

QM vs klassisk harmonisk oscillator

[PCH 3.5.5; DFG 2.3,2; IØ 3.4.d]

$dP = \rho(q) dq =$ sannsynligheten for å finne partikkelen (oscillatoren) mellom q og $q+dq$

QM: $\rho_n(q) = |\Psi_n(q)|^2 =$ sannsynlighet for partikkel med energi $E_n = (n+1/2) \hbar \omega$

Klassisk:

$$dP = \rho(q) dq = \frac{\text{Tid på } (q, q+dq)}{\text{Svingetid}} = \frac{dt}{T}$$

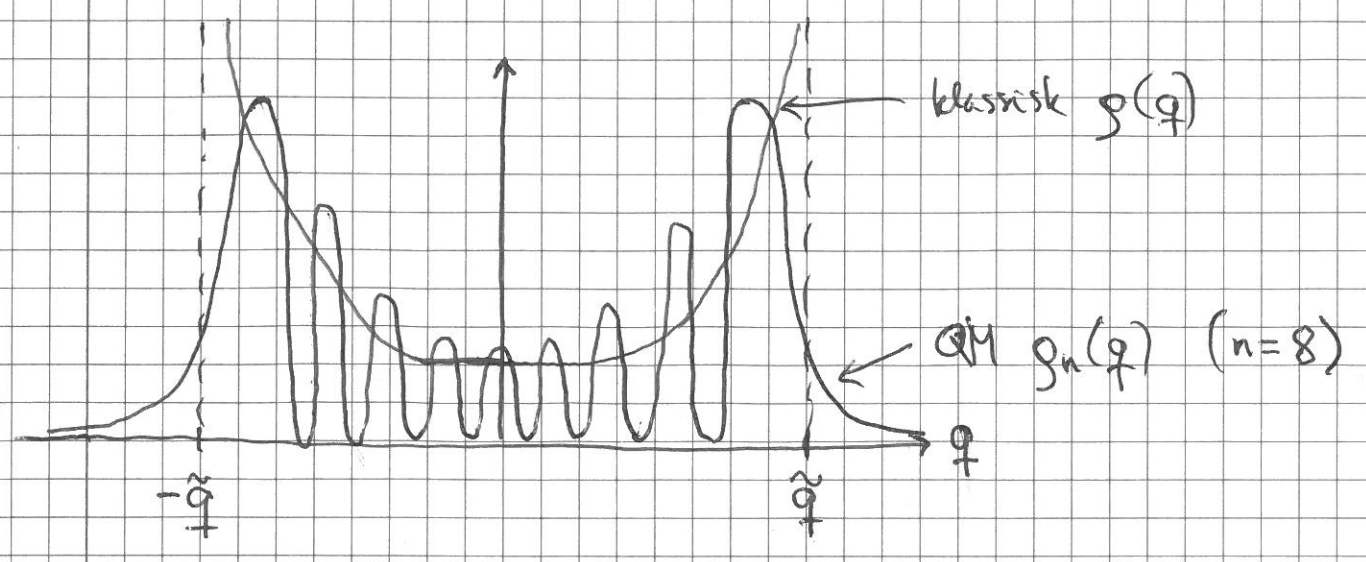
der $T = 2\pi/\omega$ og $dt = 2 \cdot dq/v(q)$ (2 pga fram og tilbake)

$$\begin{aligned} \text{Fart: } v(q) &= \sqrt{2K/m} = \sqrt{2(E-V)/m} \\ &= \sqrt{2(E - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2)/m} = \sqrt{\frac{2E}{m} - \omega^2 q^2} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \rho(q) = \frac{2/v(q)}{2\pi/\omega} = \frac{1}{\pi \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - q^2}} ; \quad -\tilde{q} < q < \tilde{q}$$

Klassiske vendepunkter:

$$E = V(\tilde{q}) = \frac{1}{2}m\omega^2 \tilde{q}^2 \Rightarrow \tilde{q} = \sqrt{2E/m\omega^2}$$



Klassisk partikkel svinger fram og tilbake:

$$q(t) = \tilde{q} \cos \omega t$$

QM energieigenstand $\Psi_n(q,t)$ er stasjoner ($|\Psi_n|^2$ uavh. av t)

⇒ Må lage bølgepakke for å beskrive partikkel som svinger:

$$\Psi(q,t) = \sum_n c_n \Psi_n(q) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Ex: $\Psi(q,0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega(q-q_0)^2/2\hbar}$ ("gauss-form")

Koeffisientene $\{c_n\}$ bestemmes slik:

- ($\langle q \rangle(0) = q_0$)
- ($\langle p \rangle(0) = 0$)
- (Ør 2, oppg 7)

$$\Psi(q,0) = \sum_n c_n \Psi_n(q)$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j^*(q) \Psi(q,0) dq = \sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j^*(q) \Psi_n(q) dq$$

$$= \sum_n c_n \delta_{jn} = c_j$$

⇒ ... ⇒

$$|\Psi(q,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-m\omega(q - q_0 \cos \omega t)^2/\hbar}$$

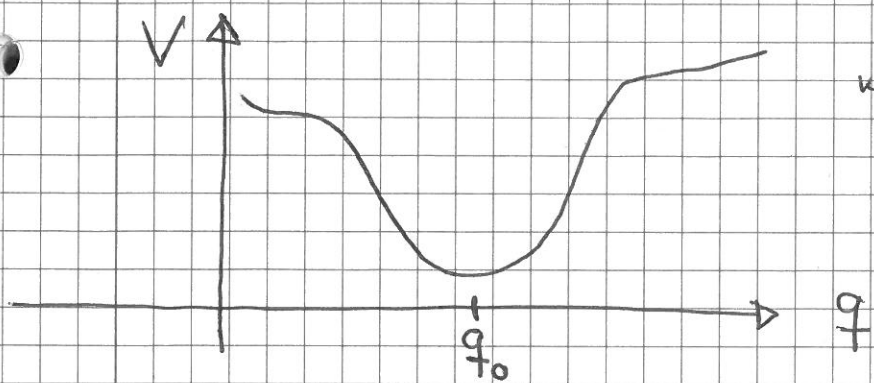
dvs gaussformet pakke med $\langle q \rangle(t) = q_0 \cos \omega t$,

dvs som klassisk partikkel (osillator), med

startposisjon q_0 og startfart null.

[og med $\langle p \rangle(t) \sim \sin \omega t$, som klassisk $p(t)$]

Relevans av harmonisk oscillator: [IO 3.4.e]



"Villkårig" potential $V(q)$ med stabil läge vid $q=q_0$

När $q=q_0$:
$$V(q) = V(q_0) + (q-q_0) \underbrace{V'(q_0)}_{=0} + \frac{1}{2} (q-q_0)^2 V''(q_0) \dots$$

$$= V(q_0) + \frac{1}{2} k (q-q_0)^2 \dots \quad (k = V''(q_0))$$

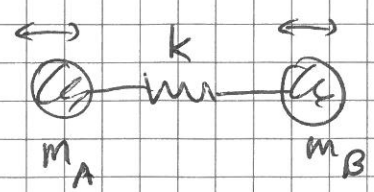
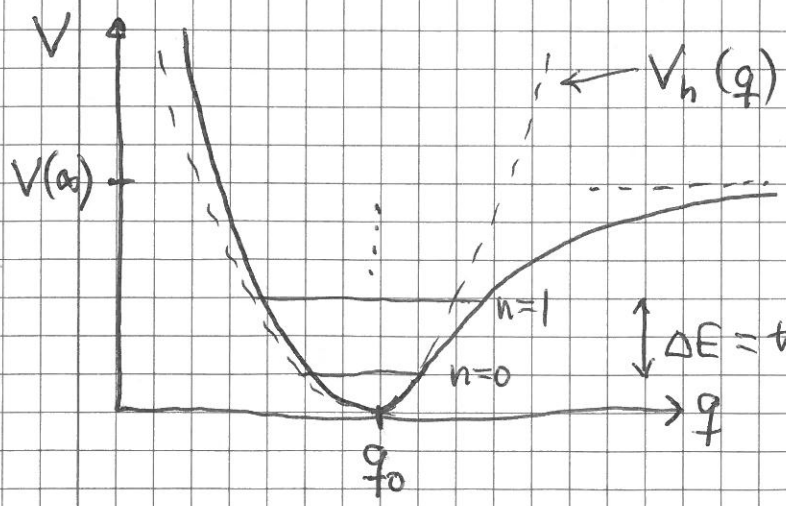
$\Rightarrow V(q) \approx V_h(q) = V(q_0) + \frac{1}{2} k (q-q_0)^2$

med (tilnärmeda) energinivåer

$$E_n \approx E_n^h = V(q_0) + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

med
$$\omega = \sqrt{k/m} = \sqrt{V''(q_0)/m}$$

Eks: Vibrasjoner i 2-atomig molekyl



$\Delta E = \hbar \omega \sim \frac{1}{10} \text{ eV (eller mer)}$

\Rightarrow Molekylet i grunntilstanden hvis $k_B T \ll \hbar \omega$;

med $\hbar \omega / k_B \sim 10^3 \text{ K}$ (eller mer)

Dissosiasjonsenergi: $(AB \rightarrow A + B)$

$$D_0 = V(\infty) - E_0$$

QM i 3D (og 2D)

[PCH 5; DFG 4; IØ 5]

Harmonisk oscillator

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

med $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$

des $\hat{H} = \hat{H}^{(x)} + \hat{H}^{(y)} + \hat{H}^{(z)}$ (der $\hat{H}^{(x)}, \hat{H}^{(y)}, \hat{H}^{(z)}$ kommuterer)

og TVSL, $\hat{H}\Psi = E\Psi$, har produktløsninger

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

som innsatt i $\Psi_{n_x n_y n_z}^{-1} \hat{H} \Psi_{n_x n_y n_z} = E$ gir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_{n_x}''}{\Psi_{n_x}} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 \right] + [x \rightarrow y] + [x \rightarrow z] = E$$

\Rightarrow alle [...] må være konstanter, hvor E_x, E_y og E_z ,

og vi vet, fra 1D harm. osc., at

$$E_x = (n_x + \frac{1}{2}) \hbar \omega_x, \quad E_y = (n_y + \frac{1}{2}) \hbar \omega_y, \quad E_z = (n_z + \frac{1}{2}) \hbar \omega_z$$

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

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

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

$$\Rightarrow E = E_x + E_y + E_z = E_{n_x n_y n_z} \quad \left(\begin{array}{l} \text{som alle generelt} \\ \text{er forskjellige} \end{array} \right)$$

Tre uavh. harm. osc. generaliseres dermed lett til

vilkårlig mange!

Eks: Gittervibrasjoner i krystaller. ("Fononer")

E.M. strålingsfelt (Fotoner)

Isotrop oscillator: $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$

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

det kulesymmetrisk potensial, med $\vec{F} = -\nabla V(r) = -m\omega^2 r \hat{r}$
("sentralkraft"; $\vec{F} \sim \hat{r}$)

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

Degenerasjon: Flere enn en tilstand med lik energi

$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$; $\Psi_{000}(x,y,z) = \Psi_0(x)\Psi_0(y)\Psi_0(z) \sim e^{-m\omega r^2/2\hbar}$
(ikke degenerert) ($g_0 = 1$)

$E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$; $\Psi_{100} \sim x \exp(-m\omega r^2/2\hbar)$
 $\Psi_{010} \sim y \exp(-m\omega r^2/2\hbar)$
 $\Psi_{001} \sim z \exp(-m\omega r^2/2\hbar)$ } degenerasjonsgrad $g_1 = 3$

$E_N = \frac{2N+3}{2}\hbar\omega$; $\Psi_{N00}, \Psi_{0N0}, \Psi_{00N}, \Psi_{N-1,1,0}, \dots \Rightarrow g_N = ?$

$n_x = 0, 1, \dots, N \Rightarrow n_y = 0 \dots N, 0 \dots N-1, \dots, 0 = \underbrace{0 \dots N - n_x}_{1+N-n_x \text{ mulige}}$

(og med fastlagt n_x og n_y er også $n_z = N - n_x - n_y$ fastlagt)

$\Rightarrow g_N = \sum_{n_x=0}^N (N+1-n_x) = (N+1) + (N) + (N-1) + \dots + 1 = \underline{\underline{\frac{1}{2}(N+1)(N+2)}}$

Dvs: Symmetri \Rightarrow Degenerasjon ($i D > 1$)

Mer lærdom:

- Med isotropt potensial, $V(\vec{r}) = V(r)$, kan det umulig være noe "spesielt" med gitte retninger i rommet.

⇒ linearkombinasjoner av Ψ_{100} , Ψ_{010} og/eller Ψ_{001} er like gode egenfunksjoner for tilstand med energi $E_1 = 5\hbar^2/2$.

Ekst: Rotasjon av koordsystemet en vinkel α om z -aksen gir nye akser (x', y', z') med sammenhengen

$$x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha$$

$$y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha$$

$$z' = z$$

$$\begin{aligned} \text{iii)} \quad (100)' &\sim x' e^{-m\omega r^2/2\hbar} &\Rightarrow (100^z)' &= (100) \cos \alpha + (010) \sin \alpha \\ (010)' &\sim y' \quad \text{--- " ---} &\Rightarrow (010)' &= -(100) \sin \alpha + (010) \cos \alpha \\ (001)' &\sim z' \quad \text{--- " ---} &\Rightarrow (001)' &= (001) \end{aligned}$$

(der $(100) = \Psi_{100}$ etc)

"Skifte av basis", fra $(100), (010), (001)$
til $(100)', (010)', (001)'$

Partikkel i boks [PCH 5.2]

(89)

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

⇒ TVSL separerer (som for harm. osc.), og gir

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) \sim \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \cdot \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{n_x^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L_x^2} + \frac{n_y^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L_y^2} + \frac{n_z^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L_z^2}$$

$$n_j = 1, 2, 3, \dots \quad (j = x, y, z) \quad (\text{Degenerasjon: } g_1=1; g_2=3; \dots)$$

innbyrdes

Relevans: Ideelle gasser, dvs partikler uten vekselvirking.

F.eks. elektroner i krystaller; en "første tilkøring".

(De vekselvirker jo...)

Elektroner er såkalte fermioner, som oppfyller Pauliprinsippet:

Kun 1 (eller ingen!) fermion i en gitt tilstand!
(enpartikkeltilstand!)

makroskopisk krystall har store L_x, L_y, L_z ,

og dermed enpartikkeltilstander $\Psi_{n_x n_y n_z}$ med svært liten energiforskjell.

⇒ Tilnærmet kontinuerlig spektrum.

Hvor mange tilstander har vi nå mellom E og $E + \Delta E$?

Tilstandstetthet [PCH 5.2.2]

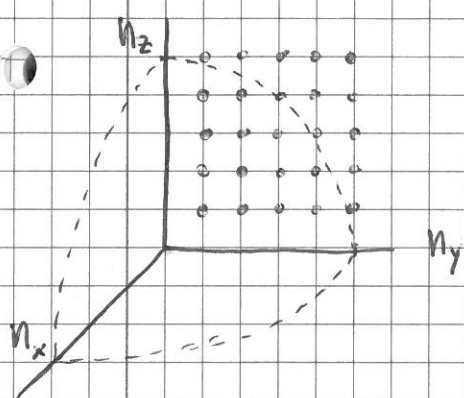
("Density of states")

Anta (for enkelhets skyld; ikke nødvendig) kubisk boks

$$\Rightarrow E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) ; n_j \geq 1 \quad (j=x,y,z)$$

1 tilstand pr kombinasjon (n_x, n_y, n_z)

\Rightarrow 1 tilstand pr volumenhet i rom med akser n_x, n_y, n_z



\Rightarrow antall tilstander med energi mindre enn $E_{n_x n_y n_z} \approx$ volum av $1/8$ av kule med radius

$$\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \sqrt{\frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} E_{n_x n_y n_z}}$$

$$\Rightarrow N_3(E) = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{3/2} \cdot L^3 \cdot E^{3/2}$$

= # tilst. mellom 0 og E

tilst. mellom E og E + dE :

$$N_3(E + dE) - N_3(E) = dN_3$$

\Rightarrow Tilstandstettheden, dvs # tilst. pr energienhet, blir

$$g_3(E) = \frac{dN_3}{dE}$$

$$= \frac{\pi}{4} \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{3/2} V E^{1/2} \quad (V=L^3)$$

$$2D: N_2(E) = \frac{1}{4} \cdot \pi \cdot \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{2/2} \cdot L^2 \cdot E^{2/2} \Rightarrow g_2(E) = \frac{dN_2}{dE} = \frac{m}{2\pi \hbar^2} A \quad (A=L^2)$$

$$1D: N_1(E) = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{1/2} \cdot L \cdot E^{1/2} \Rightarrow g_1(E) = \frac{dN_1}{dE} = \frac{1}{4} \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{1/2} \cdot L \cdot E^{-1/2}$$