

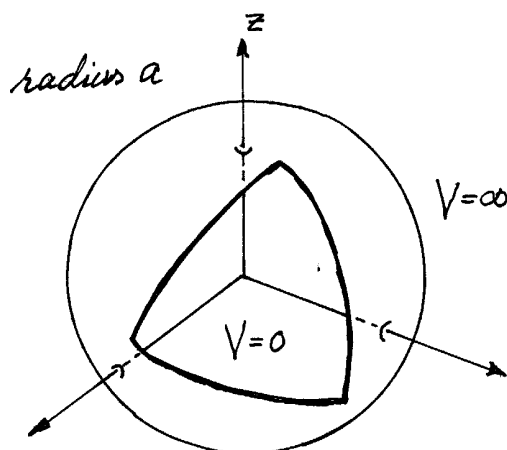
TILLEGG 9

9 Kulesymmetrisk boks. Sylindersymmetriske systemer

I dette Tillegget starter vi med en gjennomgang av det kulesymmetriske bokspotensialet (9.1). For fullstendighetens skyld tar vi i avsnitt 9.2 også med en diskusjon av sylindersymmetriske systemer. Dette avsnittet er ikke pensum i FY2045/TFY4250.

9.1 Kulesymmetrisk boks

[Se 4.1.3 i Griffiths, og 7.3 i B&J.]



Et veldig enkelt eksempel på et kulesymmetrisk potensial er en kuleformet boks, med radius a :

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{for } r < a, \\ \infty & \text{for } r > a. \end{cases}$$

For en makroskopisk radius a er det ikke noe spesielt interessant med denne boksen; antall romlige tilstander kan beregnes med utgangspunkt i formelen

$$dN_{\text{rom}} = \frac{V d^3p}{h^3},$$

og er uavhengig av formen på volumet V . For en "mikroskopisk" boks, derimot, er volumets geometri selvsagt viktig, og det er interessant å finne energirekkefølgen til tilstandene, degenerasjonsgrader og også selve bølgefunksjonene. Med $\psi = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ oppfyller $R_l(r)$ radialligningen (T5.41),

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \right] R_l(r) = 0.$$

Ved å innføre

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

og multiplisere denne ligningen med $-2mr^2/\hbar^2 = -k^2r^2/E$ kan vi skrive den på formen

$$\boxed{(kr)^2 \frac{d^2 R}{d(kr)^2} + 2(kr) \frac{dR}{d(kr)} + [(kr)^2 - l(l+1)] R_l(r) = 0,} \quad (\text{T9.1})$$

der $0 \leq r < a$. Differensialligningen over er kjent som den **sfæriske Bessel-ligningen**.

Sfæriske Bessel- og Neumann-funksjoner

For en gitt l er den generelle løsningen en lineærkombinasjon av den **sfæriske Bessel-funksjonen** $j_l(kr)$ og den **sfæriske Neumann-funksjonen** $n_l(kr)$:

$$R_l(r) = A j_l(kr) + B n_l(kr).$$

Disse to er hhvis regulære og irregulære (går mot ∞) i origo. Neumann-funksjonene er derfor ikke aktuelle når vi har bruk for løsninger i et r -område som inkluderer origo, slik vi har her. Det kan vises at

$$j_l(z) = z^l \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z} \quad \text{og} \quad n_l(z) = -z^l \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}. \quad (\text{T9.2})$$

For $l = 0$ og 1 er f.eks

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z},$$

$$n_0(z) = -\frac{\cos z}{z} \quad \text{og} \quad n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z}.$$

Her ser vi tydelig at Neumann-funksjonene divergerer i origo, mens utvikling for små z av Bessel-funksjonene viser at

$$j_0(z) \approx 1 \quad \text{og} \quad j_1(z) \approx \frac{z}{3} \quad \text{for små } z.$$

For vilkårlig l kan det vises at $j_l(z) \propto z^l$ for små z . Radialfunksjonene for den kulesymmetriske boksen,

$$R_l(r) = A_l j_l(kr), \quad (\text{T9.3})$$

har altså (som alltid) en oppførsel for små r som stemmer med den generelle ligningen (T5.44).

Energikvantisering og bølgefunksjoner

Fordi $V = \infty$ for $r > a$, må vi kreve at $R_l(r) = 0$ for $r = a$. Det er dette som fører til energikvantisering. For $l = 0$ er det *veldig* enkelt. Kontinuitetsbetingelsen

$$R_0(a) = A j_0(ka) = A \frac{\sin ka}{ka} = 0$$

krever at ka er et multiplum av π . De tillatte k -verdiene er altså $k_n^{(0)} = \pi n/a$, slik at energiene og radialfunksjonene blir

$$E_{n,l=0} = \frac{(\hbar k_n^{(0)})^2}{2m} = \frac{(\hbar \pi n)^2}{2ma^2} \quad \text{og} \quad R_{n,l=0}(r) = A_{n0} \frac{\sin(\pi nr/a)}{\pi nr/a}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{T9.4})$$

Disse energiene kjenner vi igjen fra den endimensjonale boksen med vidde a , og det er ikke det minste rart. For $l=0$ er nemlig det effektive potensialet lik null for $0 \leq r < a$, slik at den "endimensjonale" radialligningen (T5.42) for $u_0(r) = rR_0(r)$ tar formen

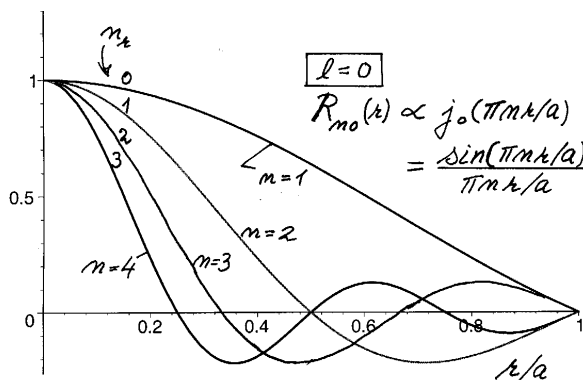
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_0(r)}{dr^2} = E u_0(r), \quad \text{med} \quad u_0(0) = u_0(a) = 0.$$

Denne beskriver en endimensjonal boks, og løsningene må alle være av typen $\sin kr$ for å oppfylle $u_0(0) = 0$. Betingelsen $u_0(a) = 0$ krever at ka er lik et av nullpunktene for sinusen, πn . Dette gir løsningssettet $u_{n0}(r) \propto \sin(\pi nr/a)$, som er nettopp de løsningene vi fant ovenfor.

Figuren viser selve radialfunksjonene, dvs de sfæriske Bessel-funksjonene

$$j_0(k_n^{(0)} r) = \frac{\sin(\pi nr/a)}{\pi nr/a},$$

for $n = 1, 2, 3, 4$, som svarer til radialkvantetallene $n_r = 0, 1, 2, 3$.



Legg merke til at alle disse s -bølgene er forskjellige fra null i origo; for $l=0$ har vi ingen sentrifugalbarriere, som framtvinger et nullpunkt i origo.

Tilstander med dreieimpuls

For $l \geq 1$ er det ikke fullt så enkelt. Både $R_{nl}(r)$ og $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ blir nå mer kompliserte, pga det effektive potensialet (sentrifugalledet). (Se figuren side 21 i Tillegg 5.) For en gitt l bestemmes løsningssettet $R_{nl}(r)$ av Bessel-funksjonen $j_l(kr)$, som skal være lik null for $r = a$. Dette krever at ka er lik et av nullpunktene for j_l , som vi kan kalle $\Pi_n^{(l)}$ (analogt med nullpunktverdiene πn som vi har for $R_0(r) = j_0(r) = \sin(kr)/r$):

$$R(a) = A j_l(ka) = 0 \quad \implies \quad k_n^{(l)} a = \Pi_n^{(l)}.$$

Energiene og bølgefunksjonene for dreieimpulsen l er altså

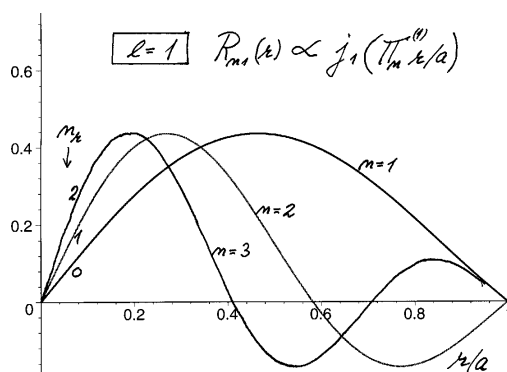
$$E_{n,l} = \frac{(\hbar k_n^{(l)})^2}{2m} = \frac{(\hbar \Pi_n^{(l)})^2}{2ma^2} \quad \text{og} \quad \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{T9.5})$$

$$\text{der} \quad R_{n,l}(r) = A_{nl} j_l(\Pi_n^{(l)} r/a), \quad n = 1, 2, \dots,$$

Tabellen gir noen av nullpunktene $\Pi_n^{(l)}$ (hentet fra side 467 i Abramowitz og Stegun).¹ Merk at radialkvantetallet er $n_r = n - 1$.

	j_0	j_1	j_2	j_3	
$n_r = 0$	$\Pi_1^{(0)} = \pi$	$\Pi_1^{(1)} = 4.4934$	$\Pi_1^{(2)} = 5.7635$	$\Pi_1^{(3)} = 6.9879$	(T9.6)
$n_r = 1$	$\Pi_2^{(0)} = \pi \cdot 2$	$\Pi_2^{(1)} = 7.7253$	$\Pi_2^{(2)} = 9.0950$	$\Pi_2^{(3)} = 10.4171$	
$n_r = 2$	$\Pi_3^{(0)} = \pi \cdot 3$	$\Pi_3^{(1)} = 10.9041$	$\Pi_3^{(2)} = 12.3229$	$\Pi_3^{(3)} = 13.6980$	

En liten oppgave: Vis at nullpunktene $\Pi_n^{(1)}$ til $j_1(z)$ er bestemt av betingelsen $\tan \Pi_n^{(1)} = \Pi_n^{(1)}$, og kontroller at nullpunktene i tabellen oppfyller denne betingelsen.



Figuren viser radialfunksjonene $R_{n,1}(r) \propto j_1(\Pi_n^{(1)} r/a)$ for $l=1$ og $n=1, 2, 3$, som svarer til radialkvantetallene $n_r = 0, 1, 2$. Disse radialfunksjonene går alle som $\sim r$ for små r . For større dreieimpulser (l) sørger sentrifugalledet for en sterkere undertrykking av radialfunksjonen nær origo; som vi har sett ovenfor går den som $\sim r^l$ for små r .

Enda en liten oppgave: Bruk tabellen ovenfor til å finne kvantetallene for 1. eksiterte nivå, 2. eksiterte nivå (osv et stykke). Angi degenerasjonsgraden for hvert av disse nivåene. Anta at vi “smetter inn” et visst antall av ikke-vekselvirkende fermioner med spinn $\frac{1}{2}$ i denne boksen. Hvor mange blir det plass til på hvert energinivå?

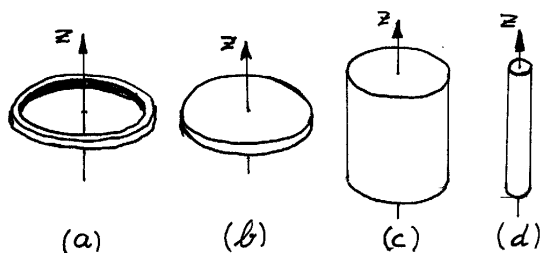
9.2 Sylindersymmetriske potensialer ***2

9.2.a “Todimensjonale” systemer

(Se avsnitt 5.3 i Hemmer)

¹Disse nullpunktene, og mye annen informasjon både om Bessel-funksjoner og andre viktige **spesielle funksjoner**, kan du finne bl.a i et standard oppslagsverk av M. Abramowitz og I.A. Stegun; *Handbook of Mathematical Functions*.

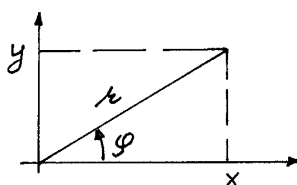
²Ikke pensum i FY2045/TFY4250.



Figuren viser en rekke “boks-potensialer” som alle har z -aksen som symmetriakse. I (a) er den “endimensjonale” boksen side 4 i Tillegg 8 bøyd sammen til en sirkulær ring. I (b) er denne ringen utvidet til en “todimensjonal” sirkulær skive. I (c) er dimensjonen i z -retningen økt og ikke lenger liten. I (d) er *diameteren* til sylindere gjort liten, slik at vi har en trådformet boks (“kvantetråd”). I alle disse tilfellene er bevegelsen i z -retningen på en måte triviell: Den er som for en endimensjonal boks. I (a) og (b) eksiteres dessuten frihetsgraden i z -retningen først ved høyere energier.

Baneplan-koordinater for todimensjonale systemer

Om vi ser bort fra bevegelsen i z -retningen har vi da et todimensjonalt system med rotasjonssymmetri mhp z -aksen. For slike todimensjonale, rotasjonssymmetriske systemer — enten det nå er bokser, mer realistiske brønner, eller mer kompliserte potensialer — er det praktisk å bruke polar-koordinater i planet (baneplan-koordinater), som beskrevet i avsnitt 5.3 hos Hemmer:



$$\begin{aligned} x &= r \cos \phi, & r &= \sqrt{x^2 + y^2}, \\ y &= r \sin \phi, & \tan \phi &= y/x, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \cos \phi, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin \phi, \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{\sin \phi}{r}, \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos \phi}{r}.$$

Vha kjerneregelen har vi

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

og

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} = \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

Vha disse relasjonene er det lett å vise at

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi},$$

(som i kulekoordinater). Med litt mer regning vil du også finne at Laplace-operatoren i baneplan-koordinater er ³

$$\begin{aligned}\nabla^2 &= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}_z^2}{\hbar^2 r^2}.\end{aligned}\quad (\text{T9.7})$$

Kommuterende operatører og simultane egenfunksjoner

I dette underkapitlet kaller vi partikkelmassen for μ , da vi ellers kan komme i skade for å blande den sammen med det magnetiske kvantetallet m . Hamilton-operatoren tar dermed formen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}_z^2}{2\mu r^2} + V(r).\quad (\text{T9.8})$$

Her kan vi identifisere det første leddet på høyresiden som radialdelen (\hat{K}_r) av kinetisk-energioperatoren \hat{K} for den todimensjonale bevegelsen. Ledd nr to, operatoren $\hat{K}_L = \hat{L}_z^2/(2\mu r^2)$, er åpenbart rotasjonsdelen. Med et rotasjonssymmetrisk potensial $V(r)$ er det lett å se at \hat{H} kommuterer med \hat{L}_z . ⁴ Dette betyr at vi kan finne simultane egenfunksjoner $\psi(r, \phi)$ til \hat{H} og \hat{L}_z : ⁵

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi &= E\psi, \\ \hat{L}_z\psi &= m\hbar\psi.\end{aligned}$$

Her angir det dimensjonsløse kvantetallet m egenverdien til \hat{L}_z . (Dette er grunnen til at vi har kalt massen for μ .)

Egenverdiligningen for \hat{L}_z

For fastholdt r tar egenverdiligningen for \hat{L}_z formen

$$\frac{d\psi}{\psi} = im d\phi.$$

Integrasjon over ϕ gir da $\ln \psi = \ln R(r) + im\phi$, der integrasjonskonstanten $R(r)$ er uavhengig av ϕ , men en vilkårlig funksjon av r , slik at

$$\psi(r, \phi) = R(r) e^{im\phi}.$$

³Ved å addere $\partial^2/\partial z^2$ fås Laplace-operatoren i sylinderkoordinater; se Rottmann.

⁴I det tredimensjonale tilfellet, med $V = V(r, z)$, dvs rotasjonssymmetri mhp z -aksen, kommuterer \hat{H} med \hat{L}_z , men ikke med de øvrige komponentene av $\hat{\mathbf{L}}$, og heller ikke med $\hat{\mathbf{L}}^2$.

⁵Det at \hat{L}_z kommuterer med \hat{H} betyr ifølge ligning (4.19) i Hemmer også at

$$\frac{d}{dt} \langle L_z \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{L}_z] \rangle = 0,$$

dvs $\langle L_z \rangle$ er tidsuavhengig for en vilkårlig tilstand i potensialet $V(r)$. Vi sier da at L_z er en **bevegelseskonstant** i kvantemekanisk forstand. Se avsnitt 4.3 hos Hemmer.

Her kan ikke kvantetallet m være helt vilkårlig. For at ψ skal bli kontinuerlig, må vi nemlig ha

$$\psi(r, 0) = \psi(r, 2\pi) \implies e^{2im\pi} = 1 \implies m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{T9.9})$$

Merk at kontinuitetskravet ovenfor er det samme som ble brukt i (T8.8) i Tillegg 10. Merk også at denne *kvantiseringen* av dreieimpulsen L_z enkelt sagt er en følge av at bølgefunksjonen må “bite seg selv i halen” for $\phi = 0$, som svarer til $\phi = 2\pi$. Kvantiseringen er altså en konsekvens av at vinkelrommet er “kompakt”.

Radialligningen

Radialfunksjonen $R(r)$ bestemmes nå ved innsetting i energiegenverdiligningen. Siden

$$\hat{L}_z^2 \psi = R(r) \hat{L}_z^2 e^{im\phi} = \hbar^2 m^2 R(r) e^{im\phi}, \quad (\text{T9.10})$$

finner vi at $R(r)$ må oppfylle **radialligningen**

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right) R(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu r^2} \right] R(r) = ER(r).} \quad (\text{T9.11})$$

Her legger vi merke til at potensialet $V(r)$ opptrer sammen med leddet

$$\frac{\hbar^2 m^2}{2\mu r^2} = \frac{L_z^2}{2\mu r^2}.$$

Dette er et sentrifugalledd som svarer til sentrifugalkraften knyttet til dreieimpulsen L_z . Sammen med det egentlige potensialet utgjør altså sentrifugalleddet et slags **effektivt potensial**

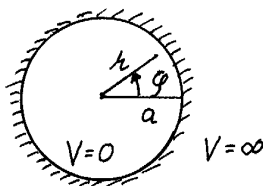
$$V_{\text{eff}}^{|m|}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu r^2}, \quad |m| = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{T9.12})$$

Dette betyr på en måte at vi har én radialligning for hver verdi av $|m|$, med et sett av radialfunksjoner $R^{(m)}(r)$ som vi kan karakterisere ved $|m|$ og antall nullpunkter n_r (det såkalte **radial-kvantetallet**), om vi ønsker. De tilhørende energiene avhenger som vi ser ikke av fortegnet til kvantetallet m , siden det er m^2 som inngår i radialligningen. For $|m| \geq 1$ har vi altså degenerasjonsgrad 2.

Siden krumningen øker med antall nullpunkter, vil energiene E generelt øke med radial-kvantetallet n_r for fastholdt $|m|$. De vil også øke med $|m|$ for fastholdt n_r , fordi det positive (og frastøtende) sentrifugalleddet øker med økende $|m|$.⁶ Dette illustreres i eksemplet nedenfor.

⁶Disse konklusjonene holder selv om vi ikke har skrevet radialligningen ovenfor på såkalt endimensjonal form. Det siste er lett å gjøre. Ved innføring av $R(r) = v(r)/\sqrt{r}$ finner en istedenfor radialligningen (T9.11) en radialligning for funksjonen $v(r)$ der leddet $r^{-1}d/dr..$ er borte, mens leddet $\hbar^2 m^2/(2\mu r^2)$ er erstattet med $\hbar^2(m^2 - 1/4)/(2\mu r^2)$.

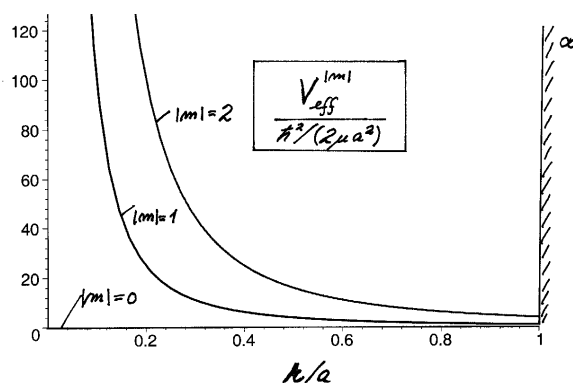
9.2.b Sirkulært todimensjonalt bokspotensial



Her antar vi at partikkelen er tvunget til å bevege seg på en sirkelflate med radius a . Dette svarer til et todimensjonalt sirkulært bokspotensial

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 < r < a, \\ \infty & \text{for } r > a. \end{cases}$$

Figuren viser det effektive potensialet i (T9.11) for $|m| = 0, 1$ og 2 .



Med

$$E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

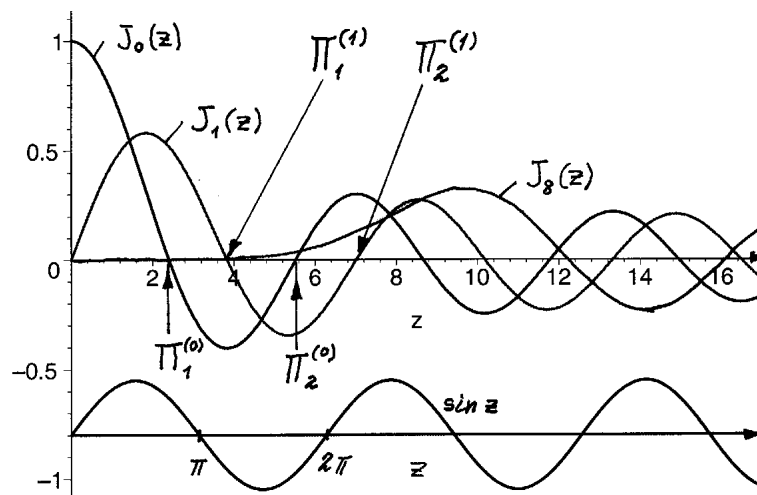
kan vi da skrive radialligningen på formen

$$(kr)^2 \frac{d^2 R}{d(kr)^2} + kr \frac{dR}{d(kr)} + [(kr)^2 - m^2] R = 0, \quad (0 < r < a), \quad (\text{T9.13})$$

med randkravet at $R(a) = 0$, siden bølgefunksjonen skal være kontinuerlig og lik null for $r > a$. Det er denne radialligningen og randkravet som bestemmer de mulige verdiene for k og dermed energieigenverdiene, for hver verdi av $|m|$. Fra diagrammet ovenfor og diskusjonen i avsnitt **a** må vi vente å finne grunntilstanden for $m = 0$. Dessuten venter vi å finne et sett med løsninger for hver verdi av $|m|$.

Denne differensialligningen er en standard-ligning i anvendt matematikk, og er kjent som **Bessel-ligningen**. Løsningene, de såkalte sylinderfunksjonene, har et stort bruksområde i fysikk og teknologi.

For hver $m (\geq 0)$ har ligningen to uavhengige løsninger. Disse kan velges slik at den ene, **Bessel-funksjonen** $J_m(kr)$, er regulær (endelig) i origo, slik vi må kreve av en radialfunksjon. Den andre, **Neumann-funksjonen** $N_m(kr)$, er *irregulær* i origo (går mot uendelig når $r \rightarrow 0$) og kan derfor ikke brukes i et område som inkluderer origo, slik vi har her.



Figuren viser $J_0(z)$ (relevant for $m = 0$), $J_1(z)$ (relevant for $m = \pm 1$) og $J_8(z)$ (relevant for $m = \pm 8$). Under disse kurvene har vi til sammenligning tatt med $\sin z$. Legg merke til at nullpunktene for J_0 , som vi har kalt $\Pi_n^{(0)}$, kommer "litt før" nullpunktene for sinusen, som svarer til $z = \pi n$. (Derfor betegnelsen $\Pi_n^{(m)}$ for nullpunktene til Bessel-funksjonen $J_m(z)$.) Legg også merke til at nullpunktene $\Pi_n^{(1)}$ for $J_1(z)$ ($m = 1$) ligger til høyre for de tilsvarende nullpunktene for $m = 0$. Dette er en generell tendens. $J_8(z)$, f.eks, har det første nullpunktet for $z \gtrsim 12$. Tabellen gir noen av disse nullpunktene:⁷

J_0	J_1	J_2	J_3	
$\Pi_1^{(0)} = 2.4048$	$\Pi_1^{(1)} = 3.8317$	$\Pi_1^{(2)} = 5.1356$	$\Pi_1^{(3)} = 6.3802$	(T9.14)
$\Pi_2^{(0)} = 5.5201$	$\Pi_2^{(1)} = 7.0156$	$\Pi_2^{(2)} = 8.4172$	$\Pi_2^{(3)} = 9.7610$	
$\Pi_3^{(0)} = 8.6537$	$\Pi_3^{(1)} = 10.1735$	$\Pi_3^{(2)} = 11.6198$	$\Pi_3^{(3)} = 13.0152$	

For en ordinær boks i én dimensjon husker du sikkert at grunntilstanden svarer til den delen av løsningen $\sin kr$ som ligger mellom origo og det første nullpunktet. I analogi med dette og med framgangsmåten i avsnitt 9.1 må vi for den sirkulære boksen kreve at radialfunksjonen $R^{(m)}(r) = J_m(kr)$ har et nullpunkt for $r = a$. Tar vi $m = 0$ som et eksempel, gir dette at

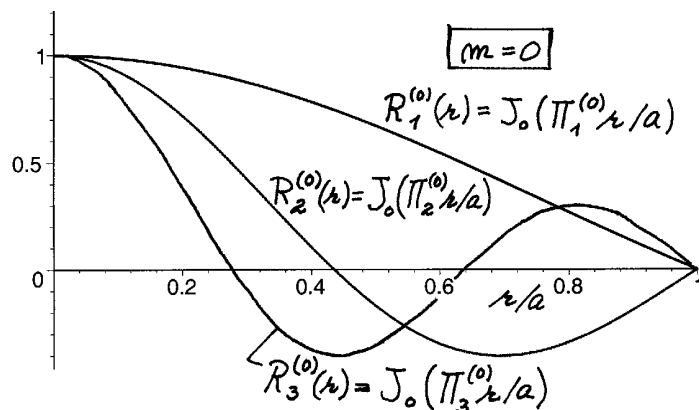
$$k_n^{(0)} a = \Pi_n^{(0)} \quad \text{og} \quad E_n^{(0)} = \frac{(\hbar k_n^{(0)})^2}{2\mu} = \frac{(\hbar \Pi_n^{(0)})^2}{2\mu a^2}. \quad (\text{T9.15})$$

Den laveste av disse energiene svarer til den aller laveste nullpunktverdien i tabellen, $\Pi_1^{(0)} = 2.4048$ (for $n = 1$). Den tilhørende radialfunksjonen er den delen av Bessel-funksjonen J_0 som ligger mellom 0 og $\Pi_1^{(0)}$:

$$R_1^{(0)}(r) = J_0(k_1^{(0)} r) = J_0(\Pi_1^{(0)} r/a).$$

Denne er vist i diagrammet nedenfor, hvor vi også har tatt med løsningene for $n = 2$ og $n = 3$, med hhvis ett og to nullpunkter i intervallet $0 < r < a$. Energiene til disse tilstandene finner vi ved å sette inn i (T9.15) verdiene for $\Pi_n^{(0)}$ fra tabellen ovenfor. Som tabellen viser, vokser selvsagt energiene med antall nullpunkter, fordi flere nullpunkter i radialfunksjonen betyr mer krumning.

⁷Disse nullpunktene, og mye annen informasjon både om Bessel-funksjoner og andre viktige **spesielle funksjoner**, kan du finne bl.a i et standard oppslagsverk av M. Abramowitz og I.A. Stegun; *Handbook of Mathematical Functions*.



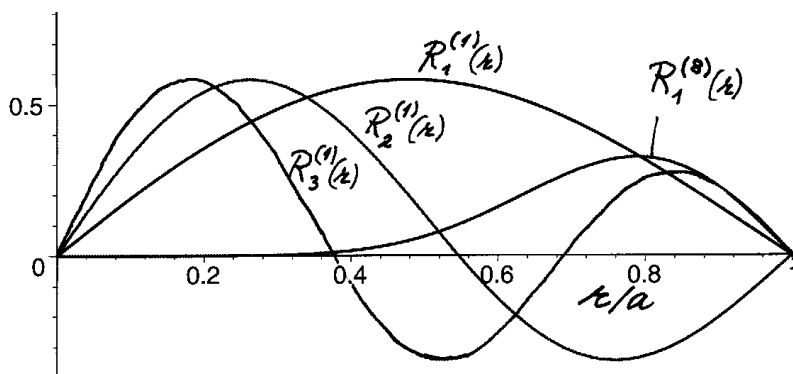
Disse radialfunksjonene er alle bestemt av Bessel-funksjonen J_0 : Analogt med at de ordinære boks-løsningene alle er bestemt av sinusfunksjonen, $\sin(k_n x) = \sin(\pi n x/a)$, har vi at

$$R_n^{(0)}(r) = J_0(k_n^{(0)} r) = J_0(\Pi_n^{(0)} r/a). \quad (\text{T9.16})$$

For $m \geq 1$ blir det helt tilsvarende: Energiene og de tilhørende radialfunksjonene finnes fra betingelsen $k_n^{(m)} a = \Pi_n^{(m)}$, som gir

$$E_n^{(m)} = \frac{(\hbar k_n^{(m)})^2}{2\mu} = \frac{(\hbar \Pi_n^{(m)})^2}{2\mu a^2} \quad \text{og} \quad R_n^{(m)}(r) = J_m(\Pi_n^{(m)} r/a). \quad (\text{T9.17})$$

Figuren nedenfor viser radialfunksjonene $R_n^{(1)}(r)$ for $|m| = 1$ og $n = 1, 2$ og 3 .



Disse radialfunksjonene for $|m| = 1$ går alle mot null som r for små r (i motsetning til radialfunksjonene for $m = 0$, som har et maksimum for $r = 0$). Dette skyldes sentrifugalleddet for $|m| = 1$. Figuren viser også radialfunksjonen $R_1^{(8)}(r) = J_8(\Pi_1^{(8)} r/a)$ for $|m| = 8$. Her er sentrifugalleddet så kraftig frastøtende at radialfunksjonen undertrykkes sterkt for små r . (Den går som r^8 nær origo.)

Bortsett fra normeringskonstanter er de komplette bølgefunksjonene og energiene gitt ved

$$\psi_n^{(m)} = e^{im\phi} R_n^{(|m|)}(r) = e^{im\phi} J_{|m|}(\Pi_n^{(|m|)} r/a) \quad \text{og} \quad E_n^{(m)} = \frac{(\hbar \Pi_n^{(|m|)})^2}{2\mu a^2}, \quad (\text{T9.18})$$

der $m = \pm|m|$ og $n = 1, 2, \dots$. Sannsynlighetstetthetene er som vi ser rotasjons-symmetriske, dvs de er gitt ved kvadratene av radialfunksjonene.

Fra figurene ovenfor ser vi at antall nullpunkter (i radialfunksjonene) for $0 < r < a$ er $n - 1$. Dette antallet kalles som nevnt ofte for radial-quantetallet, og er altså her

$$n_r \equiv n - 1.$$

For $n_r \geq 1$ ($n \geq 2$) kan vi si at vi har “eksitasjon av den radielle frihetsgraden”. Dette er analogt med at $|m| \geq 1$ svarer til “eksitasjon av rotasjons-frihetsgraden”.

Grunntilstanden svarer selvsagt (som vi har sett) til at ingen av disse frihetsgradene er eksitert, dvs til $m = 0$ og $n = 1$. Bølgefunksjonen $\psi_1^{(0)} = R_1^{(0)}(r)$ er da vinkeluavhengig (null dreieimpuls L_z), og radialfunksjonen har ingen nullpunkter for $0 < r < a$, dvs minimal krumning i radialretningen. Dette bekreftes av energiformelen ovenfor og tabellen, som viser at den laveste “nullpunktsverdien” er $\Pi_1^{(0)} = 2.4048$.

Spørsmålet er nå om 1. eksiterte nivå svarer til en eksitasjon av radial- eller rotasjonsbevegelsen? Svaret finner vi i tabellen. Denne viser at det nest laveste energinivået er $E_1^{(1)} = (\hbar\Pi_1^{(1)})^2/(2\mu a^2)$, med $\Pi_1^{(1)} = 3.8317$. De to tilstandene på dette nivået har radialkvantetall $n_r = n - 1 = 0$ og dreieimpuls-quantetall $m = \pm 1$ (dvs $L_z = \pm\hbar$). Så her er det rotasjonsbevegelsen som er eksitert, og som gir vinkelavhengige bølgefunksjoner, proporsjonale med $e^{\pm i\phi}$.

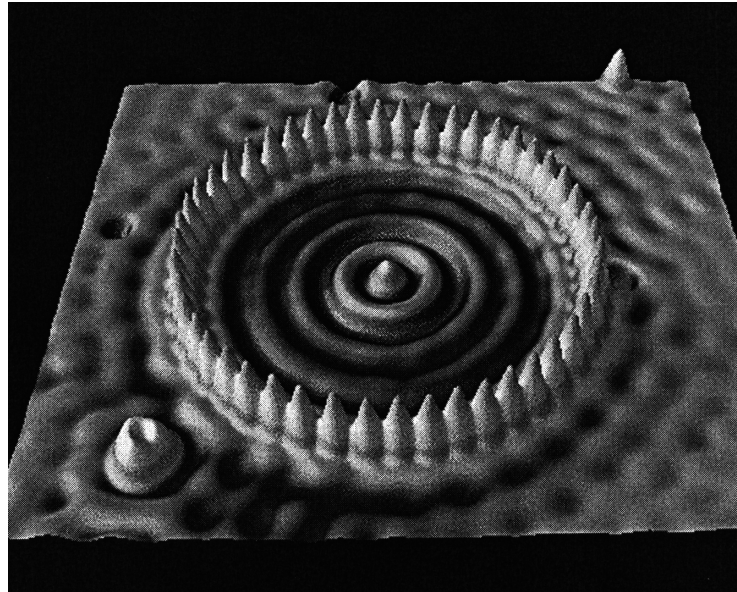
Tabellen viser videre at 2. eksiterte nivå er $E_1^{(2)} = (\hbar\Pi_1^{(2)})^2/(2\mu a^2)$, med $\Pi_1^{(2)} = 5.1356$. Her har altså de to tilstandene $L_z = \pm 2\hbar$, og energiøkningen henger sammen med at vi har fått en raskere vinkelvariasjon, gjennom faktorene $e^{\pm 2i\phi}$.

Den radielle eksitasjonen kommer først inn i bildet for 3. eksiterte nivå, som er $E_2^{(0)} = (\hbar\Pi_2^{(0)})^2/(2\mu a^2)$, med $\Pi_2^{(0)} = 5.5201$. Her er vi tilbake til en rotasjonsfri tilstand $\psi_2^{(0)} = R_2^{(0)}(r)$, med $m = 0$ og $n_r = n - 1 = 1$. Den radielle eksitasjonen kommer til uttrykk ved at $R_2^{(0)}(r)$ har et nullpunkt for $r \approx 0.44a$ (se figuren). Dette gir raskere krumning og altså høyere energi enn for tilstandene på 1. og 2. eksiterte nivå. Legg ellers merke til at nullpunktet (noden) til radialfunksjonen svarer til en sirkulær “node-linje” for bølgefunksjonen $\psi(r, \phi)$.

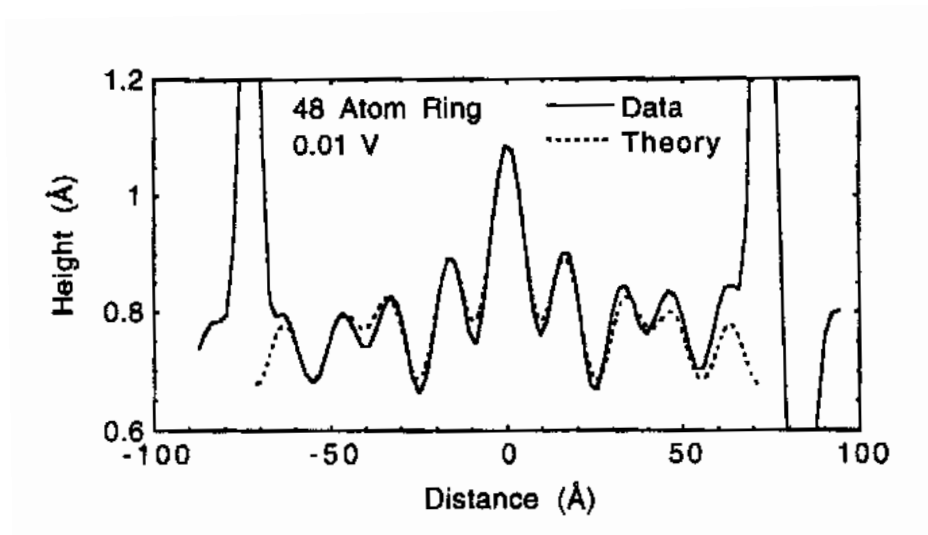
Noe av moralen i denne diskusjonen er at rekkefølgen av energinivåene bestemmes av “nullpunkts-verdiene” $\Pi_n^{(m)}$ for Bessel-funksjonen; jf tabellen. Dersom vi tenker oss at denne todimensjonale boksen “fylles” med et antall identiske ikke-vekselvirkende fermioner, så bestemmer tabellen **fyllingsrekkefølgen**, med to fermioner pr romlig tilstand $\psi_n^{(m)}(r, \phi)$. Dette er analogt med fyllingsrekkefølgen ved oppbygningen av atomer. Partikkeltettheten for en slik fler-fermion-tilstand vil bli rotasjons-symmetrisk, siden den er en overlaging av sannsynlighetstetthetene

$$|\psi_n^{(m)}(r, \phi)|^2 = [R_n^{(m)}(r)]^2.$$

Figuren viser et sveipe-tunnelerings-bilde tatt av en overflate av kopper. På denne overflata er det laget en “kvante-innhengning” (“quantum corral”) vha 48 jern-atomer. Dette bildet forteller veldig tydelig at “kotekartet” over elektrontettheten på overflata inne i innhengningen er rotasjons-symmetrisk.



Figuren nedenfor viser et forsøk på å etterligne den observerte elektrontettheten vha tilstander for en sylindrisk boks.



Det er komplikasjoner ved en slik sammenligning: Overflate-elektronene i kopper utgjør ikke et rent todimensjonalt system. Jern-atomene gir ingen *boks*, men snarere en brønn (eller en innhengning avgrenset av en endelig barriere), osv. På tross av slike innvendinger er det vel likevel klart at sveipebildet gir en tydelig demonstrasjon av fysikken i diskusjonen ovenfor.