Tilstandstetthet (Density of states) [PCH 5.2.2]

Makroskopisk krystall (3D) $\Rightarrow$ store L_x, L_y, L_z

$\Rightarrow$ tilnærmet kontinuerlig energispektrum

Grunntilstanden: Den tilstand som tilsvarer lavest mulig total energi, når elektronene okkuperer ("befinner seg i") tilstander i tråd med Paulíprinsippet.

Spinn: $\vec{S}$ = (en slags) indre dreieimpuls, kommer i tillegg til partiklers (bane-) dreieimpuls $\vec{L}$. Fermioner har halvtallig spinn, bosoner har heltallig spinn.

Elektronet: $S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar$ med $s = \frac{1}{2}$, og måling av en komponent av $\vec{S}$ gir enten resultatet $+\hbar/2$ eller $-\hbar/2$.

Kaller (ofte) denne retningen for z-aksen, slik at $S_z = m_s \hbar$, med de to mulighetene $m_s = \pm 1/2$.

Mer om spinn senere! Poenget her er dette: Hver romlige tilstand $\psi(\vec{r})$ kan kombineres med to mulige spinntilstander χ_+ og χ_-, slik at det blir to mulige enpartikkeltilstander

$$\psi(\vec{r}) \cdot \chi_+ \quad \text{og} \quad \psi(\vec{r}) \cdot \chi_-$$

for hver romlige tilstand $\psi(\vec{r})$. Pauliprinsippet tillater dermed inntil to elektroner i hver "orbital" $\psi(\vec{r})$, ett med spinn "opp" (χ_+) og ett med spinn "ned" (χ_-).

Vi spør nå: Hva er tettheten av tilstander?

Dvs: Hvor mange tilstander dN har vi på intervallet $(E, E+dE)$?

Da er tilstandstettheten $g(E) = dN/dE$.

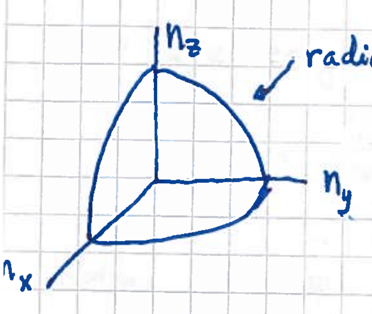
Vi skal se at $g(E)$ er ulik i 3D, 2D og 1D.

3D ; anta kubisk boks, $V = L^3$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right) \qquad (n_j \geq 1)$$

$\Rightarrow$ 1 (romlig) tilstand pr kombinasjon (n_x, n_y, n_z)

$\Rightarrow$ ——— " ——— i volum lik 1 i rom med akser (n_x, n_y, n_z)



radius $\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$, volum $\frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)^{3/2}$

$$= \frac{\pi}{6} \cdot \left(\frac{2mL^2E}{\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2}$$

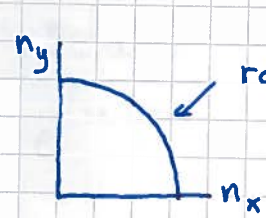
= antall tilstander med energi mindre enn E

$= N_3(E)$

$$\Rightarrow g_3(E) = \frac{dN_3}{dE} = \frac{\pi}{4}\left(\frac{2m}{\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot V \cdot E^{1/2}$$

= tetthet av romlige orbitaler i 3D

2D ; anta kvadratisk flate, $A = L^2$



radius $\sqrt{n_x^2 + n_y^2} = \left(\frac{2mL^2E}{\pi^2\hbar^2}\right)^{1/2}$,

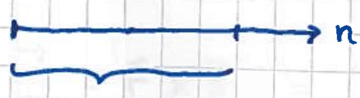
areal $\frac{1}{4}\pi\left(n_x^2 + n_y^2\right) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot A \cdot E$

= antall orbitaler med energi mindre enn E

$= N_2(E)$

$$\Rightarrow g_2(E) = \frac{dN_2}{dE} = \frac{m}{2\pi\hbar^2} A$$ = tetthet av orbitaler i 2D

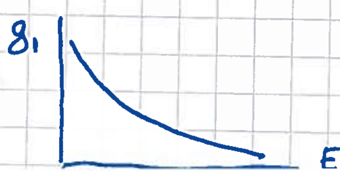
1D ; boks med lengde L



lengde $n = \sqrt{2mL^2E/\pi^2\hbar^2}$ = antall orbitaler med energi mindre enn E

$= N_1(E)$

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



Isotropt $V(r)$ i 2D [PCH 5.3]

Har 2D system hvis $\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu L_z^2} \gg k_B T$ (dvs liten utstrekning i z-retn.).

Da er TUSL for partikkel med masse μ:

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

Med kjerneregel $\left(\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi} \text{ osv}\right)$ fås

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

Setter $\Psi(r,\varphi) = R(r)\cdot\Phi(\varphi)$ og ganger TUSL med $-\frac{2\mu r^2}{\hbar^2\Psi}$:

$$\frac{r^2}{R}\left\{\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(r)]R\right\} = -\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}$$

Her må begge sider være lik en konstant, f.eks. m^2

$$\Rightarrow \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2\Phi = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(\varphi) \sim e^{im\varphi}$$

Hvis entydig løsning må $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$

$$\Rightarrow e^{im2\pi} = 1 \quad \Rightarrow \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Dvs, $\Psi(r,\varphi) = R(r)\,e^{im\varphi}$, med heltallig m, er energiegenfunksjoner i et 2D isotropt potensial; $\hat{H}\Psi = E\Psi$.

[Må selvsagt kjenne $V(r)$ for å fastlegge radialdelen $R(r)$.]

Skal se at Ψ også er egenfunk. til dreieimpulsen, som i 2D har bare en komponent:

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = (x\hat{x} + y\hat{y})\times(p_x\hat{x} + p_y\hat{y}) = (xp_y - yp_x)\hat{z} = L_z\hat{z}$$

Kvantiserer L_z:

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Blir spesielt enkel i polarkoordinater :

$$x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} = r\cos\varphi\left(\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - r\sin\varphi\left(\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\sqrt{x^2+y^2} = \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} = \underbrace{\frac{y}{r}}_{=\sin\varphi} \; ; \quad \frac{\partial r}{\partial x} = \ldots = \frac{x}{r} = \cos\varphi$$

[Pussighet: $\partial r/\partial x = \partial x/\partial r$ og $\partial r/\partial y = \partial y/\partial r$]

$$\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\arctan(y/x) = \frac{1/x}{1+(y/x)^2} = \frac{x}{x^2+y^2} = \frac{r\cos\varphi}{r^2} = \frac{\cos\varphi}{r}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\arctan(y/x) = \frac{-y/x^2}{1+(y/x)^2} = \frac{-y}{x^2+y^2} = -\frac{\sin\varphi}{r}$$

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

[2 ledd kansellerer; de 2 andre forenkles, da $\cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1$]

Dermed: $\hat{L}_z\Psi = R\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{im\varphi} = Rm\hbar e^{im\varphi} = m\hbar\Psi$

Dvs: $\Psi(r,\varphi) = R(r)e^{im\varphi}$ er egenf. til $\hat{L}_z$ med egenv. $m\hbar$

$\Rightarrow$ En partikkel i et 2D isotropt pot. $V(r)$ har kvantisert dreieimpuls $L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \ldots$

Kompatible størrelser og felles ("simultane") egenfunksjoner

[PCH 4.1 ; DJG 3.5 ; IØ 4.1]

Def: A og B er <u>kompatible</u> hvis vi kan ha $\Delta A = \Delta B = 0$ samtidig.

Da er $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$.

Og målepostulatet tilsier at partikkelen er i en (stasjonær) tilstand Ψ som er egenf. til både $\hat{A}$ og $\hat{B}$;

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

Dvs, Ψ er <u>felles</u> egenf. til $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Eks: Isotrop $V(r)$ i 2D $\Rightarrow \Psi = R(r)e^{im\varphi}$ er felles egenf. til $\hat{H}$ og $\hat{L}_z$.

Da er $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$ og vi kan ha $\Delta E = \Delta L_z = 0$ samtidig.

Symmetriegenskaper og paritet [PCH 4.2 ; IØ 4.2]

$\hat{P}$ = paritetsoperatoren : $\boxed{\hat{P}\,\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})}$

Dvs, $\hat{P}$ speiler ψ gjennom origo.

1D : $x \to -x$

2D : $x, y \to -x, -y$; $r, \varphi \to r, \varphi + \pi$

3D : $x, y, z \to -x, -y, -z$

Kulekoord : $r, \theta, \varphi \to r, \pi - \theta, \varphi + \pi$

Sylinderkoord : $\rho, \varphi, z \to \rho, \varphi + \pi, -z$

Hvis $\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ er $\hat{P}\psi(\vec{r}) = +1\,\psi(\vec{r})$; <u>like</u> paritet

Hvis $\psi(-\vec{r}) = -\psi(\vec{r})$ er $\hat{P}\psi(\vec{r}) = -1\,\psi(\vec{r})$; <u>odde</u> –"–

$\Rightarrow$ Egenf. til $\hat{P}$ er alle funksjoner med bestemt paritet, dvs $\psi(-\vec{r}) = \pm\psi(\vec{r})$, og egenv. er $p = \pm 1$.

Eks: Isotrop $V(r)$ i 2D ; $\psi(r, \varphi + \pi) = R(r) e^{im(\varphi+\pi)} = \psi(r,\varphi)\cdot(-1)^m$

$\Rightarrow$ Like paritet for $m = 0, \pm 2, \pm 4 \ldots$; odde for $m = \pm 1, \pm 3, \ldots$

$\Rightarrow \hat{P}\psi_m = (-1)^m \psi_m$

Eks: 2D isotrop harm. osc., $V = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$; finn egenf. til $\hat{L}_z$ og tilhørende egenv., for 1. eksiterte energinivå, med $E_1 = 2\hbar\omega$.

Løsn: Må bruke $\psi_{10} = C \overbrace{r\cos\varphi}^{x} e^{-\mu\omega r^2/2\hbar}$ og $\psi_{01} = C \overbrace{r\sin\varphi}^{y} e^{-\mu\omega r^2/2\hbar}$,

men vi ser at verken ψ_{10} eller ψ_{01} er egenf. til $\hat{L}_z$. Men vi har $\cos\varphi \pm i\sin\varphi = \exp(\pm i\varphi)$, slik at $\psi_{10} \pm i\psi_{01}$ er egenf. til $\hat{L}_z$:

$$\hat{L}_z(\psi_{10} \pm i\psi_{01}) = \pm\hbar(\psi_{10} \pm i\psi_{01})$$

dvs med egenv. $L_z = \pm\hbar$ $(m = \pm 1)$.

Dreieimpuls i 3D   [PCH 5.4 ; DJG 4.3 ; IØ 5.2]

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

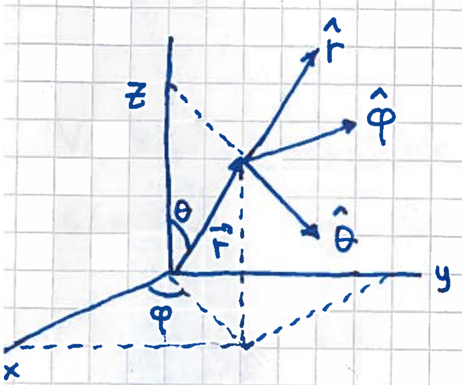
Kulekoordinater:

$$df = \nabla f \cdot d\vec{s} = \nabla f \cdot (\hat{r}\, dr + \hat{\theta}\, r\, d\theta + \hat{\varphi}\, r \sin\theta\, d\varphi)$$

og $$df = (\partial f/\partial r)\, dr + (\partial f/\partial \theta)\, d\theta + (\partial f/\partial \varphi)\, d\varphi$$

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

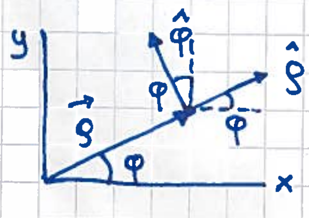
$$\Longrightarrow \quad \nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$



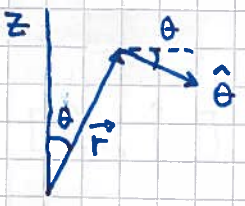
$$\hat{r} \times \hat{r} = 0$$
$$\hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\varphi}$$
$$\hat{r} \times \hat{\varphi} = -\hat{\theta}$$

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

Kan uttrykke $\hat{\varphi}$ og $\hat{\theta}$ ved $\hat{x}$, $\hat{y}$ og $\hat{z}$:



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



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

$$\Longrightarrow \quad \hat{\vec{L}} = \hat{L}_x \hat{x} + \hat{L}_y \hat{y} + \hat{L}_z \hat{z}, \quad \text{med}$$

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

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

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad \text{(som s. 85)}$$

Ser uten videre : $\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$.

Med produkt- og kjerneregel for derivasjon fås (se s95, 2016)

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

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

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2\mu} + V(r) \qquad \text{(antar isotrop } V(r)\text{)}$$

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

$$= \hat{K}_r + \hat{K}_L + V(r)$$

Vi har kompatible størrelser, dvs mulighet for skarpe verdier samtidig og felles egenfunksjoner, hvis operatorene kommuterer.

- E og L^2 (dvs E og L)

$$[\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = \underbrace{[\underbrace{\hat{K}_r + V(r)}_{\text{bare } r}, \underbrace{\hat{\vec{L}}^2}_{\text{bare } \theta,\varphi}]}_{=0} + \underbrace{[\hat{K}_L, \hat{\vec{L}}^2]}_{\sim[\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{L}}^2] = 0} = 0$$

Dvs: E og L^2 (L) kan måles skarpt samtidig

- L_i og L_j $(i,j = x,y,z)$:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -\hbar^2\left[y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}, z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right]$$

kommuterer

kommuterer

$$\left[y\frac{\partial}{\partial z}, z\frac{\partial}{\partial x}\right]f = y\frac{\partial}{\partial z}z\frac{\partial f}{\partial x} - z\frac{\partial}{\partial x}y\frac{\partial f}{\partial z} = y\frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\left[z\frac{\partial}{\partial y}, x\frac{\partial}{\partial z}\right]f = z\frac{\partial}{\partial y}x\frac{\partial f}{\partial z} - x\frac{\partial}{\partial z}z\frac{\partial f}{\partial y} = -x\frac{\partial f}{\partial y}$$

$$\Rightarrow [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) = -\hbar^2\cdot\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_z$$