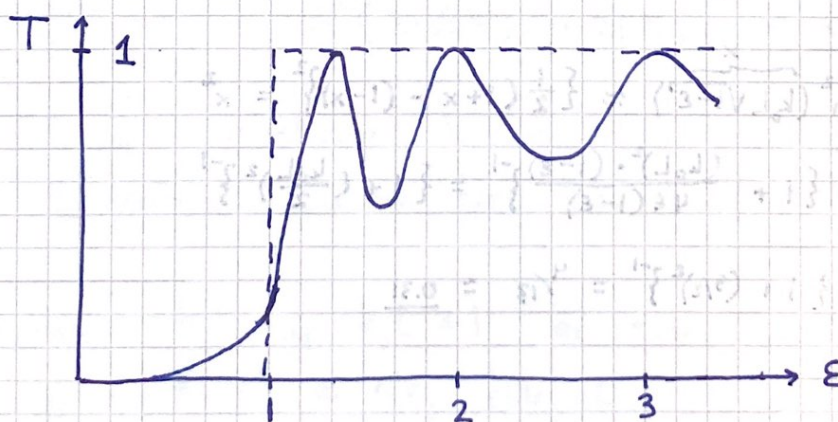
$$\Psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} & ; E < V_0 \\ a e^{iqx} + b e^{-iqx} & ; E > V_0 \end{cases}$$

Kontinuerlige  $\Psi$  og  $\Psi'$  i  $x=0$  og  $x=L$  gir

$$\left[ 1 + \frac{\sinh^2(k_0 L \sqrt{1-E'})}{4E(1-E)} \right]^{-1} ; E < 1$$

$$T = |t|^2 = \left[ 1 + \frac{\sin^2(k_0 L \sqrt{E-1'})}{4E(E-1)} \right]^{-1} ; E > 1$$

Her er  $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$  og  $E = E/V_0$



Klassisk (----) :  $T = \begin{cases} 0 & ; E < 1 \\ 1 & ; E > 1 \end{cases}$

Belyser noen poeng med konkret eksempel  
a la tidligere gitte eksamensoppgaver.



Eks: Anta  $V_0 = 230 \text{ meV}$ ,  $m = 0.067 m_e$   
og  $L = 47 \text{ \AA}$ .

(61)

- Bestem  $T$  når  $E = 23 \text{ meV}$ .
- Vis at  $T \approx 16\varepsilon \cdot \exp(-2k_0L)$  når  $\varepsilon \ll 1$  ( $E \ll V_0$ )  
og  $k_0L \gg 1$ .
- Hvor stor blir feilen med  $T$  som i b) og  $E$  som i a) ?
- Hva er  $T$  når  $E = V_0$  ?
- Hvilke verdier av  $K$  ( $= E - V_0$ ) og  $\lambda$  på  $0 < x < L$   
gir  $T = 1$  ?

---

a) Her er  $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar = 0.638 \text{ nm}^{-1}$ , dvs  
 $k_0L = 0.638 \cdot 4.7 = 3.00$ , og  $\varepsilon = E/V_0 = 0.1$   
 $\Rightarrow T = \left\{ 1 + \sinh^2(3 \cdot \sqrt{0.9}) / 4 \cdot 0.1 \cdot 0.9 \right\}^{-1} \approx \underline{\underline{0.0049}}$

[Poeng: Partikkelen har en viss sanns. for å  
tunnelere gjennom det klassisk forbudte området.]

b) Hvis  $\varepsilon \ll 1$  og  $k_0L \gg 1$ , er  $\sinh(k_0L\sqrt{1-\varepsilon}) \approx \frac{1}{2}e^{k_0L} \gg 1$   
og  $4\varepsilon(1-\varepsilon) \approx 4\varepsilon$ , slik at  
 $T \approx \left\{ \frac{1}{16\varepsilon} e^{2k_0L} \right\}^{-1} = 16\varepsilon \cdot e^{-2k_0L} \ll 1$  [Poeng:  
Enklere formel.]

c) Her:  $T \approx 1.6 \cdot \exp(-6) \approx \underline{\underline{0.0040}}$ ,  
en feil på ca 18%. (Skyldes først og fremst at vi  
satte  $\sqrt{1-\varepsilon} \approx 1$  i argumentet til sinh-funksjonen.)

d) Når  $\varepsilon \rightarrow 1$ , er  $\sinh^2(k_0L\sqrt{1-\varepsilon}) = \sin^2(k_0L\sqrt{\varepsilon-1}) = (k_0L)^2 \cdot |\varepsilon-1|$   
slik at  $T = \left\{ 1 + (k_0L/2)^2 \right\}^{-1}$ . Med  $k_0L = 3$  blir  $T = \underline{\underline{4/13}}$



$$e) \quad T=1 \text{ når } E>V_0 \text{ og } \sin(k_0 L \sqrt{E-V_0}) = 0 \quad (62)$$

$$\Rightarrow k_0 L \sqrt{E-V_0} = n\pi \quad (n=1,2,\dots)$$

$$\Rightarrow \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \left(\frac{E}{V_0} - 1\right) = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

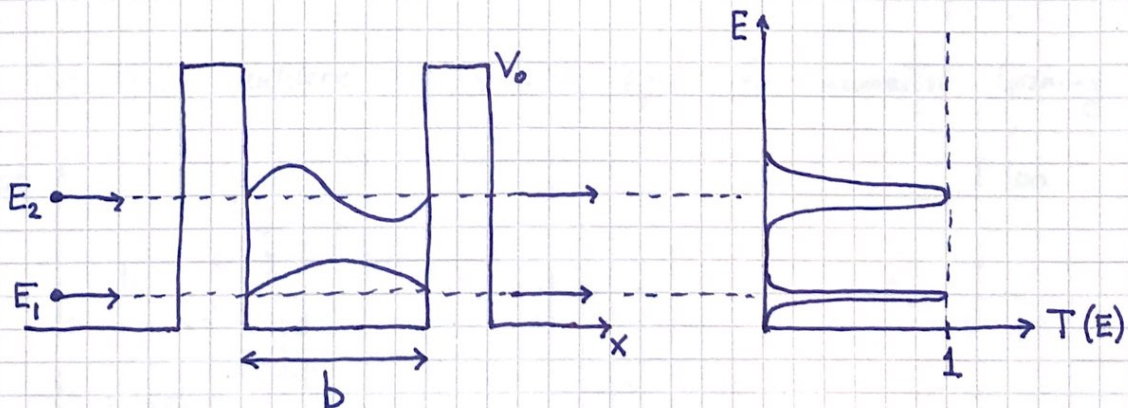
$$\Rightarrow E - V_0 = \underline{\underline{K = \frac{(n\pi\hbar/L)^2}{2m}}}$$

$$\Rightarrow p = \hbar/\lambda = 2\pi\hbar/\lambda = n\pi\hbar/L$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\lambda_n = 2L/n}}$$

Poeng: Stående bølger på bariereintervallet  $0 < x < L$ .  
Resonansfenomen!

Resonant tunnelering:



Resonans og stående bølger i "brønnen" mellom barrierene gir  $T=1$  når  $\lambda_n = 2b/n$ , dvs

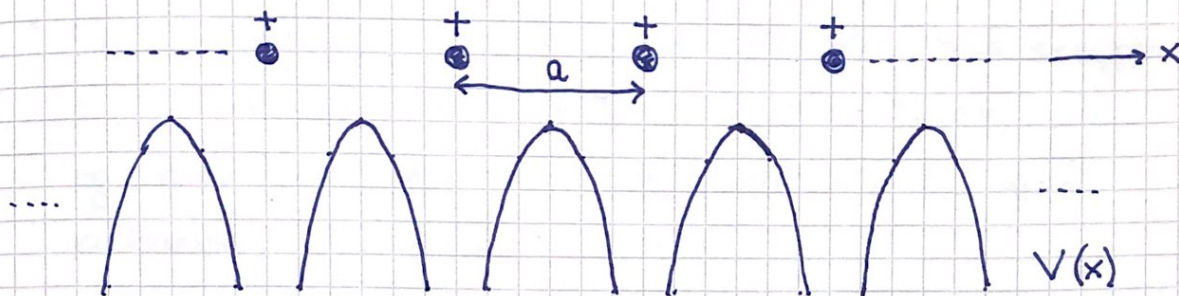
$$E_n = K_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{\lambda_n}\right)^2 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m b^2} \quad (n=1,2,\dots)$$



(63)

# Krystaller, periodisk potensial, og realisering av barrierer og brønner i halvledere

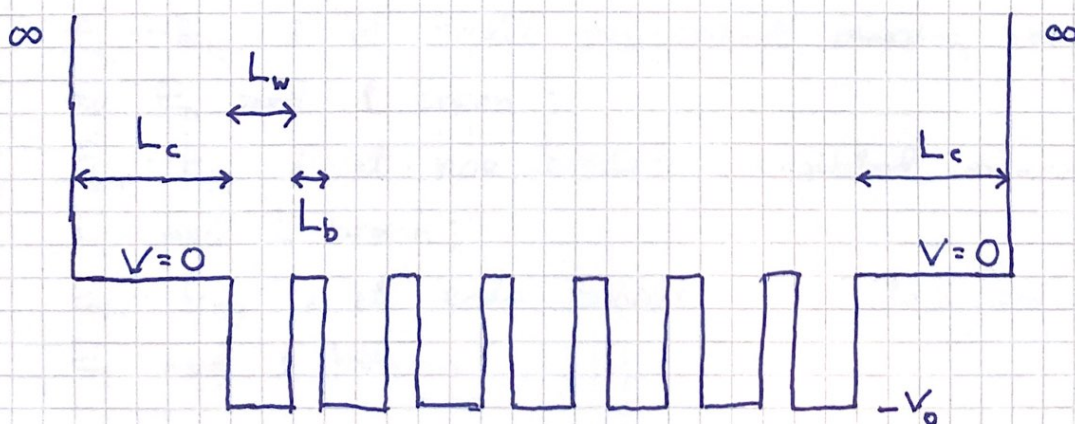
Et elektron i en regulær krystall "ser" et periodisk potensial:



$$\text{dvs } V(x + j \cdot a) = V(x) \quad ; \quad -\infty < j < \infty$$

$a$  = gitterkonstant

En enda enklere 1D modell, egnet for numerisk løsning:



$$\text{gitterkonstant } a = L_w + L_b$$

$N_A$  = antall "atomer" (dvs brønner)

$$L_k \approx N_A \cdot a = \text{krystallens utstrekning}$$

$$[\text{strengt tatt: } L_k = N_A \cdot L_w + (N_A - 1) \cdot L_b]$$



(64)

Programmet `periodisk.py` plottet  $V(x)$  og  $E$  for bundne tilstander ( $E < 0$ ), samt en "valgbar"  $\Psi(x)$ , med  $V_0 = 14 \text{ eV}$ ,  $L_w = 4 \text{ \AA}$ ,  $L_b = 2 \text{ \AA}$  (dvs  $a = 6 \text{ \AA}$ ) og  $L_c = 50 \text{ \AA}$ .

Noen observasjoner:

- $N_A = 1$  brønn gir her 3 bundne tilstander, med energier  $E_0 = -12.54 \text{ eV}$ ,  $E_1 = -8.33 \text{ eV}$ ,  $E_2 = -2.16 \text{ eV}$  og tilhørende  $\Psi_0$ ,  $\Psi_1$  og  $\Psi_2$  med hhv 0, 1 og 2 nullpunkter, som ventet.
- $N_A = 2$  brønner gir  $2 \cdot 3 = 6$  bundne tilstander, med  $E_0$  og  $E_1$  nær  $-12.54 \text{ eV}$  ( $E_0$  med 1 brønn);  $E_2$  og  $E_3$  nær  $-8.33 \text{ eV}$  ( $E_1$  —" —);  $E_4$  og  $E_5$  "nær"  $-2.16 \text{ eV}$  ( $E_2$  —" —)
- $N_A = 20$  brønner gir  $20 \cdot 3 = 60$  bundne tilstander, med  $E_0 \dots E_{19}$  i et smalt energibånd omkring verdien av  $E_0$  med 1 brønn;  $E_{20} \dots E_{39}$  i et noe bredere energibånd omkring  $E_1$  med 1 brønn;  $E_{40} \dots E_{59}$  i et enda bredere energibånd omkring  $E_2$  med 1 brønn

Bølgefunksjonene: Periodiske funksjon  $u(x)$ , dvs slik at  $u(x + j \cdot a) = u(x)$ , modulert med stående bølger med bølgelengde  $2L_k$ ,  $L_k$ ,  $2L_k/3$ , ....., dvs:

$$\Psi_n(x) = u(x) \cdot \sin(k_n x) ; \quad k_n = \frac{n\pi}{L_k} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



Med  $N_A \rightarrow \infty$  er sannsynligheten periodisk,

$$|\psi(x+j \cdot a)|^2 = |\psi(x)|^2,$$

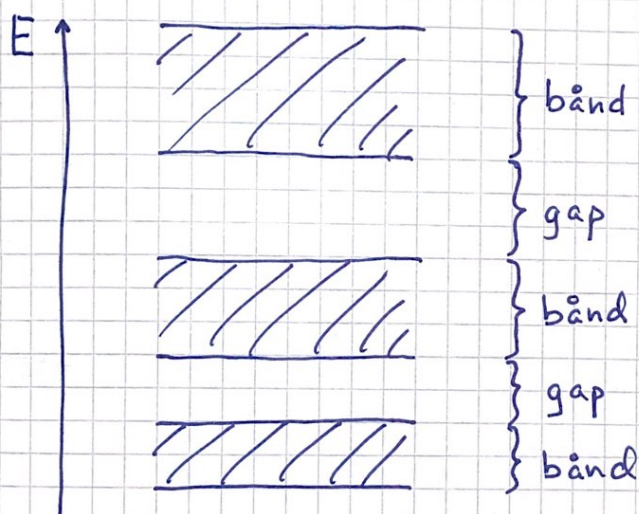
og bølgefunksjonene på formen

$$\psi(x) = e^{ikx} \cdot u(x) ; \quad u(x+j \cdot a) = u(x)$$

(Blochs teorem)

Vi har "nesten plane bølger" og "nesten frie elektroner"!

Kontinuerlige energibånd er adskilt med forbudte energigap:



$N_A$  atomer i krystallen  $\Rightarrow N_A$  romlige tilstander pr energibånd.

Elektroner har "indre dreieimpuls" - spin - som er kvantisert:

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar ; \quad s = 1/2$$

Måling av en komponent, f.eks.  $S_z$ , gir enten  $+\hbar/2$  eller  $-\hbar/2$ .



Dvs: Et elektron kan være i to spinntilstander, (66)

$\chi_+$  (med spinn "opp" ;  $S_z = \hbar/2$ ) og  $\chi_-$  (med spinn "ned" ;  $S_z = -\hbar/2$ ).

Elektronets "totale tilstand" kombinerer den romlige delen (orbitalen)  $\Psi(x)$  og spinndelen  $\chi$  :

$$\Phi(x; +) = \Psi(x) \chi_+$$

$$\Phi(x; -) = \Psi(x) \chi_-$$

Konklusjon :  $2N_A$  unike tilstander pr energibånd

Elektroner er såkalte fermioner, og to fermioner kan ikke okkupere samme enpartikkeltilstand  $\Phi$ .

(Pauliprinsippet; mer senere.)

Systemets grunntilstand tilsvarer lavest mulig total energi.

Oppnås med 2 elektroner i hver orbital (1 med spinn opp og 1 med spinn ned), fra laveste energi og oppover.

Anta energibånd som ikke overlapper.

Anta  $Z$  elektroner pr atom (evt. pr enhetscelle, dvs gruppen med atomer som gjentas periodisk og danner krystallen), dvs totalt  $Z \cdot N_A$  elektroner.

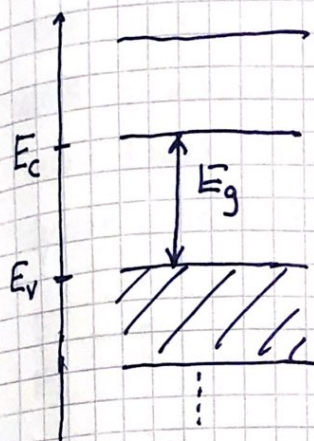
Hvis  $Z$  er oddetall:  $\frac{Z-1}{2}$  fulle energibånd, 1 halvfullt, resten tomme. Materialet er et metall.



Hvis  $Z$  er partall:  $Z/2$  fulle energibånd, resten tomme. (67)

Valensbåndet = øverste bånd med elektroner

Ledningsbåndet = nederste bånd uden elektroner



Conduction band

Båndgapet:  $E_g = E_c - E_v$

Valence band

Isolator hvis  $E_g \gtrsim 4 \text{ eV}$

Halvleder hvis  $E_g \lesssim 4 \text{ eV}$ .

Ved  $T = 0 \text{ K}$  er en halvleder en isolator.

Økende temp.  $T \Rightarrow$  elektroner eksiteres termisk, fra okkuperede tilstande med  $E \approx E_v$ , til ledige tilstande med  $E \approx E_c$ .

Si:  $E_g \approx 1.1 \text{ eV}$

$\Rightarrow$  Ved  $300 \text{ K}$  ( $k_B T = 25 \text{ meV}$ ) er svært få elektroner eksiteret til ledningsbåndet i rent Si.

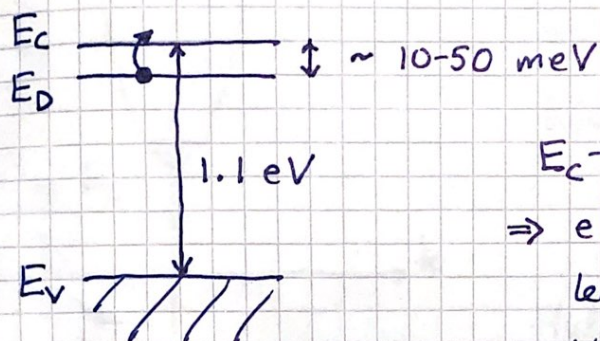


(68)

## Doping av halvledere :

En liten andel av Si-atomene erstattes av atomer med 5 (N, P, As, Sb, Bi) eller 3 (B, Al, Ga, In, Tl) valenselektroner.

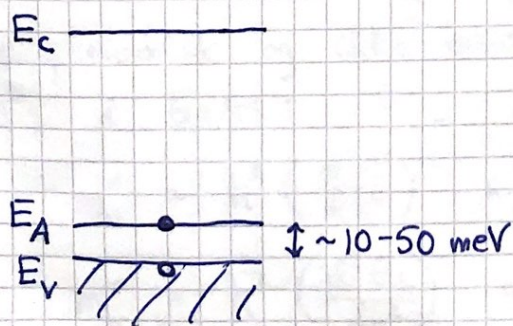
Med N, P, ... : 4 valenselektroner inngår i elektronpar ~~med~~ og danner bindinger med 4 Si-naboer. Nr 5 har høyere energi (dvs: er løst bundet til dopeatomet), typisk bare noen titalls meV under  $E_c$  :



$$E_c - E_D \sim k_B T$$

$\Rightarrow$  elektronet eksiteres lett til ledig tilstand i valensbåndet; blir essensielt et fritt elektron

Med B, Al, ... : De 3 valenselektronene danner bindinger med 3 av 4 Si-naboer. Binding nr 4 dannes ved å ta et elektron fra valensbåndet :



Dopeatomet har en ledig tilstand med energi  $E_A$ , like over  $E_v$

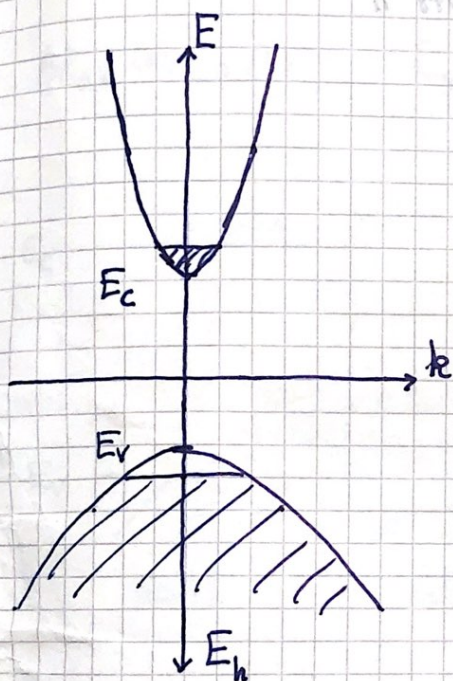
$\Rightarrow$  et elektron eksiteres lett til denne ledige tilstanden, og blir bundet til dopeatomet; etterlater seg et fritt hull i valensbåndet



$E_D$  : Donornivå. Et elektron doneres til ledningsbåndet. (69)

$E_A$  : Akseptornivå. Et elektron aksepteres fra valensbåndet.

Dispersjonsrelasjonen  $E(k)$  er typisk kvadratisk nær  $k=0$  i halvledere, både ved bunnen av ledningsbåndet og ved toppen av valensbåndet; f.eks i GaAs:



Elektroner i tilstander nær bunnen av ledningsbåndet:

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

Hull, dvs ledige tilstander, nær toppen av valensbåndet:

$$E_h(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$$

(økende nedover)

Partiklene er "som frie partikler", men siden potensialet er periodisk og ikke konstant, har de effektive masser  $m^*$ , i GaAs:

$$m_e^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \approx 0.067 m_e$$

$$m_h^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E_h}{dk^2} \right)^{-1} \approx 0.45 m_e$$

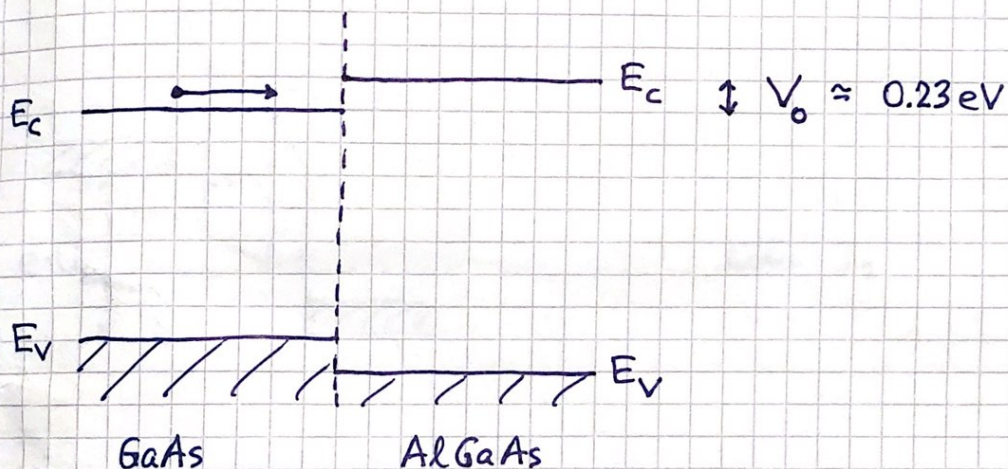


Ulike halvledere har ulike båndgap. Dermed kan tynne <sup>(70)</sup> potensialbarrierer og -brønner (stykkeris konstante potensialer) lages med tynne lag av ulike halvledere som skjøtes sammen.

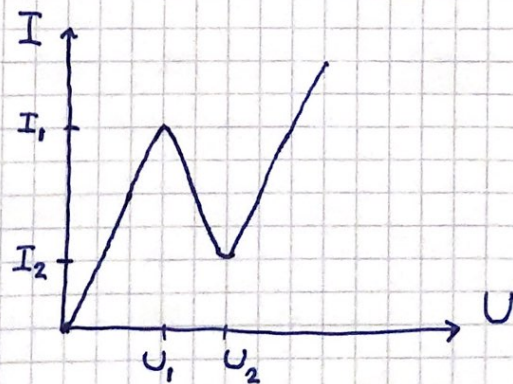
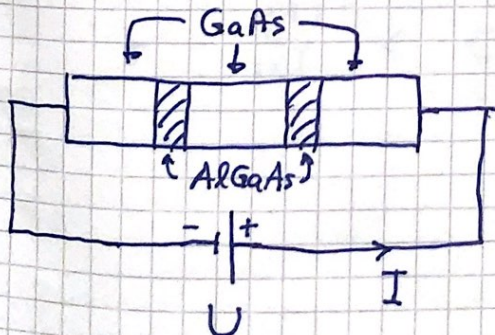
Konkret eksempel:

$$\text{GaAs} : E_g = 1.43 \text{ eV} \quad (\text{ved } 300 \text{ K})$$

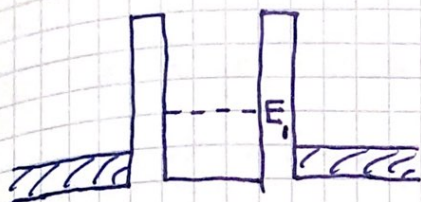
$$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As} : E_g = 1.84 \text{ eV}$$



Resonant tunnelling eksperimentelt:





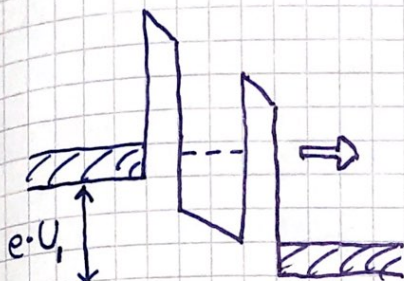


$$T(E_1) \approx 1$$

(71)

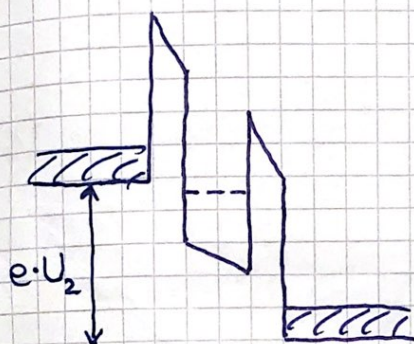
$$U = 0$$

$$I = 0$$



$$U = U_1$$

Stor  $I_1$  pga resonant  
tunnelering



$$U = U_2$$

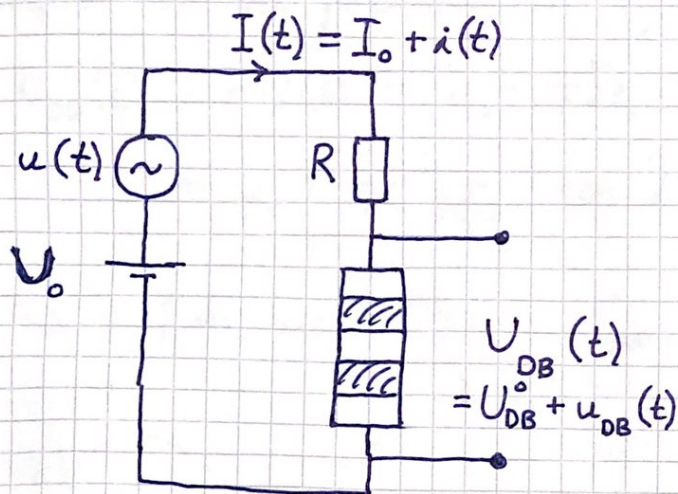
Liten  $I_2$

⇒ Område med negativ differensiell resistans  
mellom  $U_1$  og  $U_2$  :

$$r = \frac{\partial U}{\partial I} < 0$$

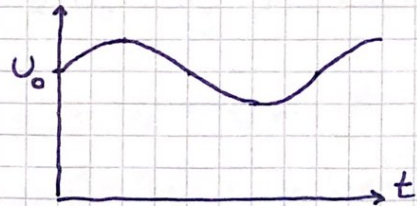


Eks : Spenningsforsterker

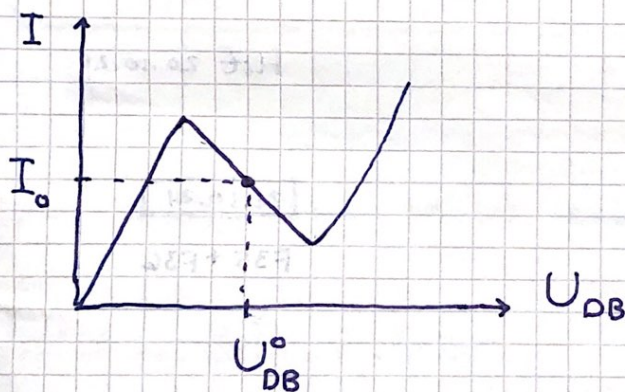


Påtrykt spenning:

$$U(t) = U_0 + u(t) \\ = U_0 + u_0 \sin \omega t$$



Hvis/Når  $u(t) = 0$  :  $U_0 = RI_0 + U_{DB}^0$



Omkring  $U_{DB}^0$  :

$$\frac{\partial I}{\partial U_{DB}} = \frac{1}{r} < 0$$

Kirchhoffs regler gir nå

$$U_0 + u_0 \sin \omega t = R(I_0 + i(t)) + U_{DB}^0 + u_{DB}(t) \\ = RI_0 + Ri(t) + U_{DB}^0 + r i(t) \\ = U_0 + (R+r)i(t)$$

Vå velger  $R < |r|$ , slik at  $u(t) > 0$  gir  $i(t) < 0$  :

$$i(t) = \frac{u_0}{R+r} \sin \omega t = -\frac{u_0}{|r|-R} \sin \omega t$$

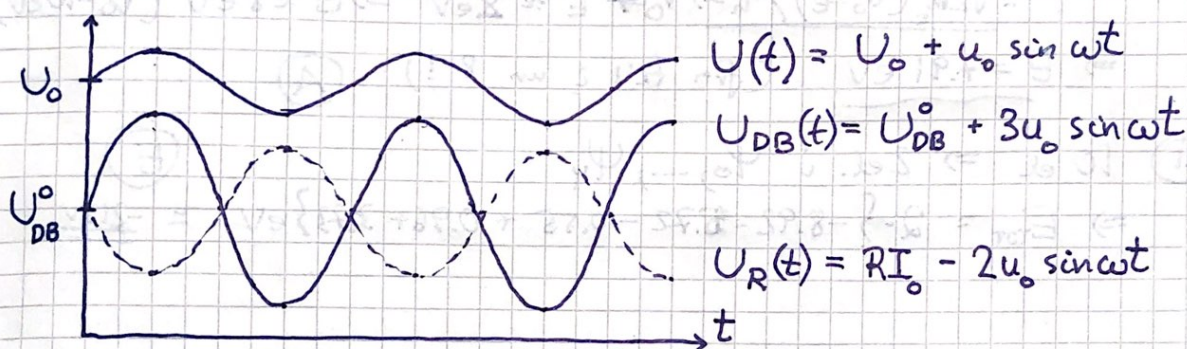


AC-signalet over dobbeltbarrieren blir en forsterket utgave av det påtrykte AC-signalet:

$$U_{DB}(t) = r \cdot i(t) = u_0 \cdot \frac{r}{r+R} \sin \omega t$$

$$= u_0 \cdot \frac{1}{1 - R/|r|} \cdot \sin \omega t$$

Hvis vi f.eks. antar  $RI_0 = U_{DB}^0 = \frac{1}{2} U_0$  og  $R = \frac{2}{3}|r|$ :

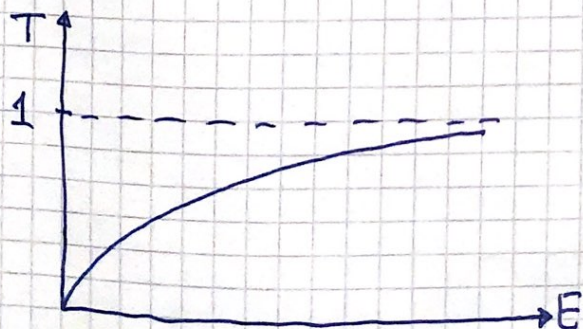


Et par andre eksakt løsbare eksempler:

$\delta$ -barriere, evt.  $\delta$ -brønn

$V(x) = -\beta \delta(x)$ ; brønn når  $\beta > 0$ , barriere når  $\beta < 0$

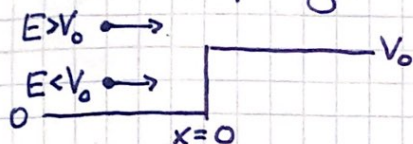
"Matching" av  $\psi$  i  $x=0$ , samt sprang i  $\frac{d\psi}{dx}$  i  $x=0$  (s. 46)  
 gir  $t = (1 + m\beta/ik\hbar^2)^{-1}$  og  $T(E) = (1 + m\beta^2/2E\hbar^2)^{-1}$



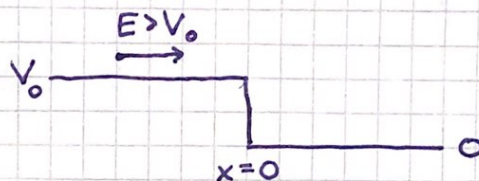
Merk at  $T(E)$  er den samme for brønn og barriere!



(74)

Potentialsprang

eller



Matching av  $\Psi$  og  $d\Psi/dx$  i  $x=0$  gir:

For  $E > V_0$ :  $r = \frac{k-q}{k+q}$ ,  $t = \frac{2k}{k+q}$ ;

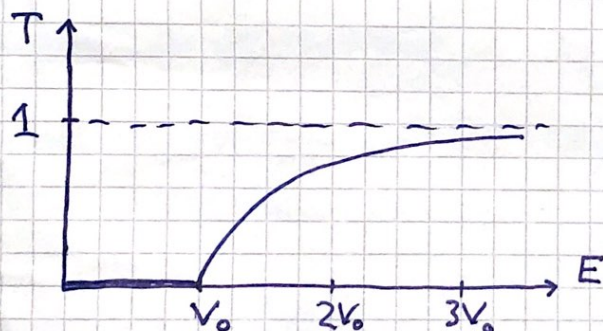
$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$q^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$$

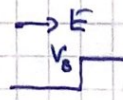
$$R = |j_r|/j_i = |r|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2$$

$$T = j_t/j_i = |t|^2 \cdot q/k = \frac{4kq}{(k+q)^2} \quad (\text{fordi } j_t = |t|^2 \cdot \frac{\hbar q}{m})$$

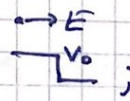
For  $E < V_0$ :  $T=0$  og  $R=1$  (selvfølgelig)



For  $E > V_0$  er  $T(E)$  den samme for



og

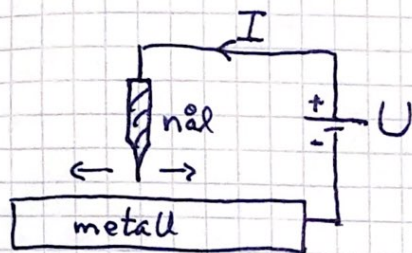


som med  $\delta$ -potensialet.

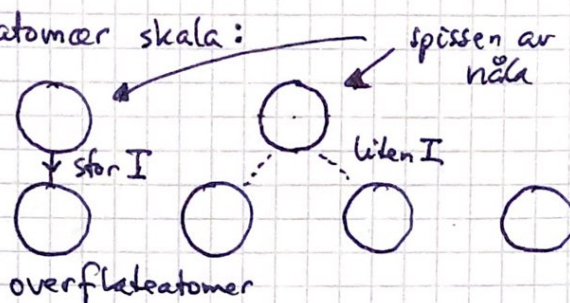


## Noen flere anvendelser:

- STM: Scanning Tunneling Microscope



På atomær skala:



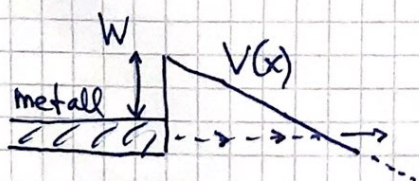
$I \sim T$ , og transm. sanns. avtar eksponentielt med avstanden  $L$  mellom nål og nærmeste overflateatom;  $T \sim \exp(-2\pi e L)$   
Kjører nål horisontelt, måler  $I(x, y)$  og avbilder overflaten med atomær oppløsning!

Nobelprisen i fysikk 1986, Binnig og Rohrer

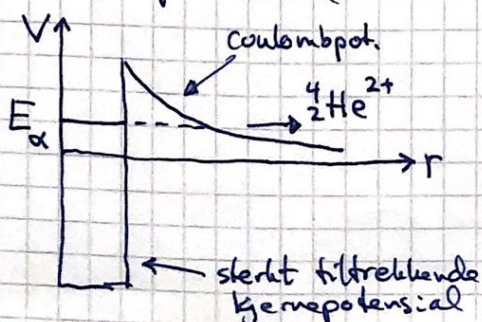
youtube: A boy and his atom

- Feltemisjon: Alternativ til fotol. effekt for å rive elektroner ut av metalloverflate.

$$\vec{E} = -dU/dx = \frac{1}{e} dV/dx$$



- $\alpha$ -stråling: Ustabil atomkjerne sender spontant ut  $\alpha$ -partikkel  
Modellpotensial (Gamow 1928):



Forklæres som tunnelering ut av kjernen, fra metastabil tilstand med energi  $E_\alpha$



## QM i 2D og 3D

(76)

Plan uke 43 - 46 :

- Harmonisk oscillator og partikkel i boks
  - Degenerasjon
  - Dreieimpuls i 2D og 3D
  - Hydrogenatomet
  - Spinn
  - Atomer og molekyler
- 

### Harmonisk oscillator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

TUSL har produktløsninger og separerer i 3 ligninger for 1D harm. osc. :

$$E = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega_y + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z$$

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z)$$

$$\phi_{n_x}(x) = C_{n_x} \exp(-m\omega_x x^2/2\hbar) H_{n_x}(\sqrt{\frac{m\omega_x}{\hbar}} x) \quad \text{osv.}$$

$$n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$



Hvis  $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$  :

(77)

$$V = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 = V(r)$$

det isotrop (kulesymmetrisk, retningssuavhengig) potensial,

med  $E_N = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \hbar \omega = (N + \frac{3}{2}) \hbar \omega$  ;  $N = 0, 1, 2, \dots$

og  $\psi_{n_x n_y n_z} = C \cdot \exp(-m \omega r^2 / 2 \hbar) \cdot H_{n_x}(\sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x) \cdot H_{n_y}(\sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} y) \cdot H_{n_z}(\sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} z)$

### Partikkel i boks

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 < x < L_x, 0 < y < L_y \text{ og } 0 < z < L_z \\ \infty & \text{ellers} \end{cases}$$

TUSL separerer ;  $\psi = 0$  på boksens 6 grenseflater :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) ; n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

Hvis  $L_x = L_y = L_z = L$  (kubisk boks) :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \left( \frac{2}{L} \right)^{3/2} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}$$



## Degenerasjon

(78)

1D : ingen degenerasjon; en egenfunksjon  $\psi_n(x)$   
pr energieigenverdi  $E_n$

2D og 3D : med symmetri i  $V(\vec{r})$  kan flere  
 $\psi$  tilsvare samme  $E$

Degenerasjonsgrad :

$g_N$  = antall tilstander med energi  $E_N$

Eks 1 : 3D isotrop harmonisk oscillator

$$E_N = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega$$

$$g_N = \sum_{n_x=0}^N (N - n_x + 1) \cdot 1 \quad \leftarrow \quad n_z = N - n_x - n_y = 1 \text{ mulig for gitt } n_x, n_y$$

$\uparrow$   
 $n_x = 0, 1, \dots, N$   
 $\uparrow$   
 $n_y = 0, 1, \dots, N - n_x$   
 $= N - n_x + 1$  mulige

$$= \sum_{j=1}^{N+1} j = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

$$g_0 = 1 \quad (\psi_{000})$$

$$g_1 = 3 \quad (\psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001}) \quad \text{osv}$$

Eks 2 : Partikkel i kubisk boks

$$E_N = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot N ; \quad N = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 3, 6, 9, 11, 12, 14, \dots$$

$$g_3 = 1 \quad (\psi_{111}) ; \quad g_6 = 3 \quad (\psi_{211}, \psi_{121}, \psi_{112}) ;$$

$$g_9 = 3 \quad (\psi_{221}, \psi_{212}, \psi_{122}) ; \quad \dots ; \quad g_{14} = 6 ; \quad \dots$$



Eks 3: Spinndegenerasjon for elektroner

(79)

Hver orbital i Eks 1 og 2 kan kombineres med spinn tilstand "opp" ( $\chi_+$ ) eller "ned" ( $\chi_-$ ).

Gir total degenerasjonsgrad

$$g = g_N \cdot g_s = 2g_N$$

$g_N$  = orbital deg. grad

$g_s$  = spinndeg. grad = 2

Eks 4: Grunntilstanden for 20 (ikke-vekselvirkende!) elektroner i kubisk boks med sidekanter 4.0 nm; effektiv masse  $m^* = 0.1m_e$ . Hva er total energi?

Løsn: Energiniivåene er  $E_N = N \cdot E_0$  med

$$N = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \quad \text{og} \quad E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2m^* L^2 = 0.233 \text{ eV}$$

Fylles nedenfra med 2 elektroner i hver orbital  $\psi_{n_x n_y n_z}$ :

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} &= 2 \cdot E_3 + 2 \cdot 3 \cdot E_6 + 2 \cdot 3 \cdot E_9 + 2 \cdot 3 \cdot E_{11} \\ &= E_0 \cdot \{ 6 + 36 + 54 + 66 \} = 162 E_0 = \underline{\underline{37.8 \text{ eV}}} \end{aligned}$$

Eks 5: Hva blir  $E_0$ , og dermed (ca) avstanden mellom energiniivåene, for en makroskopisk kubisk boks, med f.eks.  $L = 1 \text{ mm}$ ?

$$\text{Løsn: } E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2 \cdot 0.1 \cdot m_e \cdot (10^{-3})^2 \quad \text{f} = 3.7 \cdot 10^{-12} \text{ eV}$$

Dvs, essensielt et kontinuerlig energispektrum.



## Tilstandstetthet

(Density of states; DOS)

80

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \text{antall tilstander pr energienhet}$$

$$N(E) = \int_0^E g(E) dE = \text{antall tilstander p\aa intervall\et (0, E)}$$

$$1D: E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

$\Rightarrow$  2 tilstander ( $g_s=2$ ) pr lengdeenhet langs  $n$ -aksen

$$\Rightarrow N_1(E) = 2 \cdot \sqrt{2mL^2 E / \pi^2 \hbar^2} = \# \text{ tilst. p\aa (0, E)}$$

$$\Rightarrow g_1(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \cdot L \cdot E^{-1/2} = \text{DOS i 1D}$$

$$2D: E = (n_x^2 + n_y^2) \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \quad (n_x, n_y = 1, 2, 3, \dots)$$

$\Rightarrow$  2 tilstander ( $g_s=2$ ) pr flateenhet i  $(+, +)$ -kvadranten av  $(n_x, n_y)$ -planet

$$\begin{aligned} \Rightarrow N_2(E) &= 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \pi (n_x^2 + n_y^2) = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot E \\ &= \# \text{ tilst. p\aa (0, E)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow g_2(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot L^2 = \text{DOS i 2D (uavh. av E)}$$

$$3D: E = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 \quad (n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots)$$

$\Rightarrow$  2 tilst. pr volumenhet i  $(+, +, +)$ -oktanten av  $(n_x, n_y, n_z)$ -rommet

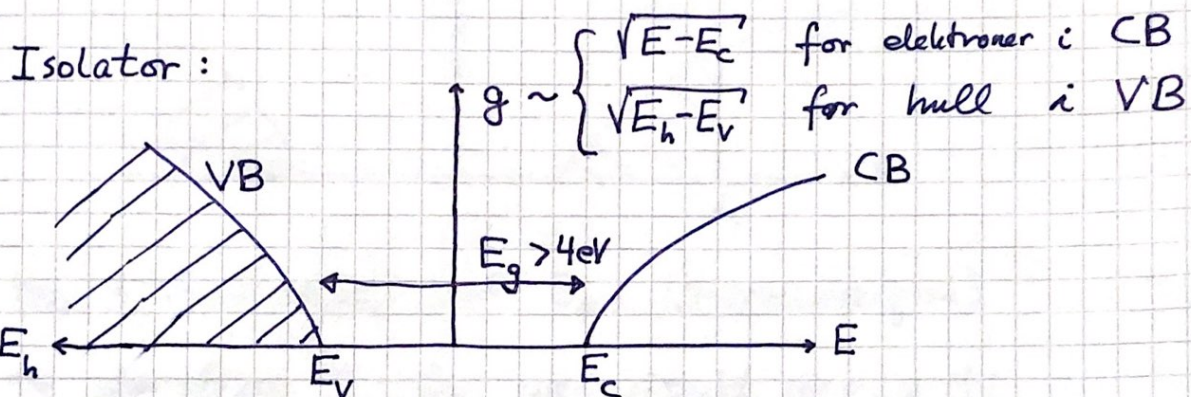
$$\Rightarrow N_3(E) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2} = \frac{\pi}{3} \cdot \left( \frac{2mL^2 E}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$\Rightarrow g_3(E) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot L^3 \cdot E^{1/2} = \text{DOS i 3D}$$



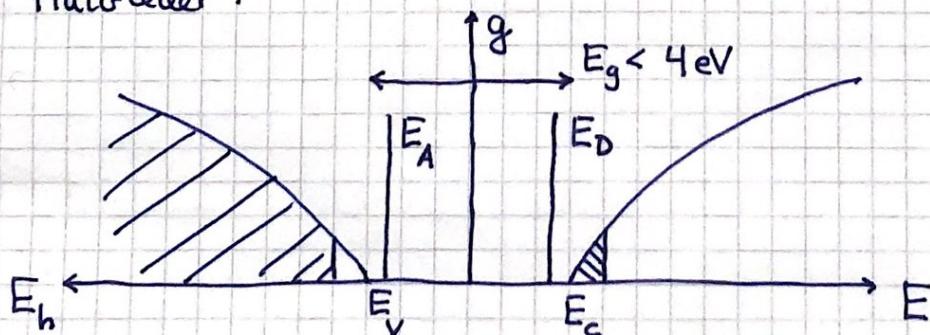
## Energibånd, tilstandstæthet og materialtyper

Elektrisk ledningsevne  $\sigma > 0$  (Ohms lov:  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ ) dersom det er ledige tilstande lige over okkuperede tilstande. Da kan en påtrykt spænding  $U$  (og el. felt  $\vec{E} = -\nabla U$ ) akselerere de mest energirike elektroner (og evt. hullene) og sette i gang en elektrisk strøm  $I$  i materialet - dvs  $\sigma > 0$ .



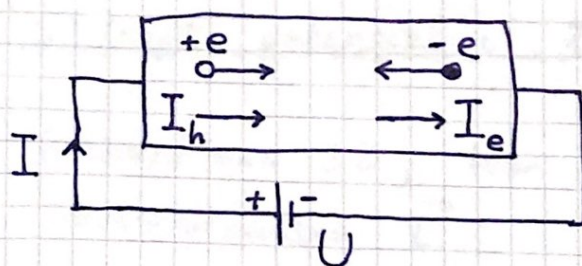
Ingen ledige tilstande for elektroner lige over  $E_v$  (eller for hull med  $E_h \approx E_c$ )  $\Rightarrow I = 0$  selv om  $U > 0$

Halvleder:



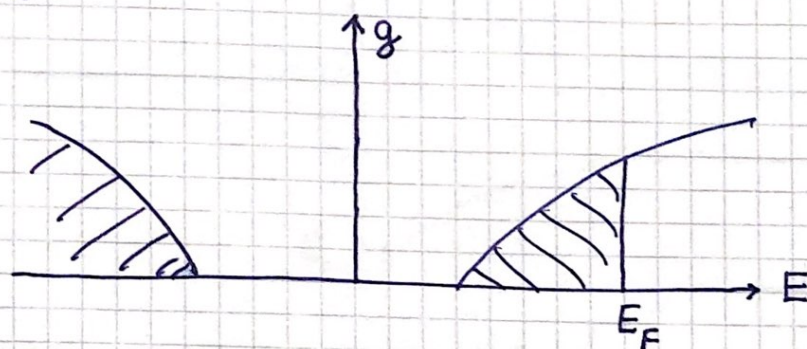
Elektroner og/eller hull eksiteres termisk, fra hhv  $E_D$  til  $E_c$  og fra  $E_A$  til  $E_v$ . Materialet blir "svakt metallisk", med ledige tilstande umiddelbart over okkuperete tilstande,  $\Rightarrow I > 0$  når  $U > 0$





$$I = I_e + I_h$$

Metall:



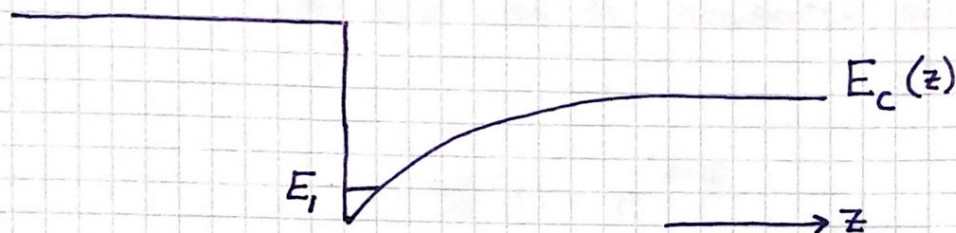
Høy tilstandstetthet ved  $E_F$  (Fermienergien)

$\Rightarrow$  stor strøm  $I$  for liten påtrykt spenning  $U$



## Isotropt potensial i 2D

- Enklere enn 3D; kun en komponent av dreieimpulsen  $\vec{L}$
- Kan realiseres i ulike materialer, f.eks. nær grenseflaten mellom to halvledere:



Elektroner i nivået med energi  $E_i$  "ser" et todimensjonalt potensial  $V(x,y)$ .

Vi har laget en todimensjonal elektrongass (2DEG).  
(Se f.eks. TFY4340 Nanofysikk)

Dersom  $V(\vec{r})$  er isotropt, dvs  $V(r)$ , er gjerne polarkoordinater mest hensiktsmessig.

$$\text{TUSL: } -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi(r, \varphi) + V(r) \Psi(r, \varphi) = E \Psi(r, \varphi)$$

$\mu$  = massen; bruker  $m$  for å angi et kvantetall

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \tan \varphi = y/x, \quad x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi$$

$$\Rightarrow \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \dots = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

(med kjerneregel; se notater og video fra tidligere årsganger)



(84)

Produktløsning,  $\Psi(r, \varphi) = R(r) \Phi(\varphi)$ , og multiplikasjon av TUSL med  $-2\mu r^2/\hbar^2 \Psi$  gir

$$\frac{r^2 R''}{R} + \frac{r R'}{R} - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (V-E) = - \frac{\Phi''}{\Phi} = \text{samme konstant,}$$

som vi "f.eks." kan kalle  $m^2$ . (Her er  $R'' = \frac{d^2 R}{dr^2}$ ,  $\Phi'' = \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2}$ )

Med kjent  $V(r)$  kan  $R(r)$  og tilhørende energier  $E$  bestemmes (for gitt verdi av konstanten  $m$ ).

Vinkeldelen:

$$\Phi'' + m^2 \Phi = 0 \Rightarrow \Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$$

Entydige løsninger,  $\Phi(\varphi+2\pi) = \Phi(\varphi)$ , hvis

$$e^{im\varphi} e^{im \cdot 2\pi} = e^{im\varphi}$$

$$\Rightarrow e^{im \cdot 2\pi} = 1 \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Dette er egenfunksjoner til  $\hat{L}_z$  (og for 2D bevegelse i xy-planet er  $\hat{L} = L_z \hat{z}$ ):

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \hat{z} &= (\vec{r} \times \vec{p})_z = (x \hat{x} + y \hat{y}) \times (p_x \hat{x} + p_y \hat{y}) \\ &= (x p_y - y p_x) \hat{z} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{L}_z &= x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= \dots \begin{matrix} x = r \cos \varphi \\ y = r \sin \varphi \end{matrix} \dots = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z \Phi_m = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{im\varphi} = m\hbar \Phi_m$$

$\Rightarrow$  I 2D isotrop  $V(r)$  er  $L_z$  kvantisert, med egenverdier  $m\hbar$ ;  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$



Kompatible størrelser

Fra før (s.39):  $\Delta A \cdot \Delta B \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$

$\Rightarrow$  A og B kan ha skarpe verdier samtidig  
( $\Delta A = 0$  og  $\Delta B = 0$ ) hvis  $\hat{A}$  og  $\hat{B}$  kommuterer.

Da er A og B kompatible størrelser.

Hvis  $\Delta A = 0$  og  $\Delta B = 0$ , er partikkelen i en stasjonær tilstand  $\Psi$  som er egenfunksjon til  $\hat{A}$  og  $\hat{B}$ :

$$\hat{A}\Psi = A\Psi \quad \text{og} \quad \hat{B}\Psi = B\Psi$$

Dvs: Når  $\hat{A}$  og  $\hat{B}$  kommuterer, har de felles egenfunksjoner.

Eks: Isotrop  $V(r)$  i 2D

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V(r)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

$\Rightarrow$  Partikkelen kan ha skarp E og  $L_z$  samtidig.

Felles egenfunksjoner for  $\hat{H}$  og  $\hat{L}_z$ :

$$\Psi(r, \varphi) = R(r) \Phi(\varphi) = R(r) e^{im\varphi}$$



Symmetri og paritet

$$\hat{P} \Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r})$$

dvs paritetsoperatoren  $\hat{P}$  speiler  $\Psi$  gjennom origo.

Hvis  $\hat{P} \Psi(\vec{r}) = p \Psi(\vec{r})$  med  $p=1$  (like paritet) eller  $p=-1$  (odde paritet), er  $\Psi$  egenfunksjon til  $\hat{P}$ .

Speiling gjennom origo:

$$1D : x \rightarrow -x$$

$$2D : \begin{aligned} x, y &\rightarrow -x, -y \\ r, \varphi &\rightarrow r, \varphi + \pi \end{aligned} \quad (\text{polarkoord.})$$

$$3D : \begin{aligned} x, y, z &\rightarrow -x, -y, -z \\ r, \theta, \varphi &\rightarrow r, \pi - \theta, \varphi + \pi \quad (\text{kulekoord.}) \\ \varrho, \varphi, z &\rightarrow \varrho, \varphi + \pi, -z \quad (\text{syylinderkoord.}) \end{aligned}$$

Eks: Isotrop  $V(r)$  i 2D

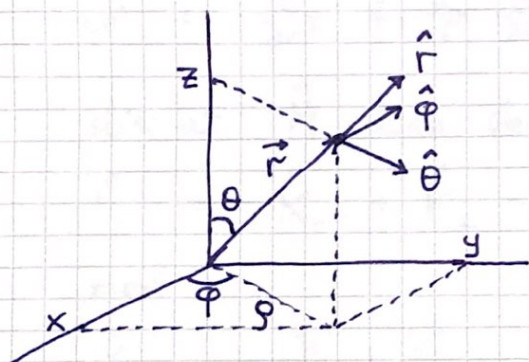
$$\begin{aligned} \hat{P} \Psi_m(r, \varphi) &= \Psi_m(r, \varphi + \pi) = R(r) e^{im(\varphi + \pi)} \\ &= (-1)^m R(r) e^{im\varphi} \\ &= p \Psi_m(r, \varphi) \end{aligned}$$

dvs like paritet for  $m = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$   
 odde — " —  $m = \pm 1, \pm 3, \dots$



# Dreieimpuls i 3D

Fokus på isotrop  $V(r) \Rightarrow$  bruker kulekoordinater



$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\varphi}, \quad \hat{r} \times \hat{\varphi} = -\hat{\theta}$$

$$\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \nabla$$

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\vec{r} = r \hat{r}$$

$$\Rightarrow \hat{L} = \frac{\hbar}{i} \left( \hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

som med (bruk figuren ovenfor!)

$$\hat{\varphi} = -\hat{x} \sin \varphi + \hat{y} \cos \varphi$$

$$\hat{\theta} = (\hat{x} \cos \varphi + \hat{y} \sin \varphi) \cos \theta - \hat{z} \sin \theta$$

gir

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{som i 2D})$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left( -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \varphi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$(\text{evt. med } \cot \theta = \frac{\cos \theta}{\sin \theta})$$



Med produktregel for derivasjon får vi nå :

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{L}^2$$

slik at  $\hat{H}$  kan skrives slik :

$$\hat{H} = \hat{K}_r + \hat{K}_L + V$$

med

$$\hat{K}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) = \text{oper. knyttet til radiell bevegelse}$$

$$\hat{K}_L = \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 = \text{oper. knyttet til angular bevegelse}$$

Anta isotrop  $V(r)$ . Da ser vi at hvert ledd i  $\hat{H}$  kommuterer med  $\hat{L}_z$  og  $\hat{L}^2$ , samt at  $\hat{L}_z$  og  $\hat{L}^2$  kommuterer. Dvs :

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

og dermed også

$$[\hat{H}, \hat{L}_x] = [\hat{H}, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0,$$

siden ingenting gjør z-aksen "spesiell" med isotrop  $V(r)$ .

Men da er  $E$ ,  $L^2$  og  $L_z$  (eller  $L_x$ , eller  $L_y$ ) kompatible størrelser og kan ha skarpe verdier samtidig, og vi kan finne felles egenfunksjoner for  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  og  $\hat{L}_z$  (eller  $\hat{L}_x$ , eller  $\hat{L}_y$ ).



Men  $\vec{L}$  kan ikke være skarp; bare en komponent om gangen. (Unntaket er  $L=0$ .)

Dette fordi  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  og  $\hat{L}_z$  ikke kommuterer:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] f &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left[ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right] f \\ &= \dots = -\hbar^2 \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) f = i\hbar \hat{L}_z f \end{aligned}$$

dvs

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$$

og med syklisk ombytte av komponentene ( $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$ )

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad \text{og} \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

Så med f.eks. skarp  $L_z$  er  $L_x$  og  $L_y$  uskarpe.

Men hvis også  $L^2$  er skarp, er selvsagt

$$L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$$

skarp.

Eks: Hva er  $[\hat{L}_\varphi, \hat{L}_\theta]$ ?

$$\text{Løsn: } \hat{L}_\varphi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad \hat{L}_\theta = -\frac{\hbar}{i \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow [\hat{L}_\varphi, \hat{L}_\theta] f &= \hbar^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right\} f \\ &= \hbar^2 \cdot \left( -\frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} f \\ &= \underline{\underline{i\hbar \cot \theta \hat{L}_\theta f}} \end{aligned}$$

Eks 2: Hva er  $[\hat{L}_\varphi, \hat{L}_r]$ ?      Løsn:  $\hat{L}_r = 0$



Så, hvor skal vi egentlig?

Jo, vi skal løse TUSL,  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ , med  
 $\hat{H} = \hat{K}_r + \hat{K}_L + V(r)$  (og spesifikt  $V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ )

Vi vet at vi kan finne egenfunksjoner  $\Psi$  som er felles for  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  og  $\hat{L}_z$ .

Vi prøver (som vanlig!) om produktløsninger fungerer,

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi),$$

og det vil gå fint.

Fra før (2D isotrop  $V(r)$ ) vet vi at

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

er egenfunk. til  $\hat{L}_z$  med egenverdier  $L_z = m\hbar$ .

Egenverdilign. for  $\hat{L}^2$  er i utgangspunktet

$$\hat{L}^2 \Psi = L^2 \Psi$$

Her er  $R(r)$  å oppfatte som en konstant (ingen  $\frac{\partial}{\partial r}$  i  $\hat{L}^2$ ), så vi kan fokusere på vinkeldelen

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

$$= \Theta(\theta) \cdot e^{im\varphi} \quad \text{for gitt } m$$

$$\text{Fra før: } \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Av dimensjonsmessige grunner er  $L^2 \sim \hbar^2$ .

$\Rightarrow$  Vi setter  $L^2 = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1)$  med  $l = \text{konstant}$



(91)

Innsetting av  $Y = \Theta(\theta) \cdot e^{im\varphi}$  gir nå

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + l(l+1) \right\} \Theta = 0$$

Variabelskifte :  $x = \cos\theta$

$$\Rightarrow (1-x^2)\Theta'' - 2x\Theta' - \frac{m^2}{1-x^2}\Theta + l(l+1)\Theta = 0$$

$m=0$ : Legendres diff. lign. ; åpenbart enklest!

Potensrekke  $\Theta(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$  settes inn og gir rekursjonsformelen

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{n(n+1) - l(l+1)}{(n+1)(n+2)},$$

som for  $n \gg 1$  gir

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \approx \frac{n}{n+2}$$

og dermed

$$\Theta(x) \approx \sum_n \frac{1}{n} x^n$$

som divergerer i  $x=1$ , dvs  $\theta=0$ , hvis ikke rekka bryter av. Som skjer hvis  $l=n$ , så tillatte  $l$ -verdier er:

$$l = 0, 1, 2, \dots$$



Løsninger er Legendrepolyonomer  $P_l(x)$ :

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \dots$$

som kan genereres med Rodrigues' formel

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

$m \neq 0$ : Se s. 44-45 i Tillegg 5 for detaljer.

Får samme ligning for  $*m$  og  $-m$  (pga  $m^2$  i ligningen).

Løsninger er assosierte Legendrefunksjoner  $P_l^m(x)$  som kan genereres fra  $P_l(x)$ :

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad ; \quad m > 0$$

$$P_l^{-m}(x) = P_l^m(x) \quad ; \quad x = \cos \theta$$

Oppsummert: Partikkel i isotropt potensial  $V(r)$  har kvantisert dreieimpuls (i absolutthverdi),

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

og kvantiserte komponenter,

$$L_z = m \hbar \quad ; \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

Må ha  $|L_z| \leq |\vec{L}|$ ; derfor  $|m| \leq l$ .

Egenfunkt. til  $\hat{L}_z$  og  $\hat{L}^2$  er de sfæriske harmoniske:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \cdot e^{im\varphi} \quad ; \quad \Theta_{lm}(\theta) = \begin{cases} P_l(\cos \theta) & (m=0) \\ P_l^m(\cos \theta) & (m \neq 0) \end{cases}$$



## Sfæriske harmoniske (Kuleflatefunksjoner)

Normering: 
$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_{lm}|^2 \underbrace{\sin \theta d\theta d\varphi}_{d\Omega \text{ (romvinklelement)}} = 1$$

Ortogonalitet: 
$$\iint Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Paritet: 
$$\hat{P} \Phi_m(\varphi) = (-1)^m \Phi_m(\varphi)$$

$$\hat{P} P_l^m(\cos \theta) = (-1)^{l-m} P_l^m(\cos \theta)$$

[For alle heltallige  $m$ ;  $P_l^0(x) = P_l(x)$ ]

$$\Rightarrow \hat{P} Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}$$

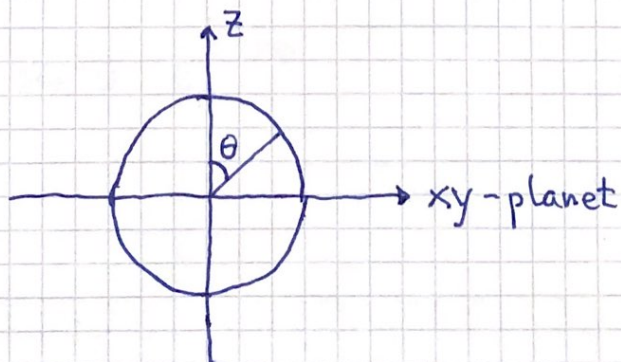
Terminologi:

|            |   |   |   |   |   |   |     |
|------------|---|---|---|---|---|---|-----|
| $l$ -verdi | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ... |
| betegnelse | s | p | d | f | g | h | ... |

Polardiagram (for visualisering):

Kurve med avstand  $|Y_{lm}|^2$  til origo.  
(Rotasjonssymmetrisk om  $z$ -aksen da  $|Y_{lm}|$  er uavh. av  $\varphi$ )

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (\text{s-tilstand})$$

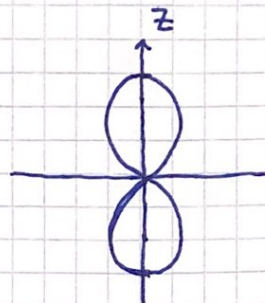




p-tilstander:

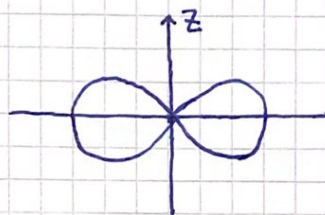
$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} = P_z$$

$$|Y_{10}|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta$$



$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

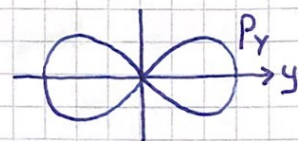
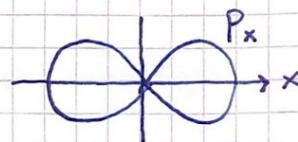
$$|Y_{1,\pm 1}|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$$



$$Y_{11} \mp Y_{1,-1} \sim \sin \theta (e^{i\varphi} \pm e^{-i\varphi})$$

$$\sim \sin \theta \cdot \begin{cases} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{cases}$$

$$= \begin{cases} x/r \\ y/r \end{cases} = \begin{cases} P_x \\ P_y \end{cases}$$



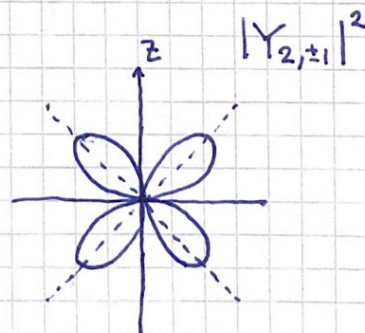
d-tilstander:

$$Y_{20}, Y_{2,\pm 1}, Y_{2,\pm 2}$$

$$Y_{20} \sim 3\cos^2 \theta - 1$$

$$Y_{2,\pm 1} \sim \mp \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm 2} \sim \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$





## Kvantisert rotasjonsenergi

Antar stivt legeme med treghetsmoment  $I$ .

$$K = \frac{1}{2} I \omega^2 ; \quad \vec{L} = I \vec{\omega} \Rightarrow K = L^2 / 2I$$

$$\text{Kvantisering: } \hat{K} = \frac{1}{2I} \hat{L}^2$$

$$\text{Egenverdligning: } \hat{K} Y_{lm} = K_l Y_{lm}$$

$$\text{Mulige rotasjonsenergier: } K_l = \hbar^2 l(l+1) / 2I ; \quad l=0,1,2,\dots$$

$$\text{Degenerasjonsgrad: } g_l = 2l+1 \quad (\text{pga } m=0, \pm 1, \dots, \pm l)$$

Tilnærmet kontinuerlig spektrum for molekyler ved romtemperatur:

$$\Delta K = K_l - K_{l-1} = \frac{\hbar^2 l}{2I} \quad \text{er størst for molekylet}$$

$\text{H}_2$ , som har  $I = \mu \cdot d^2$  med  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{1}{2} u$  og bindingslengde  $d \approx 1 \text{ \AA}$ . Da er  $\hbar^2 / I \approx 8 \text{ meV}$ , mens  $k_B T \approx 25 \text{ meV}$ . De to kvadratiske rotasjonsfrihetsgradene bidrar med  $2 \cdot \frac{1}{2} k_B$  til  $C_v$  pr molekyl (i henhold til EPP).

Ved lave temperaturer kan rotasjonsspektret måles via absorpsjon og emisjon av foton med energi  $h\nu = \Delta K$ .

Dreieimpulsbevarelse gir utvalgsregelen  $\Delta l = \pm 1$ .  
(Et foton har spinn  $\pm \hbar$ )



## Radialligning

Med vilkårlig isotropt potensial  $V(r)$ :

$$\underbrace{\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \right]}_{\hat{K}_r} + \underbrace{\frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2}_{\hat{K}_L} + V(r) \Big] R Y_{lm} = E R Y_{lm}$$

- $\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$
- Lurt å innføre  $u(r) = r \cdot R(r)$ ; lign. for  $u$  blir:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}}^l(r) u(r) = E u(r)$$

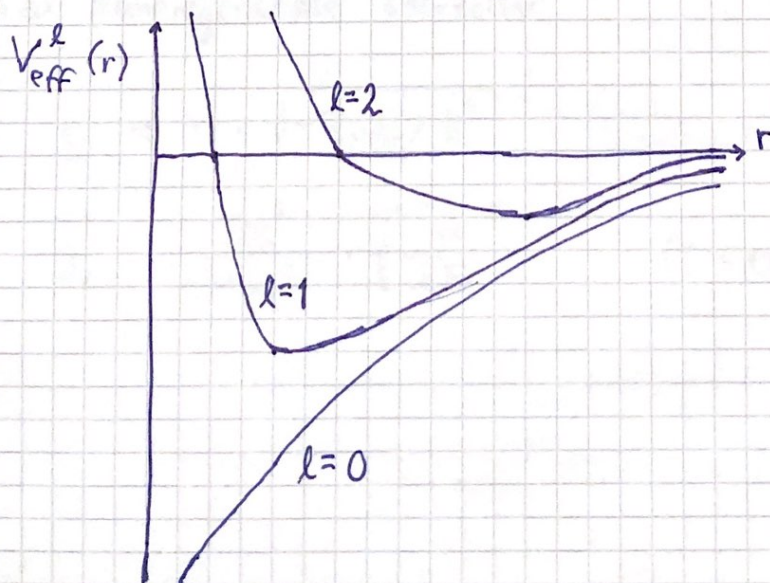
ders TUSL i 1D med et "effektivt" potensial

$$V_{\text{eff}}^l(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

det egentlige  
potensialet

↑ frastøtende sentrifugalbidrag;  
gjør området nær  $r=0$   
klassisk forbudt når  $l > 0$

Med Coulombpotensialet  $V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ :





Siden  $\min \{V_{\text{eff}}^l\} < 0$  for alle verdier av  $l$ , forventer vi bundne tilstander, med  $E_{n_r, l} < 0$ , for alle  $l$ , med radielt kvantetall  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ , og tilhørende bølgefunksjoner  $u_{n_r, l}(r)$  med  $n_r$  nullpunkter.

Systemet  $(H, He^+, Li^{2+}, \dots)$  består av to partikler, elektronet med masse  $m_e$  og kjernen med masse  $Z \cdot m_p$  (+evt.  $m_n$  pr nøytron). Som for toatomige molekyler separerer bevegelsen i tyngdepunktbevegelsen (fri partikkel med masse  $m_e + Z \cdot m_p + N \cdot m_n$ ; uinteressant for oss) og relativbevegelsen, som en partikkel med redusert masse, som for H-atomet er (med  $Z=1, N=0$ )

$$\mu = \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p} \right)^{-1} = 0.9995 m_e \approx m_e$$

Ligningen for  $u$  blir

$$\frac{d^2 u}{dg^2} + \left\{ \frac{\lambda}{g} - \frac{l(l+1)}{g^2} - \frac{1}{4} \right\} u = 0$$

med dimensjonsløse størrelser

$$g = r \cdot \sqrt{-8\mu E / \hbar^2}$$

$$\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \cdot \sqrt{\frac{-\mu}{2E}} \quad (E < 0)$$



- For  $l=0$  ser vi at en løsning, uten nullpunkter for  $\rho > 0$ , er  $u(\rho) = \rho \cdot \exp(-\rho/2)$ , for da er  $u''(\rho) = \exp(-\rho/2) \cdot (\rho/4 - 1)$ , og innsettning gir

$$\exp(-\rho/2) (\rho/4 - 1 + \lambda - \rho/4) = 0,$$

som er oppfylt når  $\lambda = 1$ , dvs  $E = -\frac{\mu (Ze^2)^2}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$ .

Med  $Z=1$  og  $\mu = m_e$  er dette  $E \approx -13.6 \text{ eV}$ .

- For  $l > 0$  skal vi se at  $u(\rho) = \rho^{l+1} \cdot \exp(-\rho/2)$  fungerer bra, både i grensen  $\rho \rightarrow \infty$  og når  $\rho \rightarrow 0$ .

For store  $\rho$  ( $\rho \gg \lambda$  og  $\rho \gg l$ ) er ligningen omtrent

$$u'' - \frac{1}{4} u = 0$$

med

$$\begin{aligned} u'' &= e^{-\rho/2} \{ l(l+1) \rho^{l-1} - (l+1) \rho^l + \frac{1}{4} \rho^{l+1} \} \\ &\approx e^{-\rho/2} \cdot \frac{1}{4} \rho^{l+1} \Rightarrow u'' - \frac{1}{4} u \approx 0 ; \text{OK} \end{aligned}$$

Når  $\rho \rightarrow 0$ , er ligningen omtrent

$$u'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u = 0$$

$$\begin{aligned} \text{med } u &= \rho^{l+1} \cdot \exp(-\rho/2) \approx \rho^{l+1}, \quad u' \approx (l+1) \rho^l \\ \text{og } u'' &\approx l(l+1) \rho^{l-1} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow u'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u \approx 0 ; \text{OK}$$

- Dermed satser vi på løsningsformen  $u(\rho) = e^{-\rho/2} \cdot v(\rho)$  med potensrekke for  $v(\rho)$  som starter fra  $\rho^{l+1}$ , dvs

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \cdot \rho^{l+1+k}$$



Ligningen for  $u(\rho)$ :

(99)

$$u'' - u' + \left\{ \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} u = 0$$

Innsetting gir rekursjonsformelen

$$\frac{C_k}{C_{k-1}} = \frac{l+k-\lambda}{k(2l+1+k)} \quad ; \quad k=1, 2, 3, \dots$$

som for  $k \gg 1$  gir  $C_k/C_{k-1} \approx 1/k$ , og dermed

$$u(\rho) = \left( \sum_k \frac{1}{k!} \rho^k \right) \cdot \rho^{l+1} \sim e^\rho \cdot \rho^{l+1}, \text{ slik at}$$

$$u(\rho) \sim \rho^{l+1} \cdot e^{\rho/2} \rightarrow \infty \text{ n r } \rho \rightarrow \infty.$$

Rekka m  bryte av, dvs  $\lambda = \text{et heltall} \geq l+1$ .

Vi bytter navn fra  $\lambda$  til  $n$ :

$$n = l+1 + n_r \quad ; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

For gitt  $n$  er  $l = n-1 - n_r \leq n-1$

Dvs:  $n=1, 2, 3, \dots$  ;  $l=0, 1, \dots, n-1$

Energieigenverdier for de bundne tilstandene er:

$$E_n = - \frac{\mu (Ze^2)^2}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\mu c^2 \cdot \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} \quad ; \quad n=1, 2, 3, \dots$$
$$\approx -13.6 \text{ eV} \cdot Z^2/n^2$$

$$\left( \alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c \approx 1/137 \right)$$



(100)

Degenerasjon: Generelt gir isotrop  $V(r)$  bundne energier  $E_{n_r, l}$  som avhenger av  $n_r$  og  $l$ .  
 Med  $V(r) \sim -1/r$  avhenger  $E_n$  bare av summen av  $n_r$  og  $l$ , dvs av  $n = n_r + l + 1$ . For gitt  $n$ :

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 1 + 3 + \dots + (2n-3) + (2n-1)$$

$$= 2n + 2n + \dots = 2n \cdot \frac{n}{2} = \underline{\underline{n^2}}$$

Radialfunksjonene:

$$R_{n,l} = \frac{u}{r} \sim \frac{v}{\rho} e^{-\rho/2} = \rho^l e^{-\rho/2} \sum_{k=0}^{n_r} C_k \rho^k$$

Rekursjonsformelen

$$C_k = C_{k-1} \cdot \frac{k - (n_r + 1)}{k(k + 2l + 1)} \quad ; \quad k = 1, 2, \dots, n_r$$

gir Laguerre-polynomene av grad  $n_r = n - l - 1$

Med  $E_n = -\mu c^2 (Z\alpha)^2 / 2n^2$  har vi

$$\rho = r \cdot \sqrt{-8\mu E_n} / \hbar = r \cdot 2/na \quad \text{med}$$

$$a = \hbar / \mu c Z\alpha.$$

For H-atomet:  $Z=1$ ,  $\mu \approx m_e$

$$\Rightarrow a \approx a_0 = \hbar / m_e c \alpha \approx 0.529 \text{ \AA}$$

dvs Bohr-radien



Normering :

(101)

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

$$\int |\Psi|^2 d^3r = 1 \quad ; \quad d^3r = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$\iint |Y_{lm}|^2 d\Omega = 1 \quad (\text{se s. 93})$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^2 dr = \int_0^\infty u_{nl}^2(r) dr = 1$$

Radialtetthet :  $u_{nl}^2 = dP_{nl}/dr = \text{sannsk. pr}$   
lengdeenhet radielt

Ortogonalitet :

$$\int \Psi_{n'l'm'}^* \Psi_{nlm} d^3r = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Terminologi :

Orbitalene benevnes med  $n$ -verdien foran  
 $s, p, d, f$  osv for hhv  $l = 0, 1, 2, 3$  osv.

|      |    |            |                         | Ant. nullpunkter |
|------|----|------------|-------------------------|------------------|
| Eks: | 1s | $n=1, l=0$ | $(\Rightarrow n_r = 0)$ | 0                |
|      | 2s | $n=2, l=0$ | $(\Rightarrow n_r = 1)$ | 1                |
|      | 2p | $n=2, l=1$ | $(\Rightarrow n_r = 0)$ | 0                |
|      | 3s | $n=3, l=0$ | $(n_r = 2)$             | 2                |
|      | 3p | $n=3, l=1$ | $(n_r = 1)$             | 1                |
|      | 3d | $n=3, l=2$ | $(n_r = 0)$             | 0                |



Eks: 3. juni 2019; H-atomets 2s-tilstand

(102)

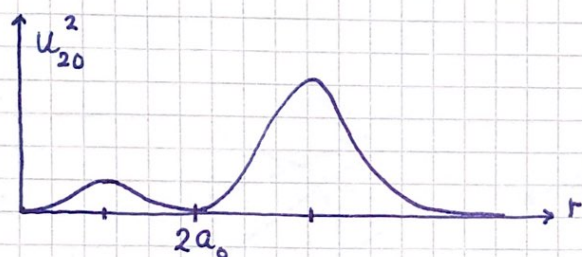
$$\psi_{200} = R_{20} \cdot Y_{00}$$

(28) Hva er elektronets klassiske venderadius?

$$E_2 = V(r_2) \Rightarrow \frac{-13.6 \text{ eV}}{4} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \Rightarrow r_2 = \underline{4.2 \text{ \AA}}$$

(29) Hvor er radialtettheten  $u_{20}^2 = r^2 R_{20}^2$  størst?

$$u_{20}^2 = \text{konst} \cdot \left\{ r^2 \left(1 - r/2a_0\right)^2 \exp(-r/a_0) \right\}$$



Må finne største

$x = r/a_0$  som gir

$$du_{20}^2/dx = 0, \text{ evt}$$

$$du_{20}/dx = 0$$

$$u_{20}(x) \sim x \cdot (1 - x/2) \cdot e^{-x/2}$$

$$\Rightarrow \frac{du_{20}}{dx} \sim (1-x)e^{-x/2} - (x - \frac{x^2}{2}) \cdot \frac{1}{2} e^{-x/2}$$

$$= e^{-x/2} \cdot \left(1 - \frac{3x}{2} + \frac{x^2}{4}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4}x^2 - \frac{3}{2}x + 1 = 0 \Rightarrow x = \frac{3/2 \pm \sqrt{9/4 - 1}}{1/2} = 3 \pm \sqrt{5}$$

$$\Rightarrow \text{Max } u_{20}^2 \text{ for } r = a_0 \cdot (3 + \sqrt{5}) \approx \underline{2.77 \text{ \AA}}$$

(30) Hvorfor har 2s-tilstanden i H-atomet spesielt lang levetid?

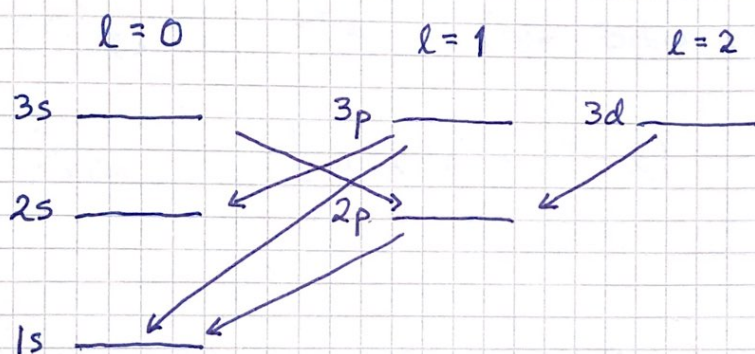


## Utvælgsregler for strålingsoverganger

Fotonet har spinn  $\pm \hbar$  langs forplantningsretningen.

Dreieimpulsbevarelse  $\Delta l$  prosesser der et foton emitteres eller absorberes gir derfor tillatte overganger dersom  $\Delta l = \pm 1$ . (Dessuten kreves  $\Delta m = 0$  eller  $\pm 1$ .)

For H-atomet:



Gir lang levetid for et elektron som harner i

$2s$ -tilstanden:  $\tau_{2s} \approx 0.1 \text{ s}$  ;  $\tau_{2p} \approx 1 \text{ ns}$

Balmerserien:  $n > 2 \longleftrightarrow n = 2$

Lymanserien:  $n > 1 \longleftrightarrow n = 1$  (UV)

Paschensenien:  $n > 3 \longleftrightarrow n = 3$  (IR)



Forventningsverdier:

$$\begin{aligned}\langle f(r) \rangle_{nlm} &= \iiint f(r) R_{nl}^2(r) |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega \\ &= \int_0^\infty f(r) u_{nl}^2(r) dr\end{aligned}$$

Eks:

$$\langle 1/r \rangle_{nlm}^{-1} = n^2 a \quad (\text{som Bohrs baneradier})$$

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{1}{2} a (3n^2 - l^2 - l)$$

For størrelser som afhænger af impulsen:

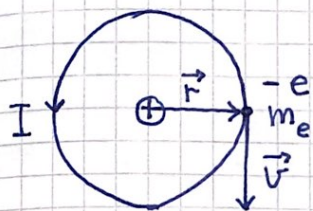
$$\langle A \rangle_{nlm} = \iiint R_{nl}^* Y_{lm}^* \hat{A} R_{nl} Y_{lm} r^2 dr d\Omega$$



## Dreieimpuls og magnetfelt. Spinn

(105)

Klassisk atom:



$$\text{Dreieimpuls: } L = |\vec{r} \times m_e \vec{v}| = r m_e v$$

$$\text{Magnetisk dipolmoment: } \mu = |I \vec{A}| = I A$$

$$\text{Strømstyrke: } I = e/T = e \cdot v / 2\pi r$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{1}{2} e v r$$

$$\Rightarrow \vec{\mu} = - \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (\text{I figuren over: } \vec{\mu} \text{ inn, } \vec{L} \text{ ut})$$

$$\text{Gir gyromagnetisk forhold } \mu/L = \frac{e}{2m_e}$$

$$\text{Bohr: } L = n\hbar \quad (n=1,2,3,\dots)$$

$$\Rightarrow \mu = n \cdot \mu_B \quad ; \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 1 \text{ Bohr magneton}$$

$$\text{Schrödinger: } L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$L_z = m\hbar \quad ; \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

Magnetisk dipol  $\vec{\mu}$  i ytre magnetfelt  $\vec{B}$ :

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \text{dreiemoment på dipolen}$$

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \text{pot. energi}$$

$$\vec{F} = -\nabla V = \nabla (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \text{kraft på dipolen}$$

$$\text{Uniformt } \vec{B}\text{-felt} \Rightarrow \vec{F} = 0$$



Larmor - presesjon:

N2 for rotasjon:  $\vec{\tau} = \frac{d\vec{L}}{dt}$

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \times \vec{B} = \frac{e}{2m_e} \vec{B} \times \vec{L}$$

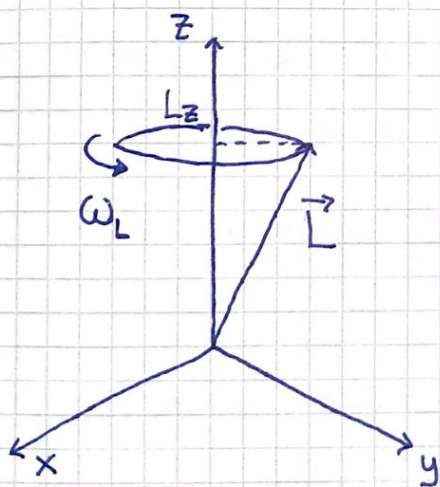
$$\Rightarrow \dot{\vec{L}} = \frac{e}{2m_e} \vec{B} \times \vec{L}, \text{ dvs samme ligning for } \vec{L}$$

som for posisjonsvektoren  $\vec{r}$  ved uniform sirkelbevegelse,  
 $\dot{\vec{r}} = \vec{\omega} \times \vec{r}$ , og med  $\vec{\omega} = \omega \hat{z}$  er løsningen

$$x(t) = r \cos \omega t, \quad y(t) = r \sin \omega t, \quad z = \text{konst.}$$

$\Rightarrow$  Med  $\vec{B} = B \hat{z}$  roterer (evt. preseserer)  $\vec{L}$   
 om z-aksen med vinkelfrekvens

$$\omega_L = \frac{eB}{2m_e} = \text{Larmorfrekvensen}$$



$$L_x(t) = L_0 \cos \omega_L t$$

$$L_y(t) = L_0 \sin \omega_L t$$

$$L_z = \text{konst.}$$

$$L_0 = \sqrt{L^2 - L_z^2} = \sqrt{L_x^2 + L_y^2}$$

Klassisk kan  $L$  og  $L_z$  ha alle slags verdier, og alle komponenter  $L_x, L_y, L_z$  er skarpe samtidig.

Kvantemekanisk er  $L$  og komponentene kvantisert, og bare  $L$  og én komponent, f.eks.  $L_z$ , kan være skarpe samtidig.



## Zeeman - effekt :

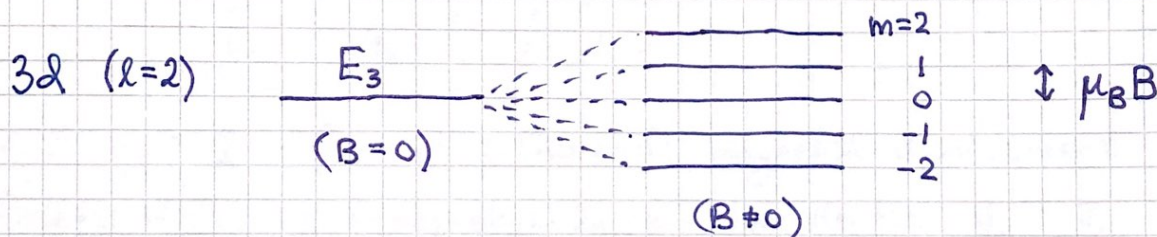
(107)

(P. Zeeman <sub>(exp)</sub> og H.A. Lorentz <sub>(teori)</sub>, Nederland. Nobelpris 1902)  
(klassisk!)

Magnetfelt  $\vec{B} = B \hat{z}$  gir oppsplitting av tilstander med  $l > 0$  i  $2l+1$  energinivåer, pga bidraget

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B = \frac{e}{2m_e} L_z B = m \cdot \frac{e\hbar}{2m_e} \cdot B \\ = m \cdot \mu_B \cdot B \quad (m = -l, \dots, 0, \dots, l)$$

til den totale energien. F.eks.:



Med f.eks.  $B = 1\text{ T}$  er  $\mu_B B = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J} \approx 0.06 \text{ meV}$ , dvs en ganske liten oppsplitting.

Men effekten gir nye (flere!) bølgelengder for emittert lys fra atomer.

Zeeman studerte opprinnelig Na-atomer (1896).



Spinn:

Elektronets spinn ("indre dreieimpuls")  $\vec{S}$  er kvantisert på tilsvarende vis som banedreieimpulsen  $\vec{L}$ :

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar ; \quad L_z = m\hbar, \quad m = -l, \dots, l$$

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar ; \quad S_z = m_s \hbar, \quad m_s = -s, s$$

Med  $s = 1/2$  har  $m_s$  bare de to mulige verdiene  $-1/2$  og  $+1/2$ .

Hvis  $\vec{S}$ , som  $\vec{L}$ , kunne knyttes til klassisk rotasjon av masse, ville man kanskje forvente

$$\vec{\mu}_e = g_e \cdot \left(-\frac{e}{2m_e}\right) \vec{S}$$

med  $g_e = 1$  for et tilhørende magnetisk dipolmoment.

Relativistisk kvantemekanikk gir imidlertid  $g_e = 2$ .

Nøyaktige beregninger (kvanteelektrodynamikk, QED)

gir  $g_e = 2.002\,319\,304\,356$ . Eksperimentelle verdier:

| Partikkel | Symbol | g-faktor          |
|-----------|--------|-------------------|
| Elektron  | $g_e$  | 2.002 319 304 362 |
| Proton    | $g_p$  | 5.585 694 6893    |
| Nøytron   | $g_n$  | 3.826 085 45      |

Protoner og nøytroner er også fermioner med  $s = 1/2$  og  $m_s = \pm$

$$\vec{\mu}_p \approx 5.59 \cdot \frac{e}{2m_p} \cdot \vec{S}_p ; \quad \vec{\mu}_n \approx -3.83 \cdot \frac{e}{2m_n} \cdot \vec{S}_n$$

Siden  $m_p, m_n \gg m_e$ , er  $\mu_e \gg \mu_p, \mu_n$



Egentilstander og dreieimpulsalgebra:

$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  danner ortonormert sett:

$$\langle \chi_+, \chi_+ \rangle = \chi_+^\dagger \chi_+ = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \chi_-, \chi_- \rangle = \chi_-^\dagger \chi_- = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \chi_+, \chi_- \rangle = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$$\hat{S}^2 \chi_\pm = s(s+1)\hbar^2 \chi_\pm = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_\pm$$

$$\hat{S}_z \chi_\pm = m_s \hbar \chi_\pm = \pm \frac{\hbar}{2} \chi_\pm$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_x] = [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z; [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x; [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y$$

Operatorer som tilfredsstiller dette:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Paulimatrissene:  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$



(36) Spinn- $1/2$ -partikkel i spinntilstanden

$$\chi = A \begin{pmatrix} 3i+3 \\ 5i+5 \end{pmatrix} = A \{ (3i+3)\chi_+ + (5i+5)\chi_- \}$$

Hva er  $A$  hvis  $A$  er reell og positiv?

$$\begin{aligned} \text{Løsn: } \chi^\dagger \chi &= A^2 (-3i+3, -5i+5) \begin{pmatrix} 3i+3 \\ 5i+5 \end{pmatrix} \\ &= A^2 (9+9+25+25) = A^2 \cdot 68 = 1 \Rightarrow A = \underline{\underline{\frac{1}{\sqrt{68}}}} \end{aligned}$$

(37) Hva er  $\langle S_z \rangle$  for en spinn- $1/2$ -partikkel i spinntilstanden

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} 2i \\ 1-5i \end{pmatrix} ?$$

$$\begin{aligned} \text{Løsn: } \langle S_z \rangle &= \chi^\dagger \hat{S}_z \chi = \frac{1}{30} \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot (-2i, 1+5i) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2i \\ 1-5i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{60} (-2i, 1+5i) \begin{pmatrix} 2i \\ -1+5i \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{60} (4-1-25) \\ &= -22\hbar/60 = \underline{\underline{-11\hbar/30}} \end{aligned}$$

(38) Hva er  $\Delta S_x$  når  $\chi = \frac{1}{\sqrt{33}} \begin{pmatrix} 4i \\ 1-4i \end{pmatrix}$  ?

$$\text{Løsn: } \Delta S_x = \sqrt{\langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2}$$

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{1}{33} \cdot \frac{\hbar}{2} (-4i, 1+4i) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4i \\ 1-4i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{66} (-4i, 1+4i) \begin{pmatrix} 1-4i \\ 4i \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{66} (-4i-16+4i-16) \\ &= -16\hbar/33 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle S_x^2 \rangle &= \frac{1}{33} \cdot \frac{\hbar^2}{4} \cdot (-4i, 1+4i) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4i \\ 1-4i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4 \cdot 33} (16+1+16) = \frac{\hbar^2}{4} \quad \left[ \text{Ingen overraskelse; måling} \right. \\ &\quad \left. \text{av } S_x^2 \text{ må gi verdien } \hbar^2/4 \right] \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta S_x = \hbar \cdot \sqrt{\frac{1}{4} - \left(\frac{16}{33}\right)^2} \approx \underline{\underline{0.122 \hbar}}$$



## Atomer. Det periodiske system. Molekyler

(111)

Pauliprinsippet : (Pauli, 1925, Nobelpris 1945)

Ombytte av to identiske partikler gir ingen målbar effekt,

$$|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2 ; 1 \hat{=} \vec{r}_1, m_{s1} ; 2 \hat{=} \vec{r}_2, m_{s2}$$

$$\Rightarrow \Psi(1,2) = e^{i\theta} \Psi(2,1) \quad \text{med reell } \theta$$

Bosoner :  $\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$  (dvs symm. ved ombytte)

F.eks. foton,  ${}^4_2\text{He}$ , Cooper-par (= to elektroner som tiltrekker hverandre ved hjelp av gittervibrasjoner i krystaller ved lave nok temperaturer; gir opphav til superledning). Bosoner har heltallig spin.

Fermioner :  $\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$  (dvs antisymm. ved ombytte)

F.eks. elektron, proton, nøytron. Fermioner har halvtallig spin.

Anyoner :  $\Psi(1,2) = e^{i\theta} \Psi(2,1)$  med  $\theta \neq n \cdot \pi$ .

Beskrevet teoretisk av Jon Magne Leinaas og Jan Myrheim ved Univ. i Oslo i 1977 (Il Nuovo Cimento B, 37, 1-23). Mulig å realisere i 2D. Påvist i eksperimenter i 2020.



For system med to elektroner:

(112)

$$\Psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_j(2) - \phi_j(1) \phi_i(2) \} = -\Psi_A(2,1)$$

Hvis de to elektronene er i samme enpartikkeltilstand, er  $\phi_i = \phi_j$ , og dermed  $\Psi_A(1,2) = 0$ . Følgelig:

To elektroner (fermioner) kan ikke befinne seg i samme enpartikkeltilstand.

Paulis eksklusjonsprinsipp.

For system med to bosoner:

$$\Psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_j(2) + \phi_j(1) \phi_i(2) \} = \Psi_S(2,1)$$

Dvs uproblematisk med to (eller flere!) bosoner i samme enpartikkeltilstand.

Bose-Einstein-kondensasjon: Ved lav nok temperatur kan alle bosonene i systemet være i en og samme grunntilstand  $\phi_0$ . Skjer f.eks. når  ${}^4_2\text{He}$  blir superflytende (dvs med null viskositet).



Det periodiske system:

H: Grunntilstanden har elektronet i 1s

Elektronkonfigurasjon:  $1s^1$  (evt 1s)

Nøyaktige numeriske beregninger for andre atomer gir løsninger med en lignende struktur, med økende energiverdier i rekkefølgen

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d \dots$$

Grunntilstand i henhold til "aufbau-prinsippet":

Inntil 2 elektroner (med motsatt spin) i hver orbital, fra lavest energi og oppover.

Hunds (første) regel: Så stort totalspinn  $S$  som mulig.

Eks: N (nitrogen,  $Z = 7$ )

$$1s^2 2s^2 2p^3$$

$$m = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ \hline \end{array} \quad S_z = \pm \frac{3}{2} \hbar$$

Ca (kalsium,  $Z = 20$ )

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$$

Ag (sølv,  $Z = 47$ )

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$$

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (L = 0)$$

$\Rightarrow$  2 ulike avbøyninger i Stern-Gerlach-eksp.



Molekyler:

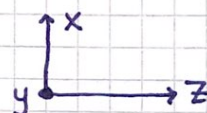
Enpartikkeltilstander (molekylorbitaler) kan uttrykkes som lineære kombinasjoner av atomære orbitaler (LCAO),

$$\psi = \sum_j c_j \phi_j$$

MO ↑ ↓ AO

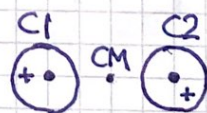
Som før er grunntilstanden inntil 2 elektroner i hver MO, slik at total energi blir så lav som mulig.

Eks: Acetylen (Etyn),  $C_2H_2$



Lineært. 14 elektroner, 2 i hver av 7 MO med lavest mulig energi. Kan lage MO med (atomsentrerte) AO:  $1s(H)$ ,  $1s(C)$ ,  $2s(C)$ ,  $2p(C)$ .

$$\psi_1 = 1s(C1) + 1s(C2)$$



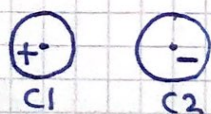
$$= 1\sigma_g$$

(g = gerade = lik paritet mhp symmetrisert i molekyls massesenter CM)

$$\psi_2 = 1s(C1) - 1s(C2)$$

$$= 1\sigma_u$$

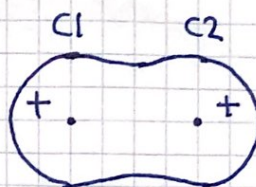
(u = ungerade = odde paritet)



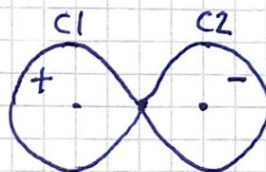
$$(\psi_{CM} = 0)$$



$$\begin{aligned}\psi_3 &= 2s(C1) + 2s(C2) \\ &= 2\sigma_g\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\psi_4 &= 2s(C1) - 2s(C2) \\ &= 2\sigma_u\end{aligned}$$

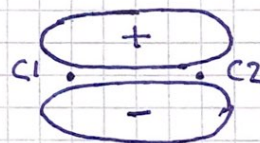


$$\psi_5 = 1s(H1) - 2p_z(C1) + 1s(H2) + 2p_z(C2) = 3\sigma_g$$



$$\psi_6 = 2p_x(C1) + 2p_x(C2) = \pi_{ux}$$

$$\psi_7 = 2p_y(C1) + 2p_y(C2) = \pi_{uy}$$



( $p_x$  og  $p_y$  har nodeplan, dvs  $\psi=0$ , i hver  $yz$ - og  $xz$ -planet.)

Elektronkonfigurasjon:  $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 \pi_{ux}^2 \pi_{uy}^2$

Beregnete energinivåer (med Hartree-Fock-metoden):

| MO                   | Energi (eV) |                              |
|----------------------|-------------|------------------------------|
| $1\sigma_g$          | -305.7      |                              |
| $1\sigma_u$          | -306.6      |                              |
| $2\sigma_g$          | -28.2       |                              |
| $2\sigma_u$          | -20.8       |                              |
| $3\sigma_g$          | -18.6       |                              |
| $\pi_{ux}, \pi_{uy}$ | -11.3       | (HOMO: Highest Occupied MO)  |
| $3\sigma_u$          | +4.1        | (LUMO: Lowest Unoccupied MO) |
| $\pi_{gx}, \pi_{gy}$ | +5.0        |                              |