

INNLEDNING TIL KVANTEMEKANIKK

①

[PCH 1; IØ1;

Klassisk fysikk ca 1900 :

- Newtons lover [I. Newton, 1687]. Galileisk relativitet.
- Termodynamikk. Statistisk mekanikk. [W. Thomson (Lord Kelvin), 1854; L. Boltzmann, 1875;]
- Lys er bølger. Maxwells ligninger. [J. C. Maxwell, 1865; H. R. Hertz, 1887] Interferens, diffraksjon.
- Materie er partikler. Atomer (gresk: udelelig). Elektron(er), med negativ ladning, i jevnt fordelt positiv ladningsfordeling ("rosinboller").
[J. J. Thomson, 1897, NP1906] (NP: Nobel Prize)

Fullstendig, korrekt teori?

Nei, diverse problemer med klassisk fysikk, både før og etter 1900.

Vi ser på noen av disse.

- Linjespektre: Ulike stoffer absorberer og emitterer elektromagnetisk stråling med bestemte bølgelengder.

Eksempler:

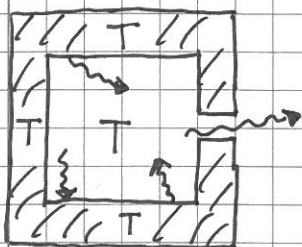
Na, gult lys, $\lambda = 589 \text{ nm}$ [T. Melville, 1752]

Mørke linjer i solspekteret pga absorpsjon i atmosfæren [W. H. Wollaston, 1802; J. von Fraunhofer, 1814 (574 mørke linjer)]

H, Balmer-serien, $\lambda = 410, 434, 486, 656 \text{ nm}$ i den synlige delen av spekteret [J. Balmer, 1885]

- Lysfarten i vakuum er den samme i alle inertialsystemer. Galileisk relativitet holder ikke for lys. [Michelson (NP1907) & Morley, 1887]

- Stråling fra svart legeme:

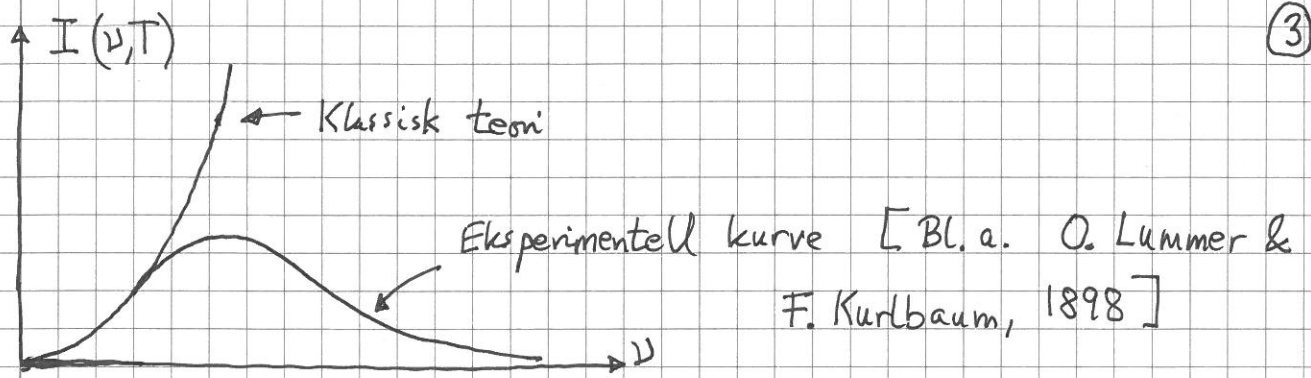


$I(\nu, T)$ = utstrålt effekt pr flateenhet og frekvensenhet

dvs: $I(\nu, T) \cdot d\nu$ = utstrålt effekt pr flateenhet med frekvenser mellom ν og $\nu + d\nu$.

Klassisk fysikk gir $I(\nu, T) = \frac{2\pi \nu^2}{c^2} k_B T$, Rayleigh-Jeans lov [Rayleigh 1900; Jeans 1905]

(Stående EM bølger i hulrommet, "svingemoder" (harmonisk oscillator), midlere energi $2 \cdot \frac{1}{2} k_B T$ pr svingemode i følge ekvipartisjonsprinsippet.)



Klassisk fysikk OK for lave frekvenser (evt. høye temperaturer), men helt feil for høye frekvenser.

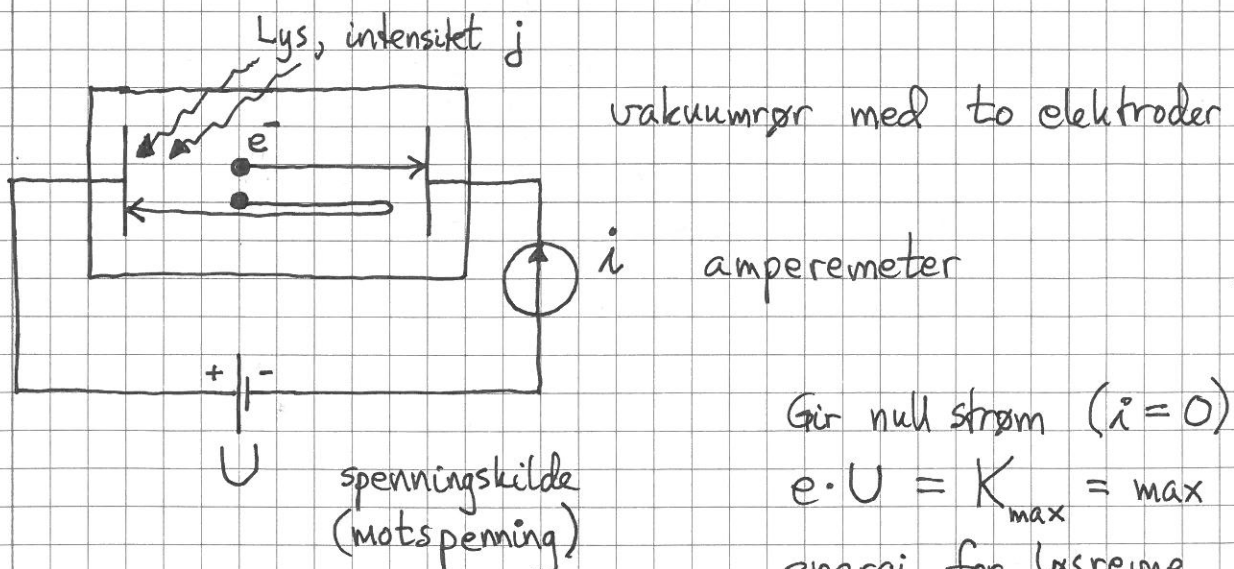
"Ultrafiolett katastrofen": Total energistrøm

$$j(T) = \int_0^{\infty} I(\nu, T) d\nu \rightarrow \infty \text{ i klassisk modell fordi}$$

$$I \rightarrow \infty \text{ når } \lambda = \frac{c}{\nu} \rightarrow 0.$$

Fotoelektrisk effekt:

Lys (EM stråling) inn mot metalloverflate slår løs elektroner fra metallet.



Exp: H. Hertz 1887; P. Lenard 1900;
R. Millikan 1914 (NP 1923)

Gir null strøm ($i = 0$) når
 $e \cdot U = K_{\max} = \max k_{\text{kin.}}$
 energi for løsrevne
 elektroner;
 $U = \text{terskelspenning}$

Med klassisk elektromagnetisme:

- $j = c \cdot \epsilon_0 \cdot E^2$ er uavhengig av ν

$\Rightarrow$ forventer U og i uavhengig av ν

- Siden elektronene er bundet til metallet, kreves en minsteenergi W , frigjøringsarbeidet, for å rive løs elektroner

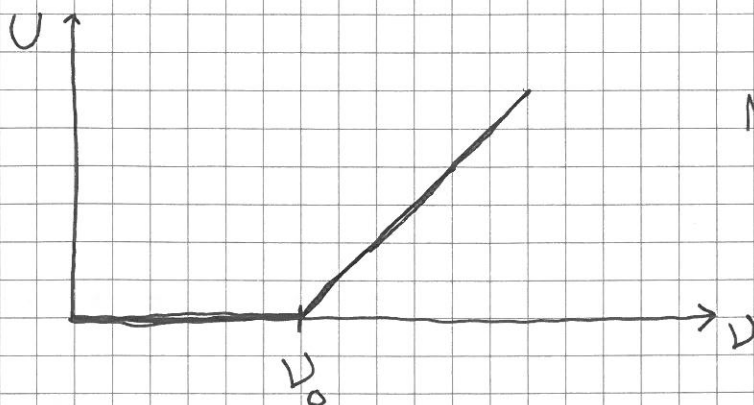
$\Rightarrow$ forventer en viss tid for å få $i > 0$ hvis j er tilstrekkelig liten

- Økende j betyr økt energi absorbert av elektroden

$\Rightarrow$ forventer økt $K_{\max}$ og dermed økt terskelspenning U når j økes; forventer U uavhengig av ν

Ekspementene viste at dette er helt feil:

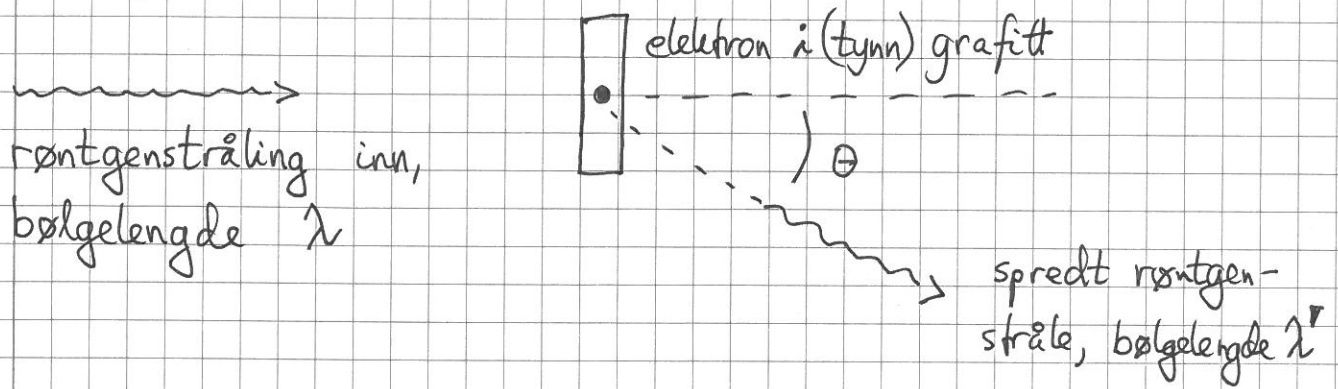
- Strømmen i avhenger av frekvensen ν .
- Monokromatisk lys med $\nu < \nu_0$ (= terskeffrekvensen) gir $i = 0$, uavhengig av j .
- Med $\nu > \nu_0$ blir $i > 0$ umiddelbart.
- Terskelspenningen U avhenger av ν , men ikke av j .
 $U = 0$ hvis $\nu < \nu_0$. U øker lineært med ν hvis $\nu > \nu_0$:



Millikan 1914 (NP 1923)

(5)

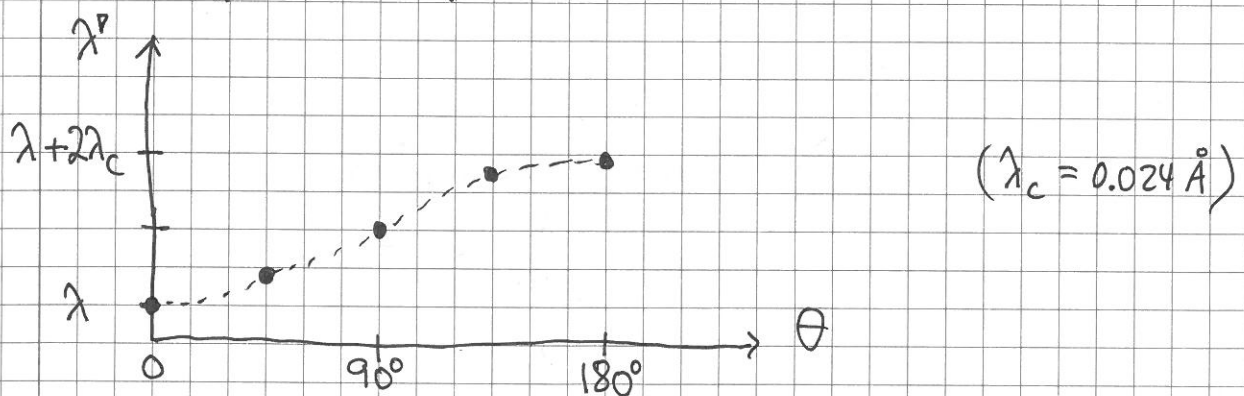
- Compton - effekten :



Klassisk teori (Maxwell):

Oscillerende felt $\vec{E}(t)$ i innkommende EM bølge med frekvens $\nu = c/\lambda$ påvirker elektronet med oscillerende kraft $\vec{F}(t) = -e\vec{E}(t)$. Elektronet settes i svingninger med samme frekvens ν , og sender dermed ut EM bølger med samme frekvens ν , dvs $\lambda' = \lambda$.

A. H. Comptons eksperiment (1923, NP 1927):



- C_V for 2-atomige gasser:

Klassisk termodynamikk tilsier $C_V = \frac{7}{2}R$ for molar varmekapasitet (3 kvadratiske bidrag til indre energi pga translasjon, 2 pga rotasjon, 2 pga vibrasjon).

Exp. gir $C_V \approx 2.5R \dots!$ (ved romtemperatur)

- Interferens med partikler:

1925-1928: Davisson & Germer; diffraksjon av elektroner mot Ni-krystall

[Davisson & Thomson NP 1937]

1961: Dobbeltspalte-eksperiment med elektroner; Jönsson (Interferens)

1989: Tonomura et al; dobbeltspalte-eksp. med elektroner (ett elektron om gangen!)

2003: Zeilinger et al; interferens med C_{60} -molekyler (små fotballer, "buckyballs") sendt (ett om gangen!) gjennom diffraksjonsgitter

Må ha bølger for å observere interferens og diffraksjon!

Elektroner (og større partikler) kan ikke bare være partikler!

Tonomura et al, J. Am. Phys 57, 117 (1989):

Elektronstrøm $1.6 \cdot 10^{-16} \text{ A} = 10^3 \text{ e}^-$ pr sekund.

Elektronfart $v \approx c/2 = 1.5 \cdot 10^8 \text{ m/s}$; Veilengde ca 1.5 m

$\Rightarrow$ Reisetid ca $10^{-8} \text{ s} \ll$ Midlere ankomsttid mellom to elektroner, som er ca 10^{-3} s

$\Rightarrow$ Elektronene reiser alene! De interfererer med seg selv!

Teoretisk utvikling (kortfattet)

• Stråling fra svart legeme

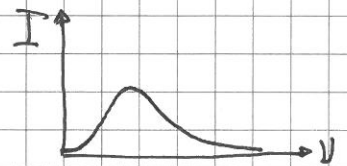
Max Planck, 1900, "i desperasjon", [NP 1918]
antok at energien i strålingen med frekvens ν
er kvantisert:

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

Plancks
kvantehypotese

Gir utstrålt effekt pr flate- og frekvensenhet

$$I(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$



som stemmer med eksperimentene når

$$h \approx 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (\text{Plancks konstant})$$

[For gitt frekvens ν gir statistisk mekanikk en midlere energi

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n \cdot p_n, \text{ med } p_n = \frac{e^{-E_n/k_B T}}{\sum_n e^{-E_n/k_B T}},$$

som med $E_n = n h \nu$ gir

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \cdot \text{Faktoren } \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \text{ er essensielt}$$

antall svingemoder pr frekvensenhet ("tilstandstettheten"),
den samme i klassisk fysikk og i kvantemekanikk.]

$$\left[\text{Vis at } j(T) = \int_0^\infty I(\nu, T) d\nu = \sigma T^4 \text{ og bestem } \sigma. \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15} \right]$$

$$\text{Vis at } I \rightarrow I(\text{klassisk}) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \cdot k_B T \text{ når } h\nu \ll k_B T$$

• Fotoelektrisk effekt

• A. Einstein, 1905 [NP 1921]: Energien i lyset kommer i kvantiserte, diskrete porsjoner, $E = h\nu$ (med samme h som innført av Planck). Dus, selve lyset må (også) betraktes som partikler!

Elektroner i metallet kan ^{bare} absorbere hele energien $h\nu$.

Løsrivelse fra metallet krever dermed $h\nu \geq W$

(W = frigjøringsarbeidet).

Energibevarelse $\Rightarrow K = h\nu - W$

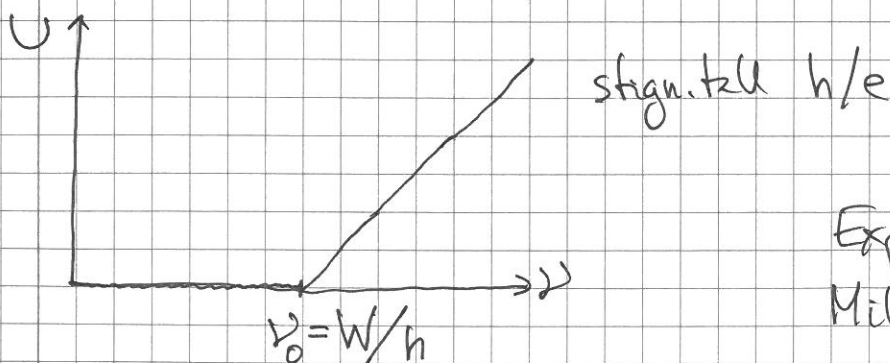
$\Rightarrow$ Må ha $\nu > \nu_0 = \frac{W}{h}$ (grensefrekvensen) for å få $K > 0$,
dus strøm i kretsen.

$\Rightarrow$ Terskelspanning U (dus påkrevd spanning for å få $i=0$)
er da bestemt av

$$e \cdot U = K_{\text{max}} = h\nu - W$$

$$\Rightarrow \boxed{U = \frac{h}{e} \nu - \frac{W}{e}}$$

som stemmer med eksp:



Exp:
Millikan, 1909

• Compton-effekten [se Mek.Fys. #2014]

9

Compton forklarte sine egne eksperimenter med partikkel-bilde av den E.M. strålingen:



Foton

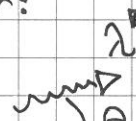
λ, E

$$p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$$

m_e

Elektron; $E_e = m_e c^2$

Etter:



λ'

θ

$$\Rightarrow \lambda' = \lambda + \lambda_c (1 - \cos \theta) ;$$

$$\lambda_c = h/m_e c = 0.024 \text{ \AA} \quad (\text{elektronets Compton-bølgelengde})$$

... Som stemmer med eksperimentene.

Overbevisende bekræftelse av Einsteins hypotese:

Lys ~~er~~ har både bølge- og partikkel-egenskaper!

Bølger: $\lambda, \nu = c/\lambda$

Partikler: $E = h\nu, p = h/\lambda$

• Linjespektre og Bohrmodellen

→ Balmer-serien for H (synlig område): (Balmer, 1885)

$$\frac{1}{\lambda_n} = R_{\infty} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right); \quad n = 3, 4, 5, 6$$

med $R_{\infty} \approx 10^7 \text{ m}^{-1}$ (Rydberg-konstanten)

→ Rutherford, 1911:

Exp. med α -partikler (=heliumkerner, He^{2+}) mot tynt metallfolie gav resultater som tydet på at atomenes positive ladning var samlet i en liten kjerne (med negative elektroner omkring).

Dvs: Ikke i samsvar med Thomsons atom-modell (1897).

→ Plancks kvantehypotese (1900); Einstein (1905):

Strålingsenergi absorberes og emitteres i enheter av $h\nu = hc/\lambda$



Dette danner balgrunnen for N. Bohrs ideer og postulater ca 1913. [NP 1922]

Bohrs postuler/ideer:

11

- ① Stasjonære tilstander, med bestemte energier.

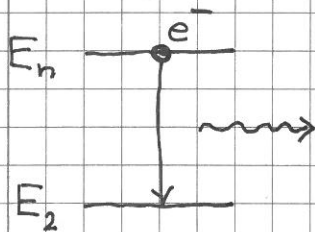
Klassisk: e^- i H-atomet er akselerert i $\vec{E}$ -feltet fra kjernen $\Rightarrow$ taper energi i form av EM stråling.

Bohr antok at utstråling er forhindret og energien bevart.

- ② Kvantepresprang.

Balmer-serien samt Planck og Einsteins ideer

$\Rightarrow$ Bohr antok elektronoverganger mellom diskrete stasjonære energitilstander via absorpsjon eller emisjon av foton.



$$h\nu = h \frac{c}{\lambda} = E_n - E_2 = hc \cdot R_\infty \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

som antyder energinivåer i H-atomet:

$$E_n = -hcR_\infty / n^2$$

$$\approx - (6.6 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 10^7 / 1.6 \cdot 10^{-19}) \text{ eV} / n^2$$

$$\approx -13.6 \text{ eV} / n^2 \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

$$[\text{Energienheten } 1 \text{ Ry} = hcR_\infty \approx 13.6 \text{ eV}]$$

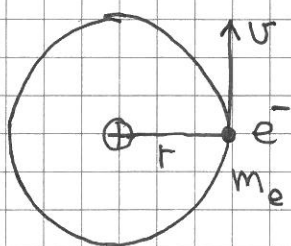
③ Elektronet i klassiske sirkelbaner rundt kjernen.

Newtons 2. lov, med $F = e^2 / 4\pi\epsilon_0 r^2$ og $a = v^2 / r$ gir da

$$v = \sqrt{e^2 / 4\pi\epsilon_0 m_e r}, \quad K = e^2 / 8\pi\epsilon_0 r, \quad \text{og total energi}$$

$$E = K + V = e^2 / 8\pi\epsilon_0 r - e^2 / 4\pi\epsilon_0 r = -e^2 / 8\pi\epsilon_0 r$$

④ Elektronets dreieimpuls er kvantisert.



$$L = |\vec{r} \times \vec{p}_e| = r \cdot m_e v$$

Bohr antok $L = n \cdot \hbar$ ($n = 1, 2, 3, \dots$)

med $\hbar = h / 2\pi \approx 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ (Den reduserte Plancks konstant)

Gir baner med radius

$$r_n = n^2 \cdot 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2 = n^2 \cdot a_0 \quad \left(a_0 \approx 0.529 \text{ \AA}; \text{Bohrradien} \right)$$

og energinivåer

$$E_n = - \left(m_e e^4 / 32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \right) / n^2$$

evt

$$E_n = - \frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 / n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

med

$$m_e c^2 \approx 0.511 \text{ MeV} \quad (\text{hvileenergien})$$

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

Gir $R_\infty = m_e e^4 / 8\epsilon_0^2 h^3 c \approx 10^7 \text{ m}^{-1}$, som stemmer

med Balmer's eksperimenter! [R_∞ er målt med ca 15 siffrers nøyaktighet!]

Suksess! ? Bare delvis:

- L er kvantisert og prop. med $\hbar$, men $L=0$ i grunntilstanden i H .
- Modellen fungerte mindre bra på andre atomer enn H .

Neste skritt i riktig retning:

Louis de Broglie, 1923 [NP1929]:

Hvis lys har både bølge- og partikkelegenskaper, bør det samme gjelde for "massive" partikler, som f.eks. elektroner!

For lys gjelder: $E = h\nu = pc$; $p = h\nu/c = h/\lambda$

de Broglie antok dermed at partikler ~~har~~ med impuls p og energi E har

$$\boxed{\lambda = h/p, \quad \nu = E/h} \quad \text{de Broglies hypotese}$$

Rimelig nå å anta "stående elektroner" i Bohrs sirkelbaner:

$$2\pi r_n = n\lambda \Rightarrow \underline{L_n} = r_n p = \frac{n\lambda}{2\pi} \cdot p = \underline{n\hbar}$$

dvs Bohrs kvantiseringsantagelse (4) !

[... som er feil, pga (3), Bohrs antagelse om klassiske sirkelbaner]

SCHRÖDINGERLIGNINGEN

(14)

[PCH 1-3; IØ 1-3; DFG 1-2]

Vi vet at klassiske mekaniske bølger (transversale bølger på streng og longitudinale ~~lyd~~ lydbølger) og EM bølger beskrives av bølgeligningen

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$



med løsning(er) $y(x,t) = y(x \pm vt)$, f.eks. harmonisk bølge

$$y(x,t) = A \sin(kx - \omega t) ; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu,$$

$$v = \lambda/T = \omega/k \quad (\text{fasefart}),$$

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

Erwin Schrödinger (1925):

Hva slags bølgeligning kan ha de Broglies

"partikkelbølger" som løsninger?

Enkleste eksempel:

Fri partikkel med $\vec{v} = v \hat{x}$, impuls $\vec{p} = mv \hat{x}$,
dvs energi $E = K = \frac{1}{2}mv^2 = p^2/2m$. (Velger $V = 0$.)

Partikkelens bølgeegenskaper:

$$\lambda = h/p \Rightarrow k = 2\pi/\lambda = p/\hbar$$

$$\nu = E/h \Rightarrow \omega = 2\pi\nu = E/\hbar$$

Prøver bølgeløsningen $\Phi(x,t) = \cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)$.

Denne $\Phi(x,t)$ kan ikke oppfylle en lineær diff.ligning som inneholder deriverte av Φ mhp x og t , fordi $E = p^2/2m$, og $\partial\Phi/\partial t \sim E \cdot \sin(\dots)$ mens $\partial^2\Phi/\partial x^2 \sim p^2 \cdot \cos(\dots)$.

$\Phi(x,t) = \sin\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)$ går like dårlig.

Men kombinasjonen

$$e^{i(px - Et)/\hbar} = \cos\left(\frac{px - Et}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{px - Et}{\hbar}\right)$$

går bedre, fordi derivasjon av $\exp(\dots)$ gir $\exp(\dots)$ tilbake!

$\Rightarrow$ Prøver bølgefunksjonen

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

og finner diff.ligning som løses av $\Psi(x,t)$, med betingelsen at $E = p^2/2m$.

Da er

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi \quad \text{og} \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2\Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi$$

slik at bølgeligningen

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

oppfylles av den plane bølgen $\exp[i(px - Et)/\hbar]$ og samtidig gir $E = p^2/2m$.

Dette er Schrödingerligningen (SL), for

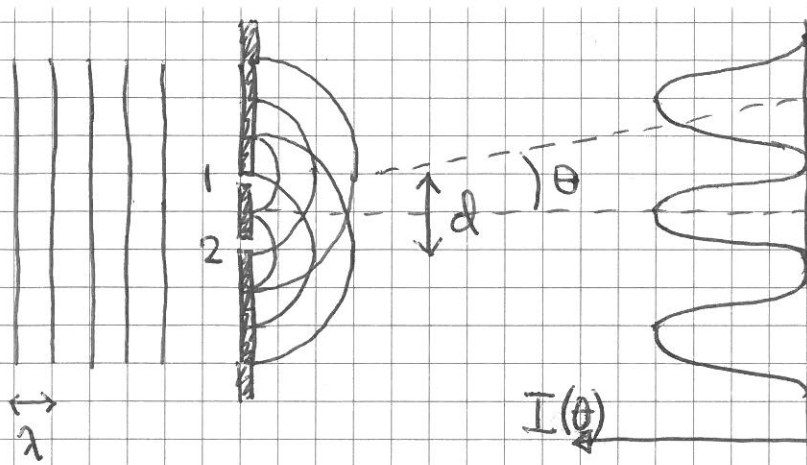
(spesialtilfellet) fri partikkel med impuls $\vec{p} = p \hat{e}_x$,
og energi $E = K = p^2/2m$ (har valgt $V=0$).

Merk:

- SL er den enkteste diff.lign. som oppfylles av plane de Broglie-bølger (for fri partikkel; ikke-relativistisk). Og den viser seg å fungere (også for annet enn $V=0$).
- Reelle løsninger er ikke mulig. (Vil gi reell $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ og imaginær $i\hbar \partial \Psi / \partial t$.)
- Fysiske målbare størrelser er reelle. Den komplekse bølgefunksjonen Ψ kan derfor ikke direkte representere en målbart størrelse.

Hvordan skal vi da tolke Ψ ?

Dobbeltspalteforsøk med lys (Young, 1802)
setter oss på sporet.

Plan
bølge

$$\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2 ; \quad I \sim E^2 = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$$

Konstruktiv interferens når $\vec{E}_2 \approx \vec{E}_1$:

$$I \sim 4E_1^2 \quad (d \sin \theta = n\lambda)$$

Destruktiv interferens når $\vec{E}_2 \approx -\vec{E}_1$:

$$I \approx 0 \quad (d \sin \theta = (n + 1/2)\lambda)$$

Men: Med ett og ett foton mot dobbeltspalen fås tilfeldige treff på skjermen! Først etter svært mange fotontreff oppnås interferensmønstret $I(\theta)$.

Dvs: $I(\theta)$ tilsvarende sannsynlighetsfordelingen for hvor enkeltfotoner vil treffe skjermen.

Max Born, 1926, trolig inspirert av dette: [NP1954]

$$|\Psi(x,t)|^2 dx = \text{sannsynligheten for å finne partikkelen mellom } x \text{ og } x+dx \text{ ved tidspunktet } t$$

$$\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = \text{sannsynlighetstettheten}$$

$$\text{Normering: } \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (\text{Må jo være et eller annet sted!})$$

Bølgepakker

- Planbølgen for fri partikkel, $\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar}$, gir

$$|\Psi(x,t)|^2 = 1$$

og dermed

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \infty$$

dvs ikke normerbar! [" Ψ er ikke kvadratisk integrerbar"]

- Kan ikke beskrive en lokalisert partikkel.

Like sannsynlig å finne partikkelen hvor som helst, når impulsen p er veldefinert.

Analogi med lys: Ren harmonisk bølge med

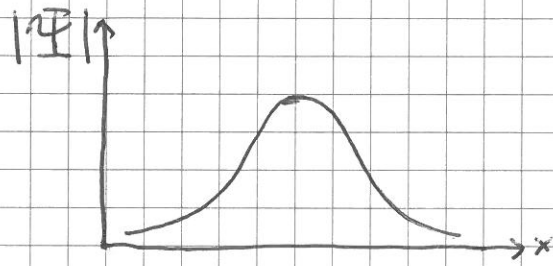
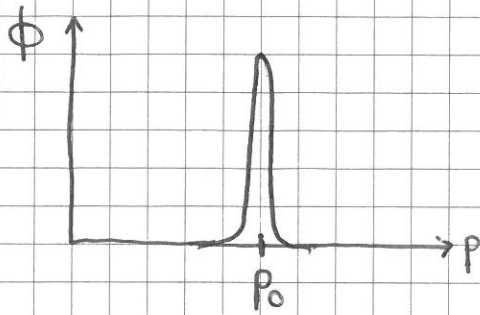
$\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0 \sin(kx - \omega t)$ har veldefinert bølglengde $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ og frekvens $\nu = \omega/2\pi$, men strekker seg ut over hele x -aksen.

Partikkelen kan lokaliseres (avgrenses på x -aksen) ved å beskrive den med en sum av plane bølger med ulike impulser:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{i(px-Et)/\hbar} dp \quad (\text{Bølgepakke})$$

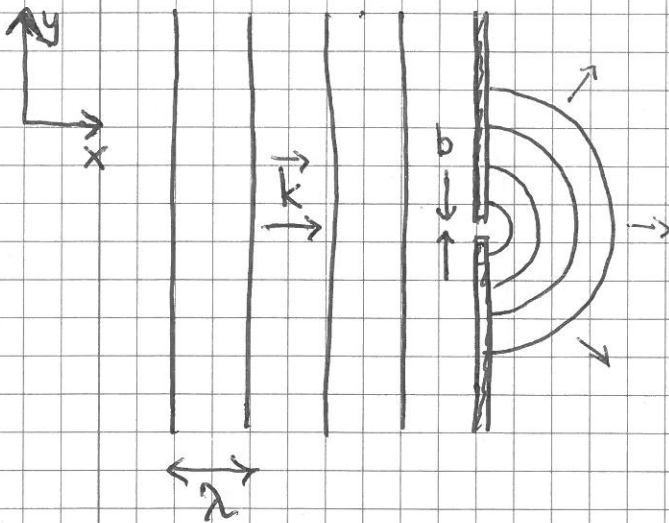
med $|\phi(p)| = \text{bidraget til } \Psi(x,t) \text{ med impuls } p.$

Skarp $\phi(p)$ gir bred $\Psi(x/t)$, og omvendt:



Skal senere vise at $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ (Heisenbergs uskarphetsrelasjon).

Analogi med lys:



Spalte med bredde $\Delta y = b$ gir spredning i bølgetallsvektoren $\vec{k}$ til høyre for skjermen. Til venstre for skjermen er $\Delta y = \infty$ og $\Delta \vec{k} = 0$.

Merk at vi her essensielt snakker om Fourieranalyse:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \Leftrightarrow \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx$$

(med $k = p/\hbar$)

Operatører, egenfunksjoner og egenverdier

$\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial}{\partial t}$, $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, ∇ , ∇^2 osv kalles operatøren:

De må operere ("virke") på noe, typisk en funksjon, for å resultere i noe!

Hvis en operator, f.eks $\frac{\partial}{\partial x}$, virker på en funksjon $f(x)$ og gir som resultat samme funksjon ganget med en

konstant A , sier vi at $f(x)$ er en egenfunksjon til operatoren $\frac{\partial}{\partial x}$, med tilhørende egenverdi A :

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) = A f(x)$$

$\uparrow$
operator

$\uparrow$
egenfunksjon

$\uparrow$
egenverdi

Standard notasjon:

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

hatt over A betyr
at det er en operator

=

$A f(x)$

A uten hatt betyr at A er
egenverdien til operatoren $\hat{A}$

Eksempel:

$$\frac{\partial}{\partial x} \cos(px/\hbar) = -(p/\hbar) \sin(px/\hbar)$$

$\Rightarrow \cos(px/\hbar)$ er ikke en egenfunksjon til operatoren $\partial/\partial x$

$$\frac{\partial}{\partial x} e^{ipx/\hbar} = (ip/\hbar) e^{ipx/\hbar}$$

$\Rightarrow e^{ipx/\hbar}$ er en egenfunksjon til $\partial/\partial x$,
med egenverdi $ip/\hbar$

$$(*) \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{i(px-Et)/\hbar} = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{ip}{\hbar} e^{i(px-Et)/\hbar} = p e^{i(px-Et)/\hbar}$$

$\Rightarrow$ Planbølgen $\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar}$, som beskriver en fri partikkel med veldefinert impuls p , er en egenfunksjon til operatoren $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ med egenverdi lik nettopp impulsen p

$\Rightarrow$ Svært naturlig å kalle $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ for en impulsoperator, og skrive

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Eigenverdligningen $(*)$ kan da skrives slik:

$$\hat{p} \Psi = p \Psi$$

For fri partikkel: $E(p) = p^2/2m$

$\Rightarrow$ Vi prøver operatoren $\frac{1}{2m} \hat{p}^2 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(px-Et)/\hbar} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{ip}{\hbar} \right)^2 e^{i(px-Et)/\hbar} \\ &= \frac{p^2}{2m} e^{i(px-Et)/\hbar} \\ &= E e^{i(px-Et)/\hbar} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Naturlig å kalle $\hat{E} = \hat{p}^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ for en energioperator, fordi egenverdien er energien E .

Energien kalles gjerne Hamiltonfunksjonen H .

$\Rightarrow$ Vi lar $\hat{E} \rightarrow \hat{H} = \text{Hamiltonoperatoren}$.

For fri partikkel (med $V=0$): $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Som ventet endres lite dersom $V=V_0 = \text{konstant} \neq 0$.

Da er $E = K + V = p^2/2m + V_0$, og plan bølge,

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

er fortsatt egenfunksjon til Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0,$$

med egenverdi $E = p^2/2m + V_0$.

SL blir nå

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right) \Psi = \hat{H} \Psi$$

Oppskrift for å finne $\hat{H}$: (i en dimensjon)

(23)

- Uttrykk klassisk energi, $K + V$, ved posisjonskoordinat(er) og impuls(er)
- Erstatt p med $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

Hvordan beskrive partikkel påvirket av kraft F ?

Eks: e^- i H-atom, $F = e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$, $V(r) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r$

Nå er $\vec{p}$ ikke lenger veldefinert, og generelt heller ikke $p = |\vec{p}|$, og dermed ikke $\lambda = h/p$.

$\Rightarrow$ Argumentasjonen fra harmonisk de Broglie-bølge til bølgeligning blir mindre plausibel!

[Dog: Med konstant $r = |\vec{r}|$ er $p = |\vec{p}|$ veldefinert for e^- i H-atomet, og dermed også $\lambda = h/p$.]

$\Rightarrow$ Ikke åpenbart, men naturlig, for Schrödinger å prøve samme ligning som med $V = \text{konstant}$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi$$

... som skulle vise seg å fungere !!

Generalisering til 3D:

$$p_x \rightarrow \vec{p} ; \hat{p}_x \rightarrow \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla ; V(x) \rightarrow V(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \left\{ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-(\hbar^2/2m) \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi \right\}$$

SL i 3D

Stasjonære tilstander og tidsuavhengig Schrödingerligning

[PCH 2.3] [DFG 2.1] [IØ 1.7.b, 2.1.a, 2.7.a] ("TUSL")

For fri partikkel:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |e^{i(px-Et)/\hbar}|^2 = 1$$

dvs sanns. fordelingen er uavhengig av tida t,
og vi kaller $\Psi(x,t)$ en stasjonær tilstand.

Anta tidsuavh. potensial $V(x)$ (ofte tilfelle!)
 $\Rightarrow \hat{H}$ uavh. av $t \Rightarrow$ SL kan separeres:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot T(t) \quad \text{settes inn i SL:}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \{ \psi(x) \cdot T(t) \} = \hat{H} \{ \psi(x) \cdot T(t) \}$$

$$\Rightarrow i\hbar \psi(x) \frac{\partial T(t)}{\partial t} = T(t) \hat{H} \psi(x)$$

$$\Rightarrow \underbrace{i\hbar \frac{\partial T / \partial t}{T}}_{\text{kun avh. av } t} = \underbrace{\frac{\hat{H} \psi}{\psi}}_{\text{kun avh. av } x}$$

$\Rightarrow$ Begge må være lik en og samme konstant,
som vi kaller E :

$$\frac{dT}{T} = \frac{1}{i\hbar} E dt = -\frac{iE}{\hbar} dt$$

$$\Rightarrow T(t) = \text{konstant} \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

Dessuten:

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

TUSL
(i 1D)

(25)

Total løsning:

$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

$$\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = |\Psi(x)|^2, \quad \text{uavh. av } t,$$

med andre ord, en stasjonær tilstand!

Som regel representerer hamiltonoperatoren $\hat{H}$ energien

$\Rightarrow$ TUSL er en egenverdligning, der egenverdiene E gir oss de mulige energiene systemet kan ha.

Generelt vil TUSL ha et antall diskrete egenverdier $E_1, E_2, \dots$ (endelig eller uendelig mange) og/eller energintervall(er) (ett eller flere) der alle ~~eg~~ verdier av E er mulig, dvs et diskret og/eller et kontinuerlig spektrum av energier.

Siden TUSL ^{og SL} er lineære, er den generelle løsningen av SL en vilkårlig sum (lineær kombinasjon) av stasjonære tilstander:

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

(+ eventuelt et integral over kontinuerlige spektra)

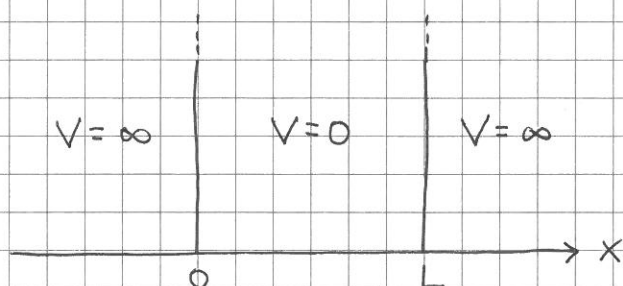
Partikkel i boks, i én dimensjon

[PCH 3.2] [D7G 2.2] [IØ 2.1]

Enkelt, illustrativt eksempel:

En partikkel, masse m , i potensialet

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



[Klassisk analogi: Ball som spretter fram og tilbake mellom to harde vegger; elastiske kollisjoner med veggene; $g=0$. Vilkårleg energi $E=K=\frac{1}{2}mv^2$, hastighet $v=\pm\sqrt{2E/m}$.]

Har tidsuavhengig $V = V(x)$

$\Rightarrow$ Løsninger av SL er stasjonære tilstander

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

der $\psi(x)$ er egenfunksjoner til

$$\hat{H} = \hat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

med tilhørende energieigenverdier E ,

ders løsninger av TUSL,

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x)$$

Partikkelen kan ikke være utenfor $[0, L]$, der $V = \infty$

$$\Rightarrow \psi(x) = 0 \text{ utenfor } [0, L]$$

Grensebetingelser:

TUSL kan skrives på formen

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \quad ; \quad \psi'' = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

Anta endelig V . Hvis ψ er diskontinuerlig et sted, blir ψ' og ψ'' uendelige der.

Men endelig V betyr endelig ψ'' .

$\Rightarrow \psi$ må være kontinuerlig

og $\psi' \text{ ————— } || \text{ ————— }$

Anta så at $V \rightarrow \infty$ et sted (som her, i $x=0$ og $x=L$).

Da må $\psi \rightarrow 0$ eller $\psi'' \rightarrow \infty$ (eller begge deler).

$\Rightarrow \psi'$ ikke (nødvendigvis) kontinuerlig der

V blir uendelig

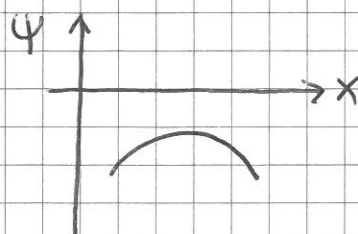
For $0 < x < L$: $\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$

Forventer $E \geq 0$, som stemmer: Hvis $E < 0$,

~~er~~ $\psi''/\psi > 0 \Rightarrow$ krumning bort fra x-aksen,



eller



$\Rightarrow$ umulig å oppfylle både $\psi(0)=0$ og $\psi(L)=0$

Hvis med $E=0$ (som er OK klassisk) ?

Da er $\psi''=0$, dvs $\psi(x)=Ax+B$, som med

$\psi(0)=\psi(L)=0$ gir $\psi(x)=0$; "ingen partikkel"!

$\Rightarrow \psi'' + k^2 \psi = 0$; $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $E > 0$

Generell løsning:

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

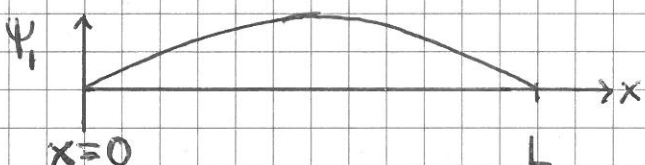
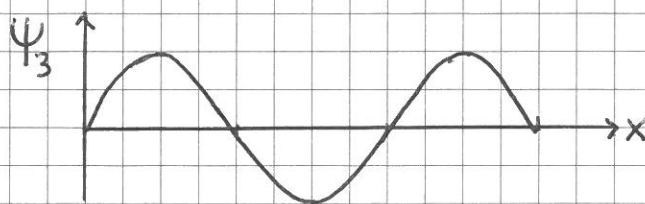
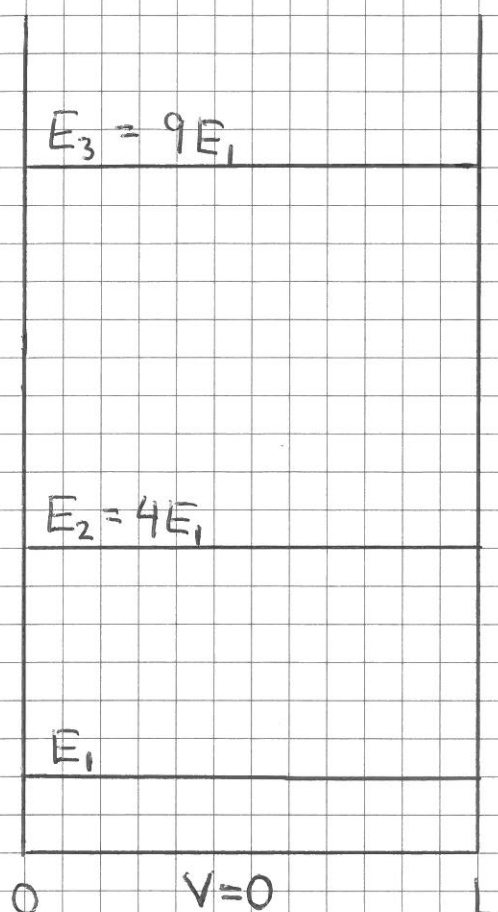
Kontinuerlig ψ

$\Rightarrow \psi(0) = B = 0$; $\psi(L) = A \underbrace{\sin kL} = 0$ ($A \neq 0$)

Gir kvantisering av k , og dermed E .

$$\sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi$$

$$\Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2; \quad n=1, 2, 3, \dots$$



- Har alltid energikvantisering for slike bundne tilstander.
- Ligner veldig på stående bølger på en streng, med grunn tone med $\lambda_1 = 2L$. Har her en grunntilstand $\psi_1(x)$, dvs tilstanden med lavest energi, med bølgetall $k_1 = \pi/L$ og dermed bølgelengde $\lambda_1 = 2\pi/k_1 = 2L$.
- $\psi_n(x)$ har $n-1$ nullpunkter, som naturlig nok øker med økende relativ krumning $|\psi_n''/\psi_n|$, dvs med økende energi $E_n = \hbar^2 |\psi_n''/\psi_n| / 2m$.

- Har symmetrisk $V(x)$ om $x = L/2$ og fant symmetriske og antisymmetriske tilstander (hhv $\Psi_1, \Psi_3, \dots$ og $\Psi_2, \Psi_4, \dots$), som forventet:

Da er sannskettheten $|\Psi_n(x)|^2$ symmetrisk for alle n .

- Normering: Hvis partikkelen er i en stasjonær tilstand, dvs med gitt energi E_n , må vi ha

$$\int_0^L |\Psi_n(x)|^2 dx = 1$$

Siden $\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ "svinger" n hele perioder mellom 0 og 1 på intervallet $0 < x < L$, med middelværdi $\frac{1}{2}$, blir $\int_0^L \sin^2(n\pi x/L) dx = \frac{1}{2}L$ for alle $n=1,2,3,\dots$

$$\Rightarrow |A|^2 = \frac{2}{L} \Rightarrow |A| = \sqrt{2/L} \Rightarrow A = e^{i\beta} \sqrt{2/L}$$

med vilkårlig, reell β : $|e^{i\beta}| = 1$, så valg av β påvirker ikke den fysiske størrelsen $|\Psi_n(x)|^2$.

Med valget $\beta = 0$:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}; \quad k_n = \frac{n\pi}{L}; \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

$$\text{og } \Psi_n(x,t) = \Psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (\text{den stasjonære tilstanden})$$

• Ortogonalitet:

Med "vånlige" vektorer:

$$\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_2 = 0 \quad \text{når} \quad \vec{V}_1 \perp \vec{V}_2$$

$$\text{Normering: } \vec{V}_i \cdot \vec{V}_i = V_i^2 = 1$$

$\Rightarrow$ Ortonormerte vektorer hvis

$$\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij} \quad ; \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & ; i=j \\ 0 & ; i \neq j \end{cases} \quad (\text{Kronecker-delta})$$

Tilsvarende med egenfunksjoner $\Psi_n(x)$:

Har et ortonormert sett av funksjoner $\{\Psi_n\} = \{\Psi_1, \Psi_2, \dots\}$ dersom

$$\langle \Psi_n, \Psi_k \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) \Psi_k(x) dx = \delta_{nk}$$

For partikkel i boks: $\sin \alpha \sin \beta = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$

$$\Rightarrow \langle \Psi_n, \Psi_k \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \left[\cos \frac{(n-k)\pi x}{L} - \cos \frac{(n+k)\pi x}{L} \right] dx$$

$$\stackrel{n \neq k}{=} \int_0^L \left[\frac{1}{n-k} \sin \frac{(n-k)\pi x}{L} - \frac{1}{n+k} \sin \frac{(n+k)\pi x}{L} \right] dx = 0$$

$$\Rightarrow \langle \Psi_n, \Psi_k \rangle = \delta_{nk} \quad \left[\text{Vet allerede at } \langle \Psi_n, \Psi_n \rangle = 1 \right]$$

Superposisjon og ikke-stasjonære tilstander

[PCH 2.3; DFG 2.1; IØ 2.1.f]

SL er lineær og homogen

⇒ Hvis $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ er løsninger av SL, dvs
 $i\hbar \partial \Psi_1 / \partial t = \hat{H} \Psi_1$; $i\hbar \partial \Psi_2 / \partial t = \hat{H} \Psi_2$; $\dots$

så er

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{med} \quad \Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots = \sum_n c_n \Psi_n$$

(superposisjonsprinsippet).

Når $\hat{H}$ uavh. av t : $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}$ (stasjonære tilstander)

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

Er ikke en stasjonær tilstand (dvs $|\Psi|^2$ avhenger av t)

Normering: $\boxed{\sum_n |c_n|^2 = 1}$ (når $\{\psi_n\}$ er ortonormert)

$$\begin{aligned} \text{Bevis: } 1 &= \int \Psi^* \Psi dx = \int \sum_n c_n^* \psi_n^* e^{iE_n t / \hbar} \cdot \sum_k c_k \psi_k e^{-iE_k t / \hbar} dx \\ &= \sum_n |c_n|^2 \underbrace{\int |\psi_n|^2 dx}_{=1} + \sum_{n \neq k} c_n^* c_k e^{i(E_n - E_k)t / \hbar} \cdot \end{aligned}$$

$$\cdot \underbrace{\int \psi_n^* \psi_k dx}_{\delta_{nk}}$$

$$= \sum_n |c_n|^2 \quad (\text{qed})$$

[Se box_non_stationary.^(.py) og box_non_stationary_3.m^(.py)]

Postulatene [PCH 2.1, DFG 3.3, IØ 2.2]

(33)

- Empirisk grunnlag, klassisk mekanikk: Newtons lover.

————— " —————, kvantemekanikk: Postulat A-D.

A: Operatorpostulat ("posisjonsromformulering")

Til en målbar størrelse i klassisk mekanikk,

$$F(q_1, q_2, \dots, q_N; p_1, p_2, \dots, p_N)$$

svarer i kvantemek, en lineær operator

$$\hat{F}(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{q}_N, \hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_N),$$

der

$\hat{q}_j = q_j$ = operator for posisjonskoordinat q_j

$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}$ = " ————— impuls ————— p_j

($j = 1, 2, \dots, N$)

Eks: 1 partikkel i 1D boks

$$N=1$$

$$\hat{q}_1 = q_1 = x; \quad \hat{p}_1 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\text{Eks: } L_z = (\vec{r} \times \vec{p})_z = x p_y - y p_x; \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

B: Tilstandspostulat

- Et systems tilstand er fullstendig beskrevet ved en bølgefunksjon $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$ med tidsutvikling bestemt av Schrödingerg ligningen

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

der $\hat{H}$ er systemets Hamiltonoperator.

- Eks: 1D boks $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x); \quad V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < L) \\ \infty & (x < 0, x > L) \end{cases}$

C: Forventningsverdipostulat

Forventningsverdien til en målbar størrelse F ("observabel") er

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

- der $d\tau = dq_1 dq_2 \dots dq_N$ og $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Dvs: Mange målinger av F på systemer som alle er preparert i tilstand Ψ vil gi middelværdi som nærmer seg $\langle F \rangle$.

Eks: Grunntilstanden i 1D boks

$$\langle x \rangle = \int_0^L \Psi_1^* x \Psi_1 dx = \int_0^L x |\Psi_1|^2 dx = \underline{L/2}$$

$$\langle p \rangle = \int_0^L \Psi_1^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 dx \sim \int_0^L \underbrace{\sin \frac{\pi x}{L}}_{\text{symm}} \underbrace{\cos \frac{\pi x}{L}}_{\text{antisymm}} dx = 0$$

D: Målepostulat

(35)

- De eneste mulige verdier en måling av F kan gi er en av egenverdiene f_j , gitt ved $\hat{F}\bar{\Psi}_j = f_j\bar{\Psi}_j$. Etter måling av F som gav f_j havner systemet i egenstilstanden $\bar{\Psi}_j$.

Dvs, målingen påvirker systemet.

- Eks: Anta at $\Psi(x, t_0) = c_1 \bar{\Psi}_1(x, t_0) + c_2 \bar{\Psi}_2(x, t_0)$.

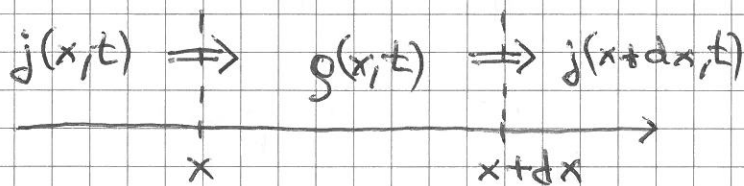
En energimåling ved $t_1 > t_0$ må da gi ^{eller} $E_1 \neq E_2$, med sannsynlighet hhv $|c_1|^2$ og $|c_2|^2$.

Hvis målingen gav E_2 , er

$$\Psi(x, t > t_1) = \bar{\Psi}_2(x, t)$$

Sannsynlighetsstrøm og -bevarelse

[PCH 2.6; DFG 1.4; IØ 2.8]

Anta $\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ med ortonormert $\{\psi_n\}$, slik at $\int \rho(x,t) dx = \int |\Psi(x,t)|^2 dx = \sum_n |c_n|^2 = 1$,uavh. av t ; $\rho(x,t)$ = sanns. tetthet; $[\rho] = 1/m$ Endring i $\rho(x,t)$ må skyldes netto strøm av sannsynlighet inn eller ut ved x : $j(x,t)$ = sanns. strøm ved pos. x ved tid t ; $[j] = 1/s$ $\Rightarrow j(x,t) - j(x+dx,t) =$ (netto) sanns. økning pr tidsenhet på $(x, x+dx)$ ved tid t

Har også:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho(x,t) dx] = \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} \cdot dx = \text{---} \text{---} \text{---}$$

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

$$\text{Dvs: } \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0}$$

Som er en kontinuitetsligning (i 1D) for sannsynlighet; uttrykker sanns. bevarelse. (Tilsvarende for masse, ladning etc)

Hvis 3D: $\rho(x,t) \rightarrow \rho(\vec{r},t)$ med $[\rho] = 1/m^3$

$j(x,t) \rightarrow \vec{j}(\vec{r},t)$ med $[j] = 1/s \cdot m^2$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 ; \quad \nabla \cdot \vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$$

Vi viser at SL gir sanns. bevarelse og bestemmer j :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \{ \Psi^* \Psi \} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi$$

$$\stackrel{SL}{=} \Psi^* \frac{\hat{H}}{i\hbar} \Psi + \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} \Psi \right)^* \Psi$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \{ \Psi^* \Psi'' - (\Psi^*)'' \Psi \} \quad (\text{leddene med } V(x) \text{ kansellerer})$$

Generelt:

$$[fg' - f'g]' = f'g' + fg'' - f''g - f'g' = fg'' - f''g$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \Psi' - (\Psi^*)' \Psi] \right\}}_{= j}$$

Skriver om j :

$$j = \frac{\hbar}{2m} \left[\left(\frac{1}{i} \Psi^* \Psi' \right) + \left(\frac{1}{i} \Psi' \Psi^* \right)^* \right]$$

$$= \underline{\underline{\text{Re} \left[\Psi^* \left(\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \right]}}}$$

(38)

Fra klassisk fysikk: $\vec{j} = g \cdot \vec{v}$ (evt $\vec{j} = g \vec{v}$)

Hier: $\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{m} \hat{p} = \text{hastighetsoperator}$

$\Rightarrow$ ikke umiddelbart med $\vec{j} = \text{Re} [\Psi^* \frac{\hat{p}}{m} \Psi]$
når $\Psi \Psi$ representerer ~~tilhelsen~~ g

$$3D: \vec{j} = \text{Re} [\Psi^* (\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \nabla) \Psi]$$

Eks: Stasjonær tilstand i 1D boks, $\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} e^{-iE_n t/\hbar}$

Tidsavh, kansellerer i $\Psi^* \Psi \Rightarrow [\dots \frac{1}{i} \dots]$ blir imaginær

$\Rightarrow \vec{j} = \text{Re} [\dots \frac{1}{i} \dots] = \underline{0}$; som ventet for
"stående bølger".

Eks: Fri partikkel, impuls $\vec{p} = p \hat{x}$.

$\Rightarrow \Psi = e^{ikx} e^{-iEt/\hbar}$; $k = p/\hbar$

$\Rightarrow \vec{j} = \text{Re} [\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \cdot ik] = \hbar k/m = p/m = \underline{v}$

(OK; her er $g=1$)

Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

- [PCH 4.5; DFG 1.6, 3.4; IØ øv1]

Viktig mål for usikkerhet i fysisk størrelse x :

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \text{Root Mean Square Deviation} \\ = \text{standardavvik}$$

$$D: x - \langle x \rangle$$

$$SD: (x - \langle x \rangle)^2$$

$$MSD: \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

$$RMSD: \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}$$

Omskriving:

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

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}} \quad RMSD$$

Postulat C $\Rightarrow$

$$\langle x^n \rangle = \int \Psi^* x^n \Psi dx$$

$$\langle p^n \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \Psi dx$$

Dette resulterer i at

$$\boxed{\Delta X \cdot \Delta P \geq \hbar/2} \quad \text{Heisenbergs uskarphetsrelasjon}$$

Forkjøpig litt ut av løse lufta!

Vi må ta for oss hermiteske operatører
og kommutatører.

Hermiteske operatører. Kommutatører

[PCH 2.2; DFG 3; IØ 2.3]

Krever reelle fysiske størrelser F og forventningsverdier $\langle F \rangle$

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

$$\Rightarrow \boxed{\int \Psi^* \hat{F} \Psi dx = \left\{ \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx \right\}^* = \int \Psi (\hat{F} \Psi)^* dx}$$

Må gjelde for alle normerbare bølgef. Ψ .

Hvis $\hat{F}$ oppfyller $\boxed{\dots}$, er $\hat{F}$ en hermitesk operator

[Merk: Vi kompleks-konjugerer funksjoner og tall, ikke operatører, derfor $(\hat{F} \Psi)^*$]

En ekvivalent, men noe mer anvendelig definisjon
av hermiteske operator $\hat{F}$:

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

Bevis: Velg $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}$ med vilkårlig reell α

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int (\Psi_1^* + \Psi_2^* e^{-i\alpha}) \hat{F} (\Psi_1 + \Psi_2 e^{i\alpha}) dx \\ &= \underbrace{\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_1 dx}_{\text{reelt!}} + \underbrace{\int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_2 dx}_{\text{reelt}} \end{aligned}$$

$$+ \underbrace{e^{-i\alpha} \int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_1 dx + e^{i\alpha} \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dx}_{\text{reelt, dersom integraltene er kompleks konjugerte av hverandre: } a + a^* = 2 \operatorname{Re} a = \text{reelt tall}}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 dx &= \left\{ \int \Psi_2^* \hat{F} \Psi_1 dx \right\}^* \\ &= \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dx \end{aligned}$$

QED

Lærdom: Hermiteske operator $\hat{F}$ for målbare fysiske størrelser F kan "flyttes etter behov" ved beregning av integraler som

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

[$dx \rightarrow d\tau = dq_1 dq_2 \dots dq_n$ hvis flere dimensjoner gjelder partikler]

Operatorers rekkefølge er generelt ikke likegyldig:

$$x \hat{p} f(x) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\hat{p} x f(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \cdot f(x)) = \frac{\hbar}{i} f + \frac{\hbar x}{i} \frac{\partial f}{\partial x} \neq x \hat{p} f(x)$$

$$\text{Vi ser at } x \hat{p} f(x) - \hat{p} x f(x) = -\frac{\hbar}{i} f(x) = i\hbar f(x)$$

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

Dvs: Resultatet av å la kommutatoren $[x, \hat{p}]$ mellom operatorene x og $\hat{p}$ virke på en funksjon $f(x)$ er det samme som å multiplisere $f(x)$ med $i\hbar$

Nå har vi nok ballast til å vise følgende:

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|}$$

$\Delta A =$ standardavvik i fysisk størrelse A

$\Delta B =$ ————— " ————— B

(evt. "uskarphet" i A og B)

$\hat{A} =$ hermiteske operator for A

$\hat{B} =$ ————— " ————— B

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

Beweis: $(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \tilde{A}^2 \rangle$

(43)

$$(\Delta B)^2 = \langle (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \rangle = \langle \tilde{B}^2 \rangle$$

Notasjon: $\langle \hat{A} \rangle = \langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dx$

$$\int |\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi|^2 dx \geq 0 \quad (\text{med vilkårlig reell } \alpha \text{ i første omgang})$$

$$\Rightarrow \int (\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi)^* (\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi) dx \geq 0$$

$$\Rightarrow \int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx + \alpha^2 \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx + i\alpha \int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx - i\alpha \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx \geq 0$$

Her er $\hat{A}$ og $\hat{B}$ åpenbart hermitske (da A og B er observable); da er også $\tilde{A}$ og $\tilde{B}$ hermitske (da $\tilde{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$; $\tilde{B} = \hat{B} - \langle B \rangle$).

Kan nå bruke PCH 2.8 til å samle alle operatorene mellom Ψ^* og Ψ :

$$\int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx = \int \Psi^* \tilde{A} \tilde{A} \Psi dx = \langle \tilde{A}^2 \rangle = (\Delta A)^2$$

$$\int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx = \dots = \langle \tilde{B}^2 \rangle = (\Delta B)^2$$

$$\int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx - \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx = \int \Psi^* (\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A}) \Psi dx = \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + \alpha \underbrace{\langle i[\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle}_{(\text{reell})} \geq 0$$

$$\begin{aligned} [\tilde{A}, \tilde{B}] &= (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{B} - \langle B \rangle) - (\hat{B} - \langle B \rangle)(\hat{A} - \langle A \rangle) \\ &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\ &= [\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned}$$

Resten av leddene kansellerer, da $\langle A \rangle$ og $\langle B \rangle$ er reelle tall som kommuterer med $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Vi søker $\Delta A \cdot \Delta B$, ert $(\Delta A)^2 (\Delta B)^2$, så vi ganger ulikheten med $(\Delta B)^2$ og flytter α -ledd over på høyre side:

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq -\alpha^2 (\Delta B)^4 - \alpha \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle (\Delta B)^2$$

Da α er reell, har høyre side en max-verdi, som vi kan finne ved å maksimere mhp verdi av α :

$$\frac{d}{d\alpha} \left\{ -\alpha^2 (\Delta B)^4 - \alpha \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle (\Delta B)^2 \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \alpha = - \frac{\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle}{2 (\Delta B)^2}$$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$

$$\Rightarrow \underline{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle|} \quad \text{qed!}$$

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

$[x, \hat{p}_y] = 0 \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p_y \geq 0$

$\Rightarrow x$ og p_y kan måles presist samtidig

Eks: Når er $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$? Da er $\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi = 0$,

med $\tilde{A} = x - \langle x \rangle$ og $\tilde{B} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle$, og da med løsning

$$\Psi(x) \sim \exp \left\{ -\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\alpha\hbar} + i \frac{\langle p \rangle}{\hbar} x \right\}$$

og her er $2\alpha\hbar = \underbrace{\left[-\langle i[\hat{x}, \hat{p}] \rangle / (\Delta p)^2 \right]}_{2\alpha} \cdot \underbrace{2\Delta x \Delta p}_{\hbar} = 4(\Delta x)^2$

$$\Rightarrow \Psi(x) \sim \exp \left\{ -\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\Delta x^2} + i \frac{\langle p \rangle}{\hbar} x \right\}$$

dvs: en gaussiske bølgepakke har minimale uskarphetsprodukt

Tidsutvikling av forventningsverdier

- [PCH 4.3; DFG 3.4.3]

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle F \rangle &= \frac{d}{dt} \left\{ \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx \right\} \\
 &= \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{F} \Psi dx + \int \Psi^* \hat{F} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx + \int \Psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \Psi dx \\
 &= \int \left(\frac{\hat{H} \Psi}{i\hbar} \right)^* \hat{F} \Psi dx + \int \Psi^* \hat{F} \frac{\hat{H} \Psi}{i\hbar} dx + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \hat{H} \hat{F} \Psi dx - \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \hat{F} \hat{H} \Psi dx + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle
 \end{aligned}$$

Som regel er $\hat{F}$ uavh. av $t \Rightarrow \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$

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

- Dvs: Hvis $\hat{F}$ kommuterer med $\hat{H}$, er $\langle F \rangle$ en bevægelseskonstant; $\frac{d}{dt} \langle F \rangle = 0$.

Eks: Fri partikkel, $\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m$

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

$$\Rightarrow \langle p \rangle = \text{konstant} \quad (\text{som ventet})$$

Ehrenfests teorem

(46)

[PCH 4.4; DFG 1.5, 4.1; IØ 4.4]

Uttrykker at kvantemekaniske middelværdier oppfyller klassiske bevegelsesligninger:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{\langle p \rangle}{m}, & \frac{d}{dt} \langle p \rangle &= \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle & (1D) \\ \frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle &= \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}, & \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle &= \langle -\nabla V \rangle & (3D) \end{aligned}}$$

Beweis (1D): $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(x,t)$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, x] \rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\hat{p}^2, x] \rangle \quad ([V, x] = 0)$$

$$\begin{aligned} [\hat{p}^2, x] &= \hat{p} \hat{p} x - x \hat{p} \hat{p} \\ &= \hat{p} (\hat{p} x) - (\hat{p} x) \hat{p} + (\hat{p} x) \hat{p} - (x \hat{p}) \hat{p} \\ &= \hat{p} (\underbrace{\hat{p} x - x \hat{p}}_{-i\hbar}) + (\underbrace{\hat{p} x - x \hat{p}}_{-i\hbar}) \hat{p} \\ &= -2i\hbar \hat{p} \end{aligned}$$

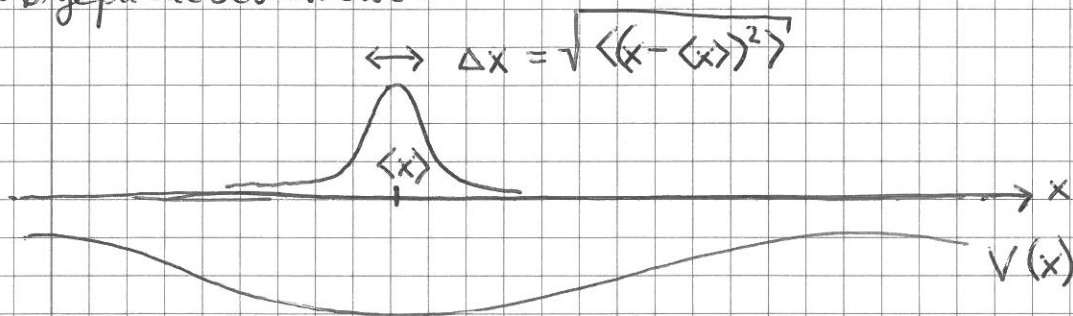
$$\Rightarrow \underline{\underline{\frac{d}{dt} \langle x \rangle}} = \frac{i(-2i\hbar)}{2m\hbar} \langle \hat{p} \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} = \underline{\underline{\frac{\langle p \rangle}{m}}}$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [V, \hat{p}] \rangle \quad ([\hat{p}^2/2m, \hat{p}] = 0) \quad (47)$$

$$\begin{aligned} [V, \hat{p}] \psi &= V \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V \psi \\ &= \frac{V\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{V\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle \quad (\text{qed})$$

Bølgepakkebeskrivelse:



$$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} = F(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle) F'(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} (x - \langle x \rangle)^2 F''(\langle x \rangle) + \dots$$

$$\Rightarrow \langle F(x) \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} \Delta x^2 F''(\langle x \rangle) + \dots$$

$$\Rightarrow \text{Kun hvis } F''(\langle x \rangle) = F'''(\langle x \rangle) = \dots = 0, \text{ er } \langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle),$$

$\Rightarrow$ Kun da vil $\langle x \rangle$ følge den klassiske banen, ^{eksakt} for da har vi

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = F(\langle x \rangle), \text{ dvs Newtons 2. lov for } \langle x \rangle !$$

Ser at $\langle F(x) \rangle \approx F(\langle x \rangle)$ (dvs Newton-mekanikk er OK)
dersom Δx kan neglisjeres (makroskopiske "partikler")
og/eller $F''(\langle x \rangle) \rightarrow 0$ (langsomt varierende potensial)

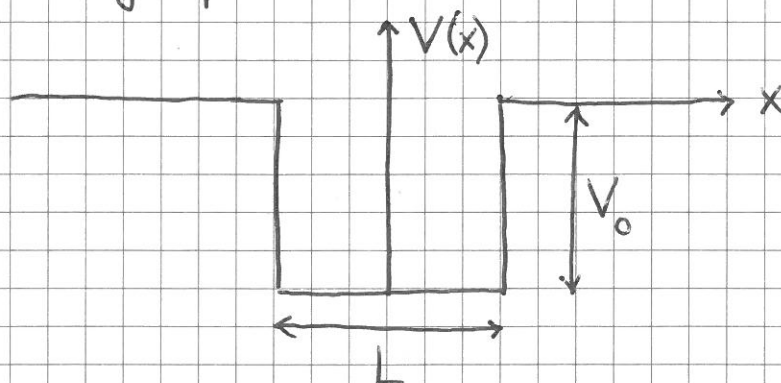
Eks: Konstant tyngdefelt, $V(z) = mgz \Rightarrow F'' = 0 \Rightarrow \langle F(z) \rangle = F(\langle z \rangle)$

Harmonisk oscillator, $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Rightarrow F'' = 0 \Rightarrow \langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle)$

ENDIMENSIONALE POTENSIALER

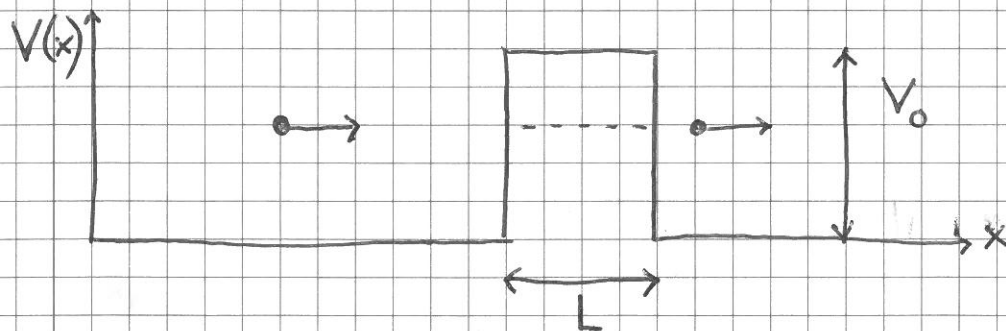
[PCH 3 ; DFG 2 ; IØ 3]

- Endelig potensialbrønn



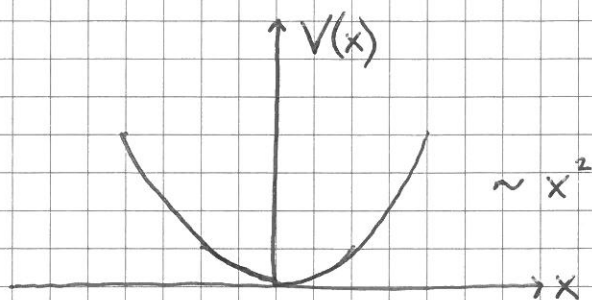
Relevans: Halvlederteknologi, fotonikk

- Potensialbarriere



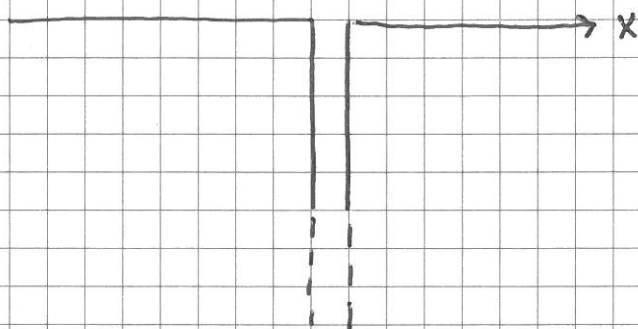
Relevans: Tunneling. Feltemisjona
 Fisjon, fusjon (radioaktivitet).
 Tunneleringsmikroskop (STM).
 Spredningseksperimenter.

- Harmonisk oscillator



Relevans: Vibrasjoner i molekyler og krystaller.
Alle problemer der et eller annet svinger omkring en likevektsposisjon.

- δ -funksjonspotensial



~~Brønn~~ Brønn / barrierer med $V_0 \rightarrow \infty$, $L \rightarrow 0$.

Disse kan løses eksakt (analytisk).

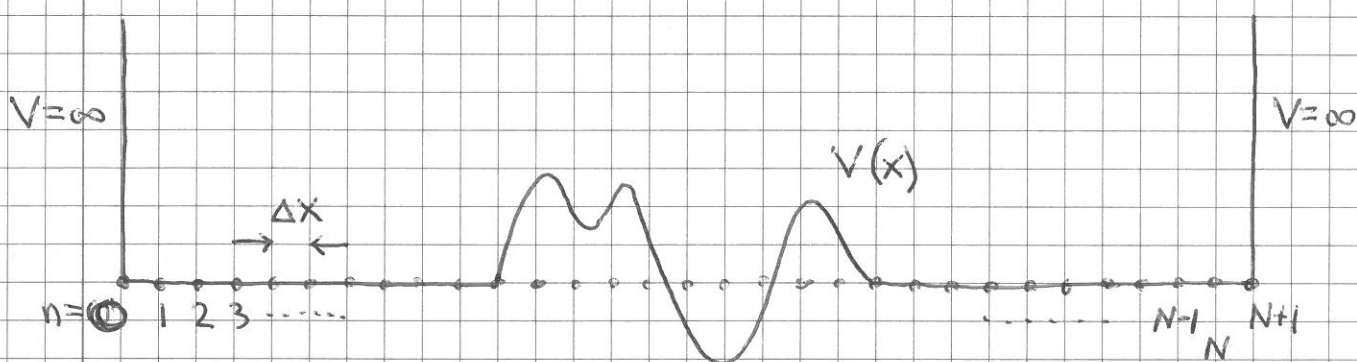
Med "vilkårlig" $V(x)$ trengs en numerisk løsningsmetode.

Numerisk løsning av TUSL

$$\text{TUSL: } -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Strategi: Diskretiserer området $0 < x < L$, slik at det "interessante" intervallet for $V(x)$ er langt mindre $x=0$ og $x=L$.

Setter $V=\infty$ for $x \leq 0$ og $x \geq L$.



$$x_n = n \cdot \Delta x$$

$$\left. \begin{aligned} V_n &= V(x_n) = V(n \cdot \Delta x) \\ \psi_n &= \psi(x_n) = \psi(n \cdot \Delta x) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} V_0 &= V_{N+1} = \infty \\ \Rightarrow \psi_0 &= \psi_{N+1} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_n'' &\approx \frac{\psi'_{n+1/2} - \psi'_{n-1/2}}{\Delta x} \approx \frac{\frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta x} - \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta x}}{\Delta x} \\ &= \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta x)^2} \end{aligned}$$

⇒ TUSL på $0 < x < L$ er nå sett av N differanseligninger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \psi_{n-1} + \left(\frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_n\right) \psi_n - \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \psi_{n+1} = E \psi_n$$
$$(n=1, 2, 3, \dots, N)$$

På kompakt form:

$$\mathbb{H} \vec{\Psi} = E \vec{\Psi}, \text{ der } \mathbb{H} \text{ er } (N \times N)\text{-matrise}$$

$$\text{med } H_{nn} = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_n, \quad H_{n, n\pm 1} = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2},$$

$$H_{ij} = 0 \text{ ellers}$$

der en reell, symmetrisk, triagonal matrise,
med N forskjellige ^{reelle} egenverdier $E_1, E_2, \dots, E_N$
med tilhørende egenvektorer $\vec{\Psi}_1^{(1)}, \vec{\Psi}_2^{(2)}, \dots, \vec{\Psi}_N^{(N)}$
som er ortogonale, normerbare, og kan velges reelle.

[Ikke-triviale løsninger, $\vec{\Psi} \neq 0$, kun hvis $\det(\mathbb{H} - E\mathbb{I}) = 0$, gir
 N -te-gradslign. $C_N E^N + C_{N-1} E^{N-1} + \dots + C_1 E + C_0 = 0$ med
 N løsn. $E_1, E_2, \dots, E_N$; hvorefter tilhørende egenvektorer
bestemmes ved å løse $(\mathbb{H} - E_i \mathbb{I}) \vec{\Psi}_i^{(i)} = 0$.

Normering: $\sum_{n=1}^N |\psi_n^{(i)}|^2 \Delta x = 1.$

$$\left(\psi_n^{(i)} = \psi^{(i)}(x_n) = \text{verdi av } \psi^{(i)} \text{ i pos. } x_n = n \cdot \Delta x \right)$$

Standard egenverdiproblem; implementert i

"alle" programpakker (matlab, python, ...).

Matlab:

$$[S, D] = \text{eig}(H);$$

$$\Rightarrow D(1,1) = E_1, \dots, D(N,N) = E_N \quad (E_1 < E_2 < \dots < E_N)$$

$$S(n,i) = \psi_n^{(i)} = \psi^{(i)}(x_n), \text{ dvs kolonne nr } i$$

i matrisen S er egenvektor nr i ($i=1,2,\dots,N$)

Python:

```
import numpy as np
```

```
:
```

$$w, v = \text{np.linalg.eigh}(H)$$

$$\Rightarrow w[0] = E_1, \dots, w[N-1] = E_N \quad (E_1 < E_2 < \dots < E_N)$$

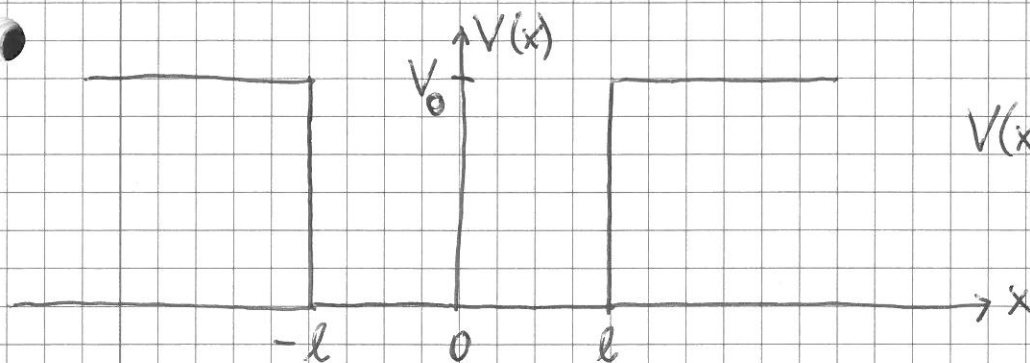
$$v[n-1, i-1] = \psi_n^{(i)} = \psi^{(i)}(x_n), \text{ dvs kolonne nr } i-1$$

i matrisen v er egenvektor nr i ($i=1,2,\dots,N$)

[Python nummererer elementene i tabeller og matriser fra og med 0]

Endelig potensialbrønn [PH 3.3; DFG 2.6; IØ 3.2]

(53)



$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; |x| \leq l \\ V_0 & ; |x| > l \end{cases}$$

TUSL:
$$\psi''(x) = \begin{cases} -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) & ; |x| \leq l \\ \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x) & ; |x| > l \end{cases}$$

$E < V_0$:

$$\psi(x) = C \sin kx + D \cos kx \quad ; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad ; \quad |x| \leq l$$

$$\psi(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} \quad ; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad ; \quad |x| > l$$

$$e^{\kappa x} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \infty \Rightarrow \psi(x) = B e^{-\kappa x} \quad ; \quad x > l$$

$$e^{-\kappa x} \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \infty \Rightarrow \psi(x) = A e^{\kappa x} \quad ; \quad x < -l$$

5 ukjente, A, B, C, D og energien E , fastlegges med normering, $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$, og 4 grensebetingelser, ψ og ψ' kont. i $x = \pm l$.

Med symmetrisk $V(x)$ forventes symm. $|\psi|^2$, dvs symm, og/eller) antisymm. løsninger $\psi(x)$, dvs $\psi(x) = D \cos kx$ ($C=0$) og $\psi(x) = C \sin kx$ ($D=0$).

Ψ og Ψ' kont. i $x = -l$:

$$A e^{-\frac{\hbar}{2}l} = -C \sin kl + D \cos kl \quad (1)$$

$$A \frac{\hbar}{2} e^{-\frac{\hbar}{2}l} = k(C \cos kl + D \sin kl) \quad (2)$$

Mult. (1) med $\sin kl$ og ~~trekk fra~~ $\frac{1}{k} \cos kl$

$$\Rightarrow A \frac{\hbar}{k} e^{-\frac{\hbar}{2}l} \cos kl - A \sin kl = C$$

$$\Rightarrow C = A e^{-\frac{\hbar}{2}l} \cos kl \left(\frac{\hbar}{k} - \tan kl \right) \quad (3)$$

Mult. (1) med $\cos kl$ og legg til (2) mult. med $\frac{1}{k} \sin kl$

$$\Rightarrow A \frac{\hbar}{k} e^{-\frac{\hbar}{2}l} \sin kl + A e^{-\frac{\hbar}{2}l} \cos kl = D$$

$$\Rightarrow D = A e^{-\frac{\hbar}{2}l} \cos kl \left(\frac{\hbar}{k} \tan kl + 1 \right) \quad (4)$$

Ψ og Ψ' kont. i $x = l$:

~~$$B e^{-\frac{\hbar}{2}l} = C \sin kl + D \cos kl \quad (5)$$~~

$$-B \frac{\hbar}{2} e^{-\frac{\hbar}{2}l} = k(C \cos kl - D \sin kl) \quad (6)$$

$$(5) \cdot \frac{\hbar}{k} + (6) \cdot \frac{1}{k} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow C \left(\frac{\hbar}{k} \sin kl + \cos kl \right) + D \left(\frac{\hbar}{k} \cos kl - \sin kl \right) = 0$$

$$\Rightarrow C \left(\frac{\hbar}{k} \tan kl + 1 \right) + D \left(\frac{\hbar}{k} - \tan kl \right) = 0 \quad (7)$$

Innsøtting av (3) og (4) i (7) gir to like ledd:

$$2 \left(\frac{\hbar}{k} \tan kl + 1 \right) \left(\frac{\hbar}{k} - \tan kl \right) = 0$$

$$\frac{\hbar E}{k} \tan kl + 1 = 0 \Rightarrow D = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = C \sin kx; \text{ antisymm. løsninger}$$

$$\frac{\hbar E}{k} - \tan kl = 0 \Rightarrow C = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = D \cos kx; \text{ symm. løsninger}$$

Energieeigenverdier E gitt ved:

$$\tan kl = \begin{cases} \hbar/k & ; \text{ symm. løsn. (S)} \\ -k/\hbar & ; \text{ antisymm. løsn. (AS)} \end{cases}$$

der

$$\tan \frac{\sqrt{2mE'} l}{\hbar} = \begin{cases} \sqrt{\frac{V_0 - E'}{E'}} & (S) \\ -\sqrt{\frac{E'}{V_0 - E'}} & (AS) \end{cases}$$

Grensefallene: $V_0 \rightarrow \infty$, partikkel i boks.

$$\tan \frac{\sqrt{2mE'} l}{\hbar} = \begin{cases} \infty & (S) \\ 0 & (AS) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{\sqrt{2mE'} l}{\hbar} = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots & (S) \\ \pi, 2\pi, 3\pi, \dots & (AS) \end{cases}$$

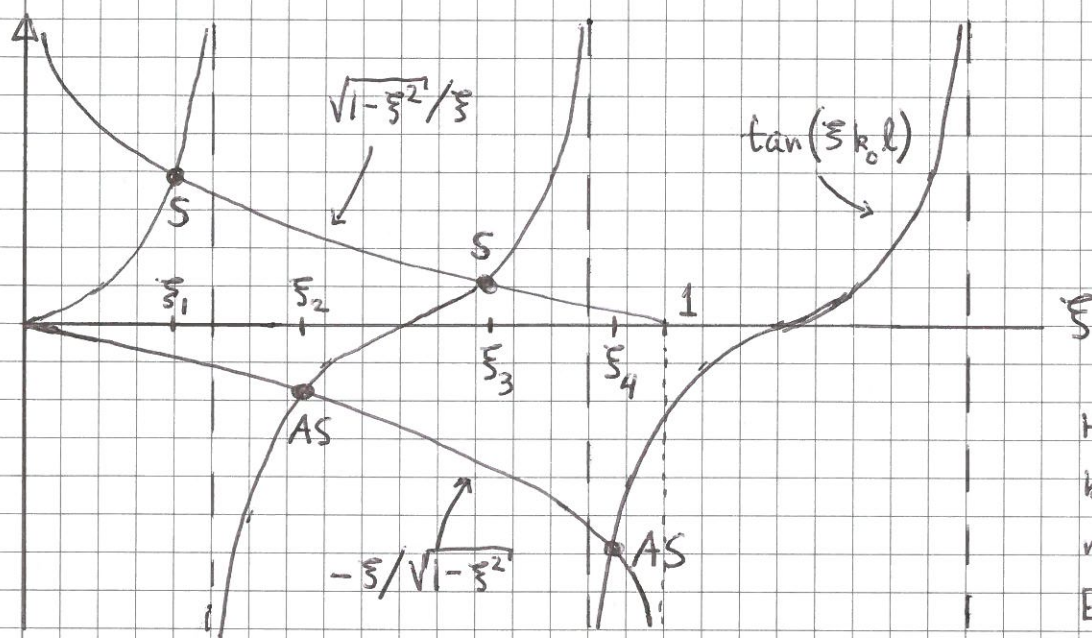
$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2ml^2} \cdot \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2l)^2} \cdot n^2; \quad n=1,2,3,\dots$$

OK; som E_n s. 29!

Antall bundne løsninger:

$$E < V_0 \Rightarrow \xi = \sqrt{E/V_0} ; \quad 0 < \xi < 1$$

$$\Rightarrow \tan(\xi \cdot k_0 l) = \begin{cases} \sqrt{1-\xi^2}/\xi & (S) \\ -\xi/\sqrt{1-\xi^2} & (AS) \end{cases} \quad \left(k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \right)$$



Her: 4
bundne tilst.
med energi
 $E_n = V_0 \xi_n^2$
($n=1,2,3,4$)

- Minst en symm. løsning
- Kun 1 løsn. hvis $k_0 l < \pi/2$: Da er $\xi=1$ til venstre for 1. asymptot til $\tan(\xi k_0 l)$
- 2 løsn. hvis $\frac{\pi}{2} < k_0 l < \pi$: Da er $\xi=1$ til venstre for 1. nullpunkt til $\tan(\xi k_0 l)$
- N løsn. hvis $(N-1)\frac{\pi}{2} < k_0 l < N\frac{\pi}{2}$

$$\Rightarrow N < \frac{2k_0 l}{\pi} + 1 < N+1$$

$$\Rightarrow N = 1 + \text{største heltall mindre enn } \frac{2k_0 l}{\pi}$$

$$= 1 + \left[\frac{2k_0 l}{\pi} \right] = 1 + \left[\frac{2l\sqrt{2mV_0}}{\pi\hbar} \right]$$

- Økende antall bundne løsninger for dypere og bredere brønn.
- $|\psi|^2 > 0$ også utenfor brønnen, dvs en viss sannsynlighet for å finne partikkelen i det klassisk forbudte området, der $E < V_0$.

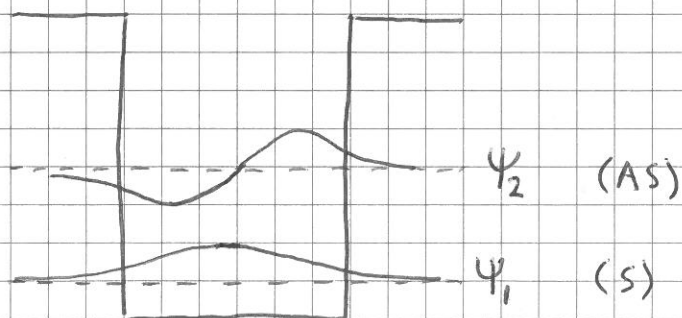
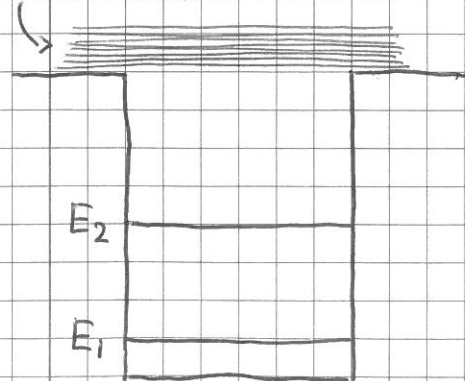
$E > V_0$:

Når $\psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx$ for $|x| > l$, med $K = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$, dvs ikke bundne tilstander.

Kan "matches" med $C \sin Kx + D \cos Kx$ i $x = \pm l$ (dvs kont. ψ og ψ') for alle verdier av $E > V_0$.

$\Rightarrow$ spekteret er kontinuerlig for $E > V_0$.

kontinuum



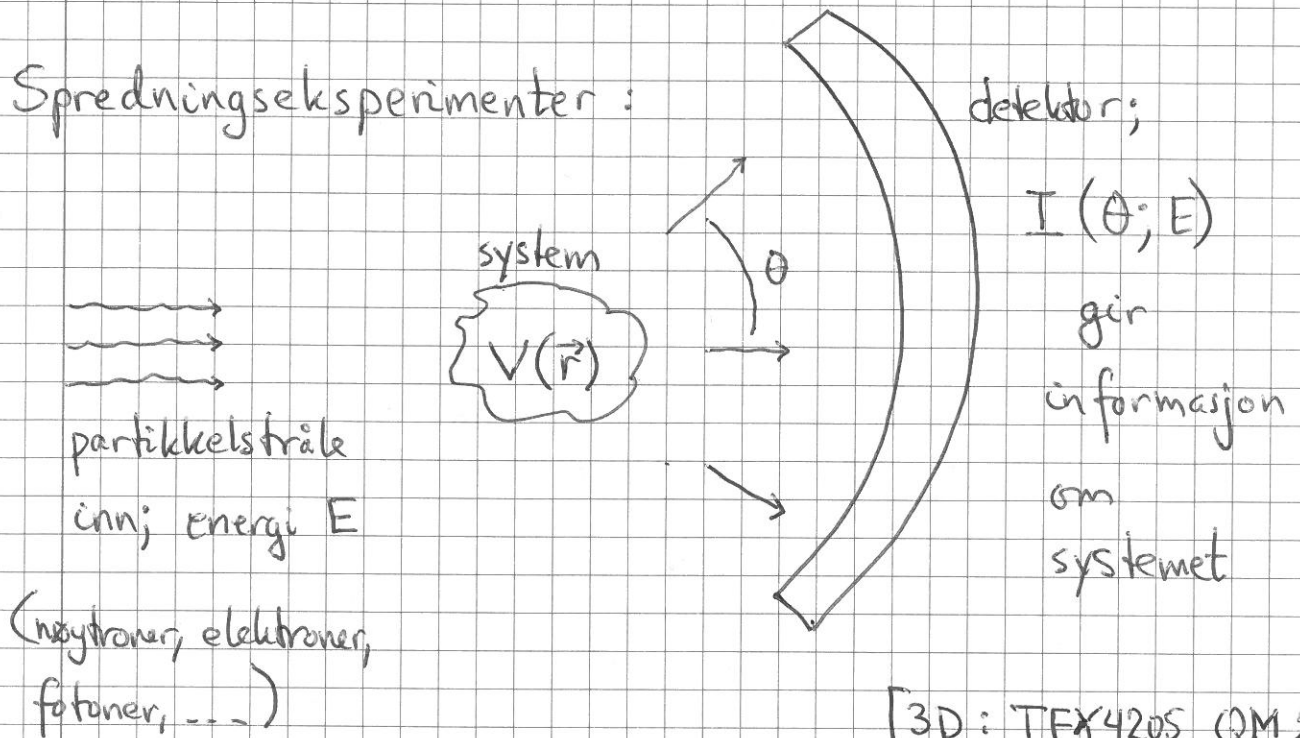
Inntrengningsdybde: $\frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$

$\Rightarrow \left| \frac{\psi(l + 1/\kappa)}{\psi(l)} \right| = 1/e$

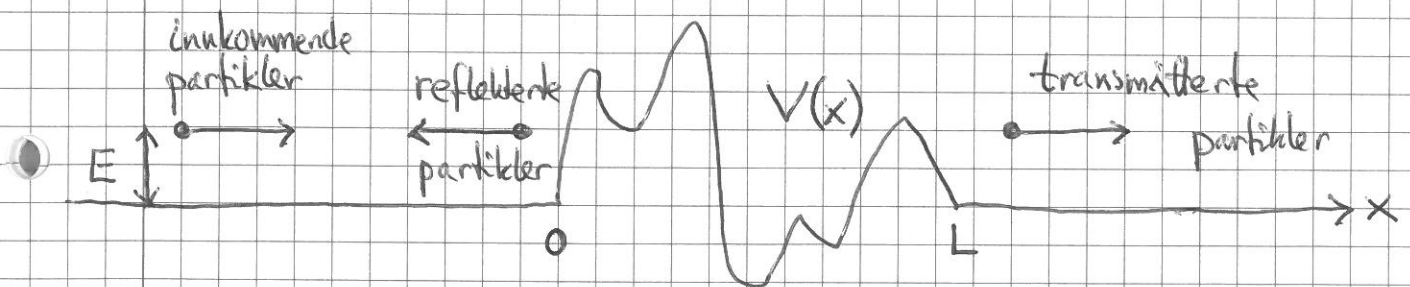
Spredning i en dimensjon

[PCH 3.6; DFG 2.5-2.7; IØ 3.6]

Spredningeksperimenter:



Bare 2 muligheter i 1D: Refleksjon eller transmisjon



R = sannsynlighet for refleksjon

T = " " transmisjon

$\Rightarrow$

$$\boxed{R + T = 1}$$

Klassiske analogier: Bølge på streng inn mot overgang til tykkere/tynnere streng. Plan lydbølge inn mot plan grenseflate mot annet medium.

Ser på dette som stationært problem, dvs. bestemt energi E og impuls $p = \hbar k$ på innkommende partikler.

Antar $V = 0$ for $x < 0$:

Løsn. av TVSL, $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi$, er da $e^{\pm ikx}$, med vilkårlig positiv energi $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Bare

$$\psi_i(x) = e^{ikx}$$

gir innkommende partikkel/bølge fra venstre, mens

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

må velges for reflektert bølge (som går mot venstre).

Antar (i første omgang) også $V = 0$ for $x > L$:

$$\psi_t(x) = t e^{ikx}$$

for transmittert bølge (ingen partikler inn fra høyre).

For $0 < x < L$ er $V(x)$ et eller annet, og

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

må løses etter beste evne (analytisk evt. numerisk!) og "matches" (kontinuerlig ψ og ψ') til

$$\psi_i(x) + \psi_r(x) \quad \text{i } x=0$$

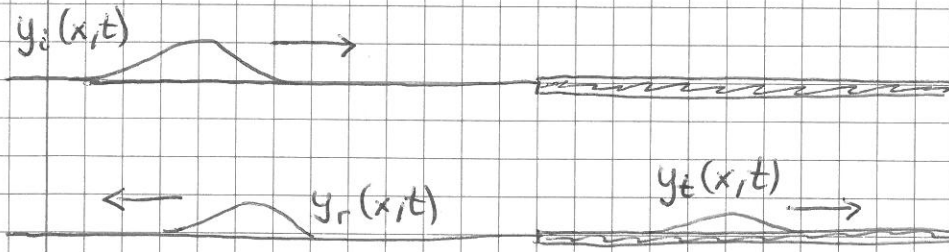
$$\text{og } \psi_t(x) \quad \text{i } x=L$$

Har her ikke-normerbare bølgefunksjoner (plane bølger) (60)

• $\Rightarrow$ Vi betrakter heller sannsynlighetsstrømmen (s. 37)

$$j = \operatorname{Re} \left\{ \Psi^* \frac{\hbar}{im} \Psi' \right\}$$

For klassiske bølger, f.eks. transversal bølge på streng:



Energibevarelse: $\bar{P}_i = \bar{P}_r + \bar{P}_t$ (middlere effekt)

Transm. koeff: $T = \bar{P}_t / \bar{P}_i =$ andel transmittert effekt

Refl. koeff: $R = \bar{P}_r / \bar{P}_i =$ andel reflektert effekt

$$\Rightarrow T + R = 1$$

Tilsvarende, med plan "partikkelbølge":

Sannsynlighetsbevarelse: $j_i = |j_r| + j_t$

Transmisjonssanns: $T = j_t / j_i =$ "andel transmittert sannsynlighet"

Refleksjonssanns: $R = |j_r| / j_i =$ "andel reflektert —" —"

$$\Rightarrow T + R = 1$$

Regner ut de tre sannsynstrømmene (hver for seg):

(61)

$$j_i = \text{Re} \left\{ e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik e^{ikx} \right\} = \frac{\hbar k}{m} \quad (= p/m = v)$$

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

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

$$\Rightarrow R = |j_r|/j_i = |r|^2 \quad ; \quad T = j_t/j_i = |t|^2$$

Opplyst at $j(x > L) = j_t = |t|^2 \hbar k/m$, siden $\psi_t(x) = t e^{ikx}$ er hele bølgefunksjonen når $x > L$.

Ikke like opplyst at $j(x < 0) = j_i + j_r = j_i - |j_r|$, dvs som om innkommende og reflektert bølge ikke "møter" hverandre. Men slik er det:

$$\begin{aligned} j(x < 0) &= \text{Re} \left\{ (e^{-ikx} + r^* e^{ikx}) \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} (e^{ikx} + r e^{-ikx}) \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{m} - |r|^2 \frac{\hbar k}{m} + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \left\{ r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \right\} \\ &= j_i + j_r + \frac{\hbar k}{m} \text{Re} \left\{ (r e^{-2ikx})^* - r e^{-2ikx} \right\} \\ &= j_i - |j_r| + \frac{\hbar k}{m} \underbrace{\text{Re} \left\{ -2i \text{Im}(r e^{-2ikx}) \right\}}_{=0} \\ &= j_i - |j_r| \end{aligned}$$

$$\underline{j_i - |j_r|}$$

Vic ser at $j(x < 0) = (1-R) \frac{\hbar k}{m} = T \frac{\hbar k}{m} = j(x > L)$, (62)

• dvs uavhengig av x . Som vekt for stasjonære tilstander,

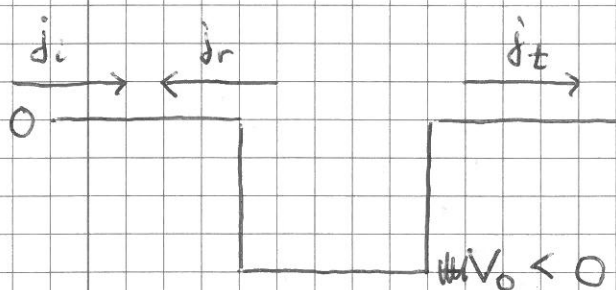
$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

for da er $g = |\Psi|^2 = |\Psi(x)|^2$ uavh. av t , dvs

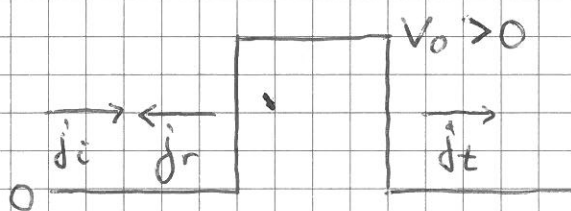
$\partial g / \partial t = 0$, og da gir kontinuitetsligningen

$$\frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{\partial g}{\partial t} = 0, \text{ dvs } j \text{ uavh. av } x.$$

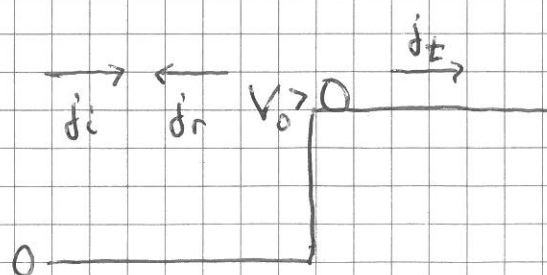
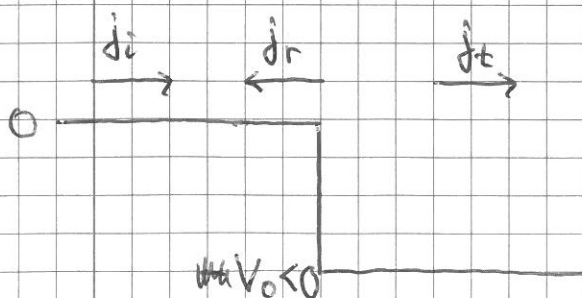
Interessante, og "enkle", spesialtilfeller:



"firkantbønn"



"firkantbarriere"

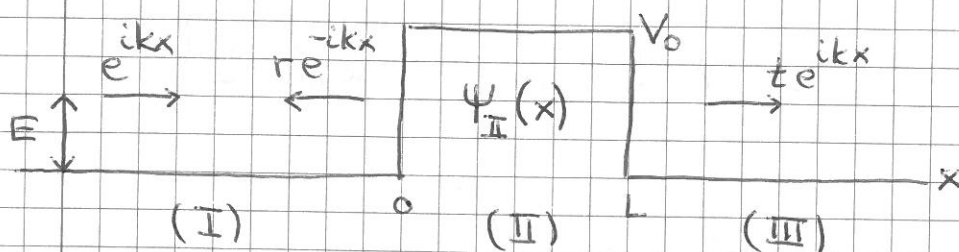


potensialsprang

Firkantbrønn eller -barriere:

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

La oss ta detaljene for det mest interessante tilfellet,
 $V_0 > 0$, $E < V_0$:



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_{II}'' + V_0 \Psi_{II} = E \Psi_{II}$$

$$\Rightarrow \Psi_{II}(x) = a e^{-\kappa x} + b e^{\kappa x} ; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

De fire ukjente a, b, r, t bestemmes med de fire grensebetingelsene: Ψ og Ψ' kontinuerlige i $x=0$ og $x=L$.

$$\Rightarrow 1 + r = a + b \quad [\Psi(0)] \quad (1)$$

$$ik(1 - r) = -\kappa(a - b) \quad [\Psi'(0)] \quad (2)$$

$$a e^{-\kappa L} + b e^{\kappa L} = t e^{ikL} \quad [\Psi(L)] \quad (3)$$

$$-\kappa(a e^{-\kappa L} - b e^{\kappa L}) = ik t e^{ikL} \quad [\Psi'(L)] \quad (4)$$

(3) $\pm$ (4) gir a og b uttrykt ved t :

$$a = \frac{1}{2} t e^{ikL} e^{\kappa L} \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) ; \quad b = \frac{1}{2} t e^{ikL} e^{-\kappa L} \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right)$$

Innsetting i (1) og (2) eliminerer a og b:

(64)

$$1+r = \frac{1}{2} t e^{ikL} \left\{ \underbrace{\left(e^{\frac{\kappa}{2}L} + e^{-\frac{\kappa}{2}L} \right)}_{2 \cosh \frac{\kappa}{2}L} - \frac{ik}{\kappa} \underbrace{\left(e^{\frac{\kappa}{2}L} - e^{-\frac{\kappa}{2}L} \right)}_{2 \sinh \frac{\kappa}{2}L} \right\}$$

$$1-r = \frac{1}{2} t e^{ikL} \left\{ -\frac{\kappa}{ik} \underbrace{\left(e^{\frac{\kappa}{2}L} - e^{-\frac{\kappa}{2}L} \right)}_{2 \sinh \frac{\kappa}{2}L} + \underbrace{\left(e^{\frac{\kappa}{2}L} + e^{-\frac{\kappa}{2}L} \right)}_{2 \cosh \frac{\kappa}{2}L} \right\}$$

Addisjon av disse elim. r og gir:

$$2 = t e^{ikL} \left\{ 2 \cosh \frac{\kappa}{2}L - i \left(\frac{\kappa}{\kappa} - \frac{\kappa}{\kappa} \right) \sinh \frac{\kappa}{2}L \right\}$$

$$\Rightarrow T = |t|^2 = \left\{ \cosh^2 \frac{\kappa}{2}L + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{\kappa} - \frac{\kappa}{\kappa} \right)^2 \sinh^2 \frac{\kappa}{2}L \right\}^{-1}$$

"Forenkling":

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{\kappa} - \frac{\kappa}{\kappa} \right)^2 &= \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa^2}{\kappa^2} + \frac{\kappa^2}{\kappa^2} - 2 \right) = \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa^2}{\kappa^2} + \frac{\kappa^2}{\kappa^2} + 2 \right) - 1 \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{\kappa} + \frac{\kappa}{\kappa} \right)^2 - 1 \end{aligned}$$

$$\cosh^2 \frac{\kappa}{2}L - \sinh^2 \frac{\kappa}{2}L = 1$$

$$\Rightarrow T = \left\{ 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{\kappa} + \frac{\kappa}{\kappa} \right)^2 \sinh^2 \frac{\kappa}{2}L \right\}^{-1}$$

Tilbake til E og V_0 :

$$\left(\frac{\kappa}{\kappa} + \frac{\kappa}{\kappa} \right)^2 = \left(\frac{\kappa^2 + \kappa^2}{\kappa \kappa} \right)^2 = \frac{(E + V_0 - E)^2}{(V_0 - E)E} = \frac{V_0^2}{(V_0 - E)E} = \frac{1}{(1 - E/V_0) \cdot (E/V_0)}$$

$$\kappa L = \frac{L}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} = \frac{L}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \cdot \sqrt{1 - E/V_0} = k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}$$

der $k_0 L$ ($= \chi$ hos IØ) angir "styrken" på barrieren.

$$\Rightarrow T = \left\{ 1 + \frac{\sinh^2(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0})}{4 \frac{E}{V_0} (1 - E/V_0)} \right\}^{-1}; \quad 0 < \frac{E}{V_0} < 1$$

Grensetilfeller:

$$E \ll V_0 \text{ og } k_0 L \gg 1:$$

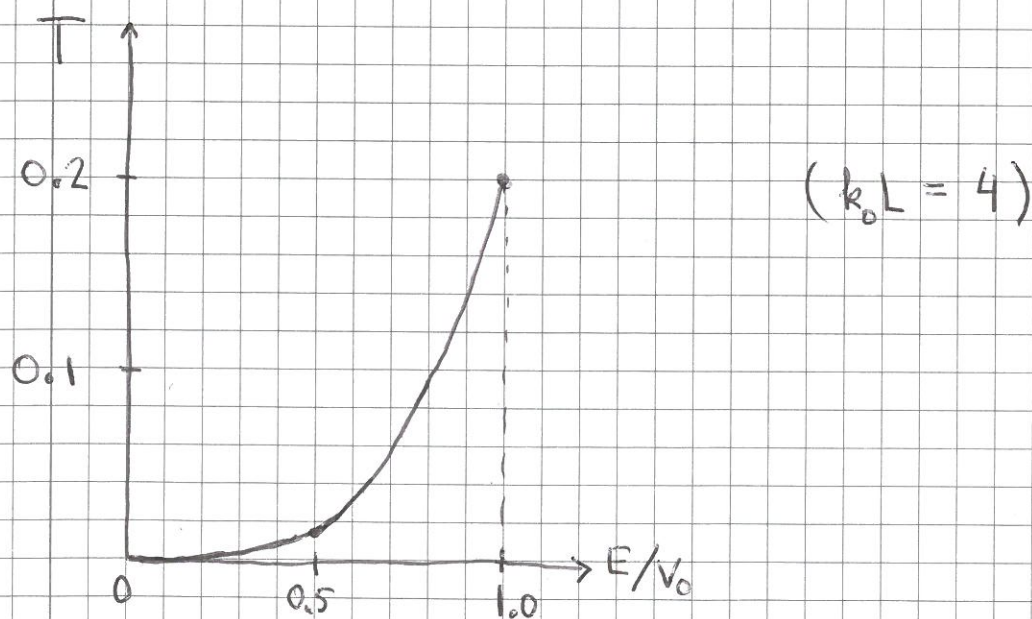
$$\sinh(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}) \approx \frac{1}{2} e^{k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}} \gg 1$$

$$\Rightarrow T \approx 16 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0}) e^{-2k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}}$$

$$E \rightarrow V_0:$$

$$\sinh^2(k_0 L \sqrt{1 - E/V_0}) \approx (k_0 L)^2 (1 - E/V_0)$$

$$\Rightarrow T \rightarrow \left\{ 1 + (k_0 L/2)^2 \right\}^{-1}$$



Tunnelering: Partiklene har en viss sanns. for å "spasere" gjennom det klassiske forbudte området, der $E < V_0$!

Med brønn, $V_0 < 0$, eller barriere med $E > V_0 > 0$:

• $\Psi_{II}(x) = a e^{iqx} + b e^{-iqx}$; $q = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar$

ders $\hbar \rightarrow -iq$ s. 63-64

$$\Rightarrow 2 = t e^{ikL} \left\{ 2 \cosh(-iqL) + \left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k} \right) \sinh(-iqL) \right\}$$

Her er

$$\cosh(-iqL) = \frac{1}{2} (e^{-iqL} + e^{iqL}) = \cos(qL)$$

• $\sinh(-iqL) = \frac{1}{2} (e^{-iqL} - e^{iqL}) = \frac{1}{2} \cdot (-2i) \sin(qL) = -i \sin(qL)$

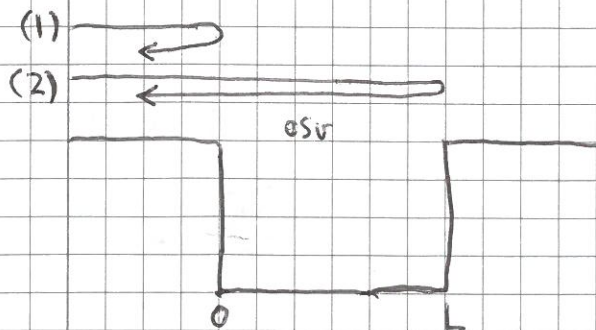
$$\Rightarrow T = |t|^2 = \left\{ \cos^2 qL + \left(\frac{k^2}{q^2} + \frac{q^2}{k^2} - 2 + 4 \right) \cdot \frac{1}{4} \sin^2 qL \right\}^{-1}$$
$$= \left\{ 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right)^2 \sin^2 qL \right\}^{-1}$$

(Brønn: $q > k$
Barriere: $q < k$)

~~~~~

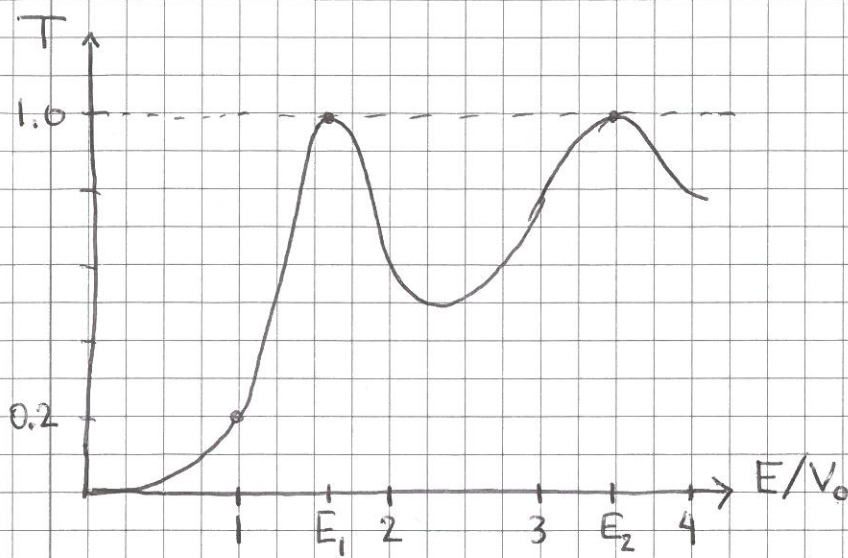
•  $T < 1$  ; "ikke-klassisk refleksjon" for de aller fleste verdier av  $E$

•  $T = 1$  når  $\sin qL = 0$ , ders  $qL = n\pi$  ( $n=1,2,\dots$ )  
ders  $L = \frac{n\pi}{q} = n\pi \cdot \frac{\lambda}{2\pi} = n \cdot \frac{\lambda}{2}$ , ders  $2L = n\lambda$  :



Nettresultatet blir her destruktiv interferens mellom bølger med veilengdeforskjell  $2L, 4L, 6L, \dots$





Eks:

(67)

Barriere med

$$k_0 L = 4 \quad (\text{som } \leq 65)$$

↓

$$E_1 = V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 1.62V_0$$

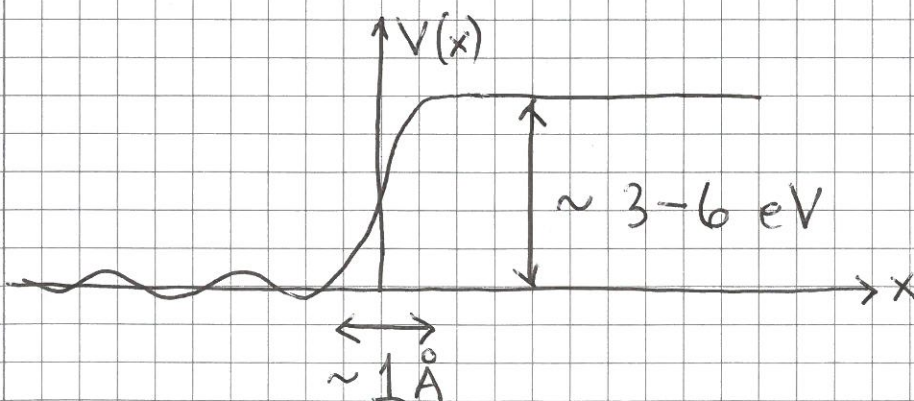
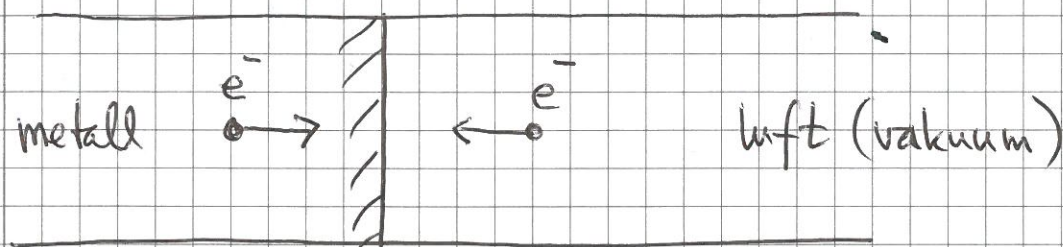
$$E_2 = V_0 + \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 3.47V_0$$

⋮

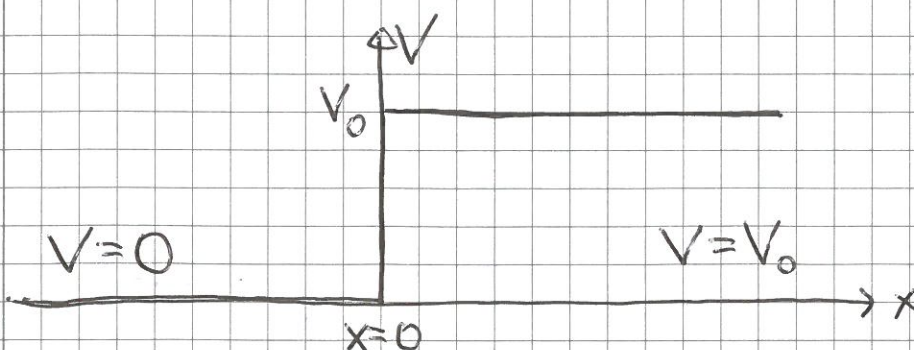
$$qL = n\pi \Rightarrow q^2 = \frac{2m(E_n - V_0)}{\hbar^2} = \frac{n^2 \pi^2}{L^2} \Rightarrow E_n = V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$T(E_n) = 1 \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

## Spredning med potensialsprang



Realistisk  
potensial



Modell-  
potensial

(68)

Med plan bølge inn fra venstre,  $E > V_0$ :

$$\Psi(x < 0) = e^{ikx} + r e^{-ikx} ; \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\Psi(x > 0) = t e^{iqx} ; \quad q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar < k$$

$$\Rightarrow 1 + r = t \quad \text{og} \quad ik(1 - r) = iq t$$

$$\Rightarrow \cancel{r} = \frac{k - q}{k + q}, \quad t = \frac{2k}{k + q}$$

Sanns. strømmer:  $j_i = \frac{\hbar k}{m}$ ,  $j_r = -|r|^2 \frac{\hbar k}{m}$

$$j_t = |t|^2 \frac{\hbar q}{m}$$

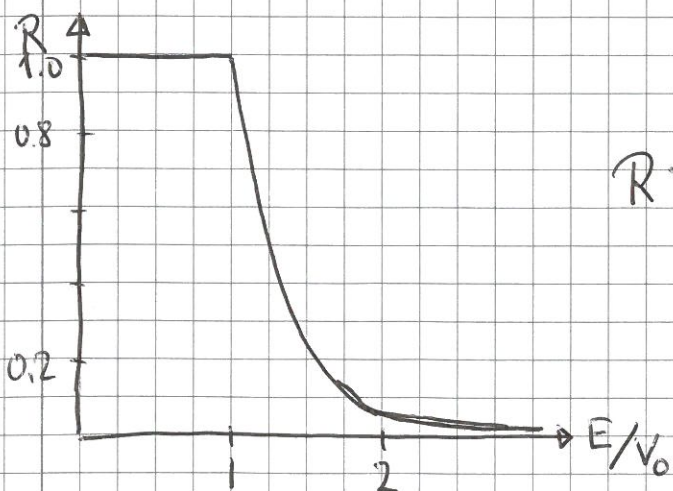
$$\Rightarrow R \equiv |j_r|/j_i = |r|^2 ; \quad T \equiv j_t/j_i = |t|^2 q/k$$

$$\Rightarrow \boxed{R = \left(\frac{k - q}{k + q}\right)^2 ; \quad T = \frac{4kq}{(k + q)^2}} \quad (R + T = 1)$$

[Sammenlign trans. bølge på streng!]

Med plan bølge inn fra høyre,  $E > V_0$ :

$q \leftrightarrow k \Rightarrow$  uendret  $R$  og  $T$  ! ("resiprositet")

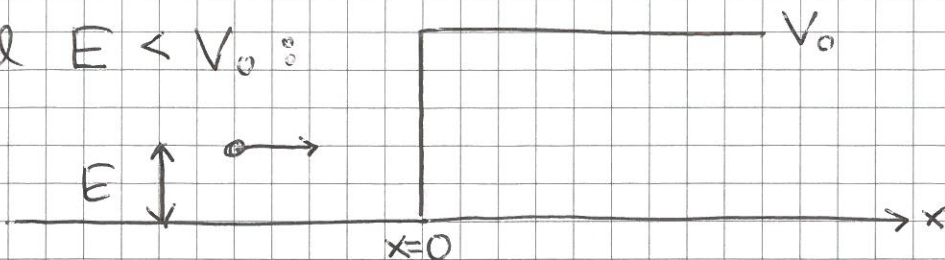


$$R = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2 \quad \text{for } E > V_0$$

$$R = 1 \quad \text{for } E < V_0$$



Med  $E < V_0$ :



(69)

Må ha  $\Psi(x>0) \neq \infty$  när  $x \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow \Psi(x>0) = t e^{-\kappa x} ; \quad \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar > 0$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow j_t &= \text{Re} \left\{ t^* e^{-\kappa x} \frac{\hbar}{im} (-\kappa) t e^{-\kappa x} \right\} \\ &= \text{Re} \left\{ i |t|^2 \frac{\hbar \kappa}{m} e^{-2\kappa x} \right\} = 0 \end{aligned}$$

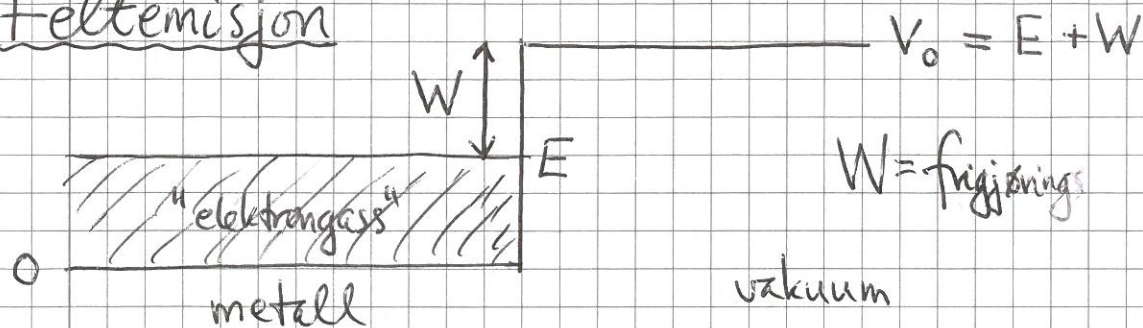
$$\Rightarrow \underline{T=0} ; \quad \underline{R=1}$$

$$\text{Evt: } 1+r=t, \quad ik(1-r) = -\kappa t \Rightarrow (1-r) \frac{ik}{\kappa} = -t$$

$$\Rightarrow \cancel{\frac{1}{ik}} 1+r + \frac{ik}{\kappa} (1-r) = 0$$

$$\Rightarrow r \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) + \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) = 0$$

$$\Rightarrow r = - \frac{1 + ik/\kappa}{1 - ik/\kappa} \Rightarrow |r|^2 = 1 \Rightarrow \underline{\underline{R=1}}$$

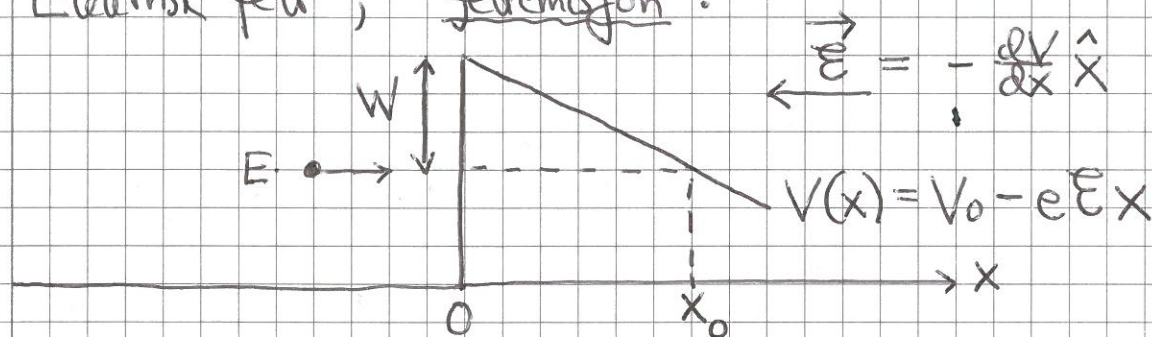
Feltemisjon

Hvordan få elektroner ut av metallet?

(a) Fotoner med energi  $h\nu > W$ ; fotoelektrisk effekt

(b) Høy temperatur,  $kT \sim W$ ; "glødetråd"

(c) Elektrisk felt; feltemisjon:



$\Rightarrow$  Mulig for elektroner å tunnelere ut!

$$V_0 - eEx_0 = E = V_0 - W \Rightarrow x_0 = W/eE$$

Fra s.65:  $T \approx A(E) e^{-2\mathcal{H}L}$  for tunnelling gjennom tykk og/eller høy barriere, med forholdsvis langsomt varierende "prefaktor"  $A(E)$ .

Dvs:  $T \sim e^{-2\mathcal{H}L} = e^{-2 \int_0^L \mathcal{H} dx}$  når  $\mathcal{H} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \text{konst.}$

Det viser seg at  $T \sim e^{-2 \int_0^{x_0} \mathcal{H}(x) dx}$  også med (langsomt) varierende barriereshøyde  $V(x)$  mellom 0 og  $x_0$   
 [WKB-tilnærmingen; PCH 7.5; D3G 8]



(71)

Med  $V(x) = V_0 - eEx$  er  $\phi(x) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{W - eEx}$

som gir

$$T \sim \exp \left\{ - \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{W - eEx'} dx' \right\}$$

$$= \exp \left\{ - \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{W/eE} (W - eEx')^{3/2} \cdot \frac{2}{3} \cdot \left( -\frac{1}{eE} \right) dx' \right\}$$

$$= \exp \left\{ - \frac{4\sqrt{2m} W^{3/2}}{3\hbar eE} \right\}$$

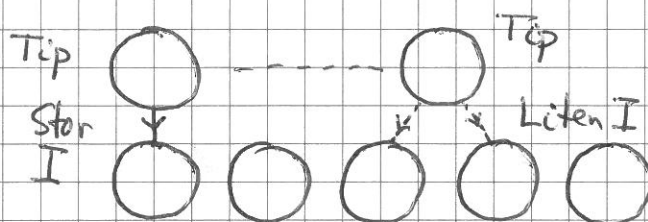
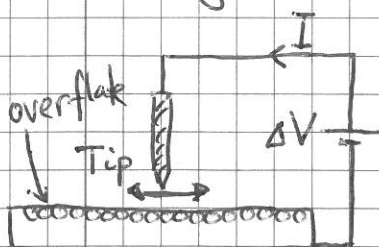
Typiske tallverdier:  $W = 4 \text{ eV}$ ,  $E = 10^9 \text{ V/m}$

$$\Rightarrow T \sim \exp \{-55\} \sim 10^{-24}; \text{ liten, men ikke null!}$$

Avhenger sterkt av  $E$ :  $E \rightarrow \frac{1}{2} \cdot 10^9 \frac{\text{V}}{\text{m}} \Rightarrow T \sim 10^{-48}$

$$E \rightarrow 2 \cdot 10^9 \frac{\text{V}}{\text{m}} \Rightarrow T \sim 10^{-12}$$

## Scanning Tunneling Microscopy (STM)



Binnig & Rohrer,  
IBM Zürich [NP 1986]

Tunnelingsstrøm  $I \sim T \sim \exp(-2\phi L)$  svært følsom

for endringer i tåp-overflate-avstanden  $L$

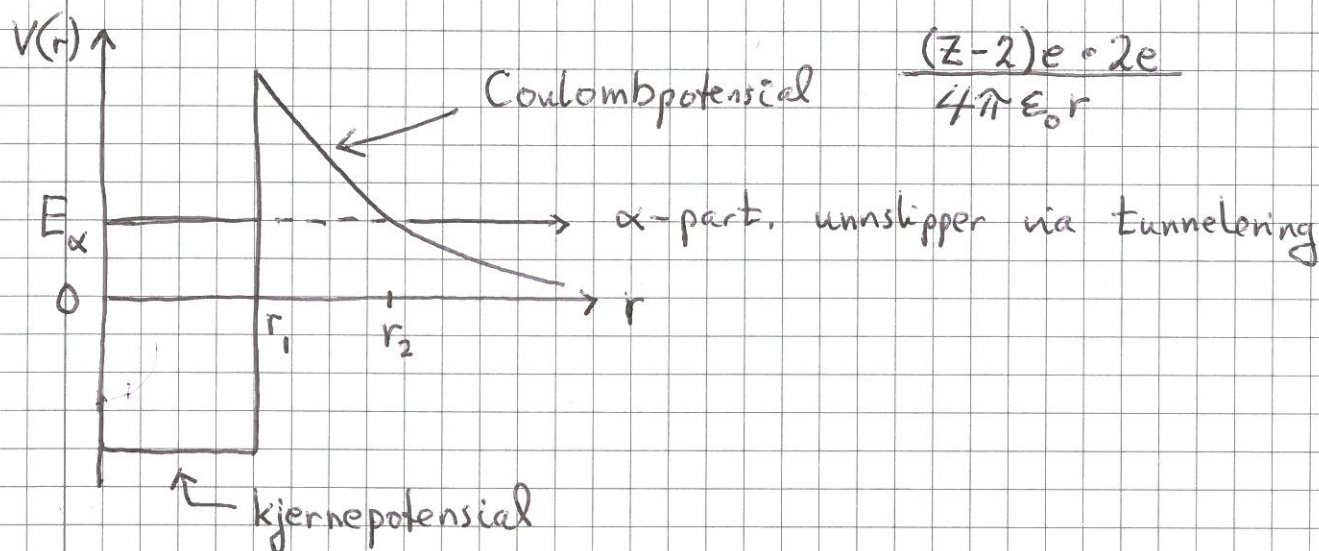
$\Rightarrow$  Avbildning på atomært nivå!

# Kjernerreaksjoner

(72)

${}^4_2\text{He}^{2+}$  (=  $\alpha$ -partikkel) som dannes i (stor) atomkjerne  
følger sterkt tiltrekkende kjernekrefter og "relativt sterkt"  
frastøtende Coulombkrefter.

Modellpotensial (Gamow 1928) :



Eks:  ${}^{212}_{84}\text{Po} \rightarrow {}^{208}_{82}\text{Pb} + \alpha$  ; levetid ca  $0.3 \mu\text{s}$  ;  $E_\alpha \approx 9 \text{ MeV}$

$$Z=84, r_1 \approx 6 \text{ fm} \Rightarrow V(r_1) \approx 6.3 \cdot 10^{-12} \text{ J} \approx \text{39 MeV}$$

$$T \sim \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2m_\alpha}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{V(r) - E_\alpha} dr\right\} ; V(r_2) = E_\alpha$$

$$\approx \exp\{-44.4\} \approx 5 \cdot 10^{-20}$$

$$v \approx \sqrt{2E_\alpha/m_\alpha} = 2 \cdot 10^7 \text{ m/s}$$

$$\Rightarrow f = \frac{1}{t_{\text{kollisjon}}} = v/2r_1 \approx 2 \cdot 10^{21} \text{ s}^{-1}$$

= antall ganger  $\alpha$ -part. prøver å unnslippe pr sek.

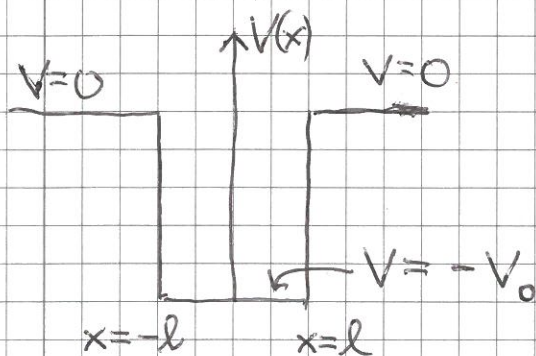
$$\Rightarrow f \cdot T \approx 10^2 \text{ s}^{-1} = \text{unnslippsraten}$$

$\Rightarrow \tau = 0.01 \text{ s}$  = estimert levetid (der vi bommet med faktor ca  $10^5$ , pga manglende prefaktor i  $T$ , og kanskje litt høy barriere)



# Deltafunksjonspotensial

[PCH 3.4; DJG 2.5; IØ 3.3] [PCH App B; IØ 2.4.f]



Grensetilfellet  $V_0 \rightarrow \infty, l \rightarrow 0$  med endelig verdi for produktet  $V_0 \cdot 2l$  ("dybde  $\times$  bredde") kan beskrives med Diracs  $\delta$ -funksjon,  $\delta(x)$ .

Definisjon:  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0)$  ( $f(x)$  kontinuerlig i  $x=0$ )

Med  $f(x) = 1$ :  $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$

Kun  $f(0)$  påvirker verdien av  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx$

$\Rightarrow$  må ha  $\delta(x) = 0$  når  $x \neq 0$

Hvis  $\delta(0) < \infty$ , blir da  $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 0$

$\Rightarrow$  må ha  $\delta(0) = \infty$

Vilkan representere  $\delta(x)$  med "normale funksjoner"

$\delta_\epsilon(x)$ , og la  $\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(x)$ .

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

Da er  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(x) = \begin{cases} \infty & ; x=0 \\ 0 & ; x \neq 0 \end{cases}$ , som påkrevd

og  $\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\epsilon(x) dx = \frac{1}{\epsilon} \cdot 2\epsilon/2 = 1$ , — " —.



Eks 2 :

$$\begin{aligned}\delta_\varepsilon(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi i x} \Big|_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} e^{ikx} \\ &= \frac{1}{\pi x} \cdot \frac{1}{2i} (e^{ix/\varepsilon} - e^{-ix/\varepsilon}) \\ &= \frac{1}{\pi x} \cdot \sin(x/\varepsilon)\end{aligned}$$

Oscillerer uendelig raskt når  $\varepsilon \rightarrow 0$ , unntatt "i  $x=0$ ",  
og  $\delta_\varepsilon(x) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \infty$ .

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_{\varepsilon}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} dx = \operatorname{sgn}(1/\varepsilon) = 1 \quad ; \quad \text{OK}$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk}$$

Fourier-representasjon  
av  $\delta(x)$

Flere egenskaper:

"Substituer"  $x' = -x$  :  $dx' = -dx$

Handwritten:  $\sin x = \cos x$

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

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

$$\Rightarrow \boxed{\delta(-x) = \delta(x)}$$

$$\left( \Rightarrow \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm i k x} dk \right)$$

Substituiert  $x' = |a|x \Rightarrow dx' = |a|dx$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(ax) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{x'}{|a|}\right) \delta(x') \frac{dx'}{|a|} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \left[\frac{1}{|a|} \delta(x)\right] dx$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(ax) = \delta(|a|x) = \frac{1}{|a|} \delta(x)}$$

$$3D: \int f(\vec{r}) \delta(\vec{r}) d^3r = f(0,0,0)$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y,z) \delta(\vec{r}) dx dy dz = f(0,0,0)$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(\vec{r}) = \delta(x) \cdot \delta(y) \cdot \delta(z)}$$

Fysisk relevans av  $\delta$ -funksjonen:

- Ladningstettheten  $\rho(\vec{r})$  for en punktladning  $q$  i  $\vec{r} = \vec{a}$ :

$$\rho(\vec{r}) = q \cdot \delta(\vec{r} - \vec{a})$$

$$\Rightarrow \text{Total ladning: } Q = \int \rho(\vec{r}) d^3r = q \int \delta(\vec{r} - \vec{a}) d^3r = q; \text{ ok.}$$

[Tilsvarende med punktmasse, se 5.8.1]

- Kortvarig "puls" av et eller annet ved tidspunktet  $T \sim \delta(t - T)$

$\delta$ -funksjonsnormering:

Fri partikkel med impuls  $p$ :  $\psi_p(x) = C e^{ipx/\hbar}$

Ikke normerbar i "egentlig forstand":

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_p(x)|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$$

Men vi har ortogonalitet:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx &= |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar} dx \stackrel{(y=x/\hbar)}{=} \\ &= |C|^2 \hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)y} dy = |C|^2 \hbar \delta(p'-p) \cdot 2\pi \end{aligned}$$



⇒ med  $C = (2\pi\hbar)^{-1/2}$  har vi  $\delta$ -funktionsnormeringen

$$\left\{ \langle \Psi_p, \Psi_{p'} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) dx = \delta(p' - p) = \delta(p - p') \right\}$$

for tilstandene  $\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$  i den kontinuerlige delen av energispekteret.

Tilbake til modellpotensialet, firkantbrønn med  $V_0 \rightarrow \infty$ ,  $l \rightarrow 0$ ,  $\beta = V_0 \cdot 2l$  endelig. Kan <sup>nå</sup> skrives på formen

$$V(x) = -\beta \delta(x)$$

Merk at siden  $\int \delta(x) dx = 1$ , må enheten til  $\delta(x)$  være  $[x]^{-1}$ , dvs  $[\delta(x)] = 1/m$  når  $x$  er en lengde (posisjon).

Med  $\beta = V_0 \cdot 2l$  blir dermed  $[V(x)] = [V_0 \cdot 2l \cdot \delta(x)] = [V_0] \cdot m$

Når ~~for~~  $x \neq 0$  er  $V(x) = 0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' = E\Psi \Rightarrow \Psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi = \kappa^2 \Psi$$

med akseptabel løsning for  $E < 0$  ( $|\Psi|$  endelig;  $\Psi$  kontinuerlig)

$$\Psi(x) = \begin{cases} C e^{-\kappa x} & ; x > 0 \\ C e^{\kappa x} & ; x < 0 \end{cases}$$

"Tricks": Integrasjon av TUSL fra  $-\varepsilon$  til  $+\varepsilon$  og grensen  $\varepsilon \rightarrow 0$  fastlegger  $\kappa$ , og dermed energien til den bundne tilstanden.



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x)\psi = E\psi$$

(77)

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} \psi' = \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\psi - \frac{2m}{\hbar^2} E\psi$$

$$\Rightarrow \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d}{dx} \psi'(x) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} (-\beta) \delta(x) \psi(x) dx}_{= -\frac{2m\beta}{\hbar^2} \psi(0)} - \underbrace{\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2m}{\hbar^2} E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx}_{= 0}$$

$$= \psi'(0^+) - \psi'(0^-)$$

Indsætning af  $\psi(0) = C$ ,  $\psi'(0^+) = -\hbar C$  og  $\psi'(0^-) = \hbar C$

$$\Rightarrow -2\hbar C = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} C$$

$$\Rightarrow \hbar = \frac{m\beta}{\hbar^2} \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}$$

Kun en bundet tilstand i  $\delta$ -brønnen: Fra s. 56 har vi

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

før bundne løsninger. Her er  $\xi = \sqrt{E/V_0} < 1$  og

$$k_0 l = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{V_0} l = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{V_0 \cdot 2l}{V_0 \cdot 2} = \underbrace{\frac{\sqrt{2m}\beta}{2\hbar}}_{\text{endelig}} \cdot \frac{1}{V_0} \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty} 0,$$

så at 1. asymptote til  $\tan(\xi \cdot k_0 l)$  ligger ved  $\xi \rightarrow \infty$ ,  
og dermed bare en symmetrisk bundet tilstand!

(Uanset "styrke"  $\beta$  på potentialet.)

Spredning på  $\delta$ -potensialet er enkelt og litt pussig: (78)

$$x < 0: \psi = e^{ikx} + r e^{-ikx} \quad (\text{inn fra venstre; } E = \hbar^2 k^2 / 2m)$$

$$\psi' = ik(e^{ikx} - r e^{-ikx})$$

$$x > 0: \psi = t e^{ikx}$$

$$\psi' = ikt e^{ikx}$$

$$\psi \text{ kont. i } x=0 \Rightarrow 1+r=t$$

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} \psi(0)$$

$$\Rightarrow ikt - ik(1-r) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} t$$

$$r=t-1 \Rightarrow ikt - ik(2-t) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} t$$

$$\Rightarrow 2ikt + \frac{2m\beta}{\hbar^2} t = 2ik$$

$$\Rightarrow t = (1 + m\beta / ik\hbar^2)^{-1}$$

$$\Rightarrow T = |t|^2 = (1 + (m\beta / k\hbar^2)^2)^{-1}$$

som med  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , dvs  $k^2 = 2mE / \hbar^2$ , gir

$$\underline{T(E) = (1 + m\beta^2 / 2E\hbar^2)^{-1}}; \quad \underline{R(E) = (1 + 2E\hbar^2 / m\beta^2)^{-1}}$$

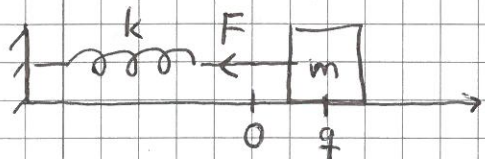
Dvs  $T$  er uavhengig av fortegnst på  $\beta$

$\Rightarrow$  samme  $T$  for brønn og barriere med gitt styrke  $\beta$ !



# Harmonisk oscillator

[PCH 3.5; DJG ; IØ 3.4]



$$F(q) = -kq, \quad V(q) = \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

$$q(t) = A \cos(\omega t + \varphi) \quad (\text{klassisk})$$

$$\omega = \sqrt{k/m}; \quad E (= V_{\max}) = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

QM:  $\Psi(q,t) = \psi(q) e^{-iEt/\hbar}$

TUSL:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \psi = E\psi \quad / \cdot (-1)$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{d(\sqrt{2m}\cdot q/\hbar)^2} + \left( E - \left( \frac{\sqrt{2m}\cdot q}{\hbar} \right)^2 \cdot \frac{\hbar^2 \omega^2}{4} \right) \psi = 0 \quad / \cdot \left\{ \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \right\}^2$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{d(\sqrt{m\omega/\hbar} \cdot q)^2} + \left( \frac{E}{\hbar\omega/2} - \frac{q^2 m\omega}{\hbar} \right) \psi = 0$$

$x \equiv q \sqrt{m\omega/\hbar}$   
 $\Rightarrow$   
 $\varepsilon \equiv E/(\hbar\omega/2)$

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

ID QM  
 Harm Osc på  
 dim. løs form

Siden  $(e^{-x^2/2})'' = (-x e^{-x^2/2})' = -e^{-x^2/2} + x^2 e^{-x^2/2}$ ,

ser vi at  $\psi_0(x) = C_0 e^{-x^2/2}$  er løsning;

$$C_0 (x^2 - 1) e^{-x^2/2} + C_0 (\varepsilon - x^2) e^{-x^2/2} = 0,$$

dersom  $\varepsilon_0 = 1$ , dvs  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . Her er  $\psi_0$  symmetrisk  
 og uten nullpunkter, så dette må være grundtilstanden!

(Normering:  $C_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 1 \Rightarrow C_0 = \pi^{-1/4}$ )

Men!!  $\tilde{C}_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega q^2/\hbar} dq = 1 \Rightarrow \tilde{C}_0 = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$



Dermed svært fristende å satse på at

$$\psi_1(x) = C_1 x e^{-x^2/2}$$

også er løsning:

$$\begin{aligned} (\psi_1)'' &= (C_1 e^{-x^2/2} - C_1 x^2 e^{-x^2/2})' \\ &= -C_1 x e^{-x^2/2} - 2C_1 x e^{-x^2/2} + C_1 x^3 e^{-x^2/2} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow C_1 (x^3 - 3x) e^{-x^2/2} + (\epsilon_1 x - x^3) C_1 e^{-x^2/2} = 0$$

$\Rightarrow$  Løsning! Med  $\epsilon_1 = 3$ , dvs  $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$ .

Åpentbart 1. eksakte tilstand: Antisymmetrisk, med ett nullpunkt!

Dermed ca like fristende å prøve

$$\psi(x) = v(x) e^{-x^2/2}$$

som generell løsning, med "enkel funksjon"  $v(x)$ ,  
f.eks. polynom (potensrekke)

$$v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$$

Når er

$$\begin{aligned} \psi'' &= (v e^{-x^2/2})'' = (v' e^{-x^2/2} - x v e^{-x^2/2})' \\ &= (v'' - 2x v' - v + x^2 v) e^{-x^2/2} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (v'' - 2x v' - v + \cancel{x^2 v} + \epsilon v - \cancel{x^2 v}) e^{-x^2/2} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{v'' - 2x v' + (\epsilon - 1)v = 0} \quad \text{Diff.-lign. for } v(x)$$

Innsøtting av  $v = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$ ,  $v' = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k x^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) x^k$  (81)  
 og  $v'' = \sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1) x^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2} (k+2)(k+1) x^k$  gir nå

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ a_{k+2} (k+2)(k+1) - a_k \cdot 2k + a_k (\varepsilon - 1) \right\} x^k = 0$$

Må da være null for alle  $k$

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

Dvs: Hvis  $a_0$  og  $a_1$  er kjent (via normering av  $\Psi_0$  og  $\Psi_1$ ),  
 gir dette  $a_2, a_4, a_6, \dots$  fra  $a_0$  og  $a_3, a_5, \dots$  fra  $a_1$

For store  $k$  vil  $a_{k+2}/a_k \approx 2/k$ . Men da er

$$v(x) \sim e^{x^2} = 1 + x^2 + x^4/2! + \dots = \sum_{k=0,2,4,\dots} x^k / (k/2)!$$

$$\text{med } a_{k+2}/a_k = \frac{(k/2)!}{[(k+2)/2]!} = \frac{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot k/2}{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot (k/2) \cdot (\frac{k}{2} + 1)} \approx \frac{2}{k}$$

Men: Da er  $\Psi(x) = v(x) \exp(-x^2/2) \sim \exp(+x^2/2) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \infty$ ,  
 som er ufysisk!

$\Rightarrow$  Rekken for  $a_k$  må (vegge) bryte av!

$\Rightarrow \varepsilon$  må være et odde heiltall

Hvis  $\varepsilon = 1, 5, 9, 13, \dots$ : Da er  $\forall$   $a_2, a_4, a_6, a_8, \dots = 0$   
 Må nå ha  $a_1 = 0$  ( $= a_3 = a_5 = \dots$ )

Hvis  $\varepsilon = 3, 7, 11, \dots$ : Da er  $\forall$   $a_3 = 0, a_5 = 0, a_7 = 0, \dots$   
 Må nå ha  $a_0 = 0$  ( $= a_2 = a_4 = \dots$ )

Ansatt:  $E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega \varepsilon = \frac{1}{2}\hbar\omega(2n+1) = \underbrace{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega}$ ;  $n=0,1,2,\dots$  (82)

$n=0,2,4,\dots$ : Symmetrisk  $\Psi_n(x) = U_n(x)e^{-x^2/2}$

$n=1,3,5,\dots$ : Antisymmetrisk  $\Psi_n(x) = U_n(x)e^{-x^2/2}$

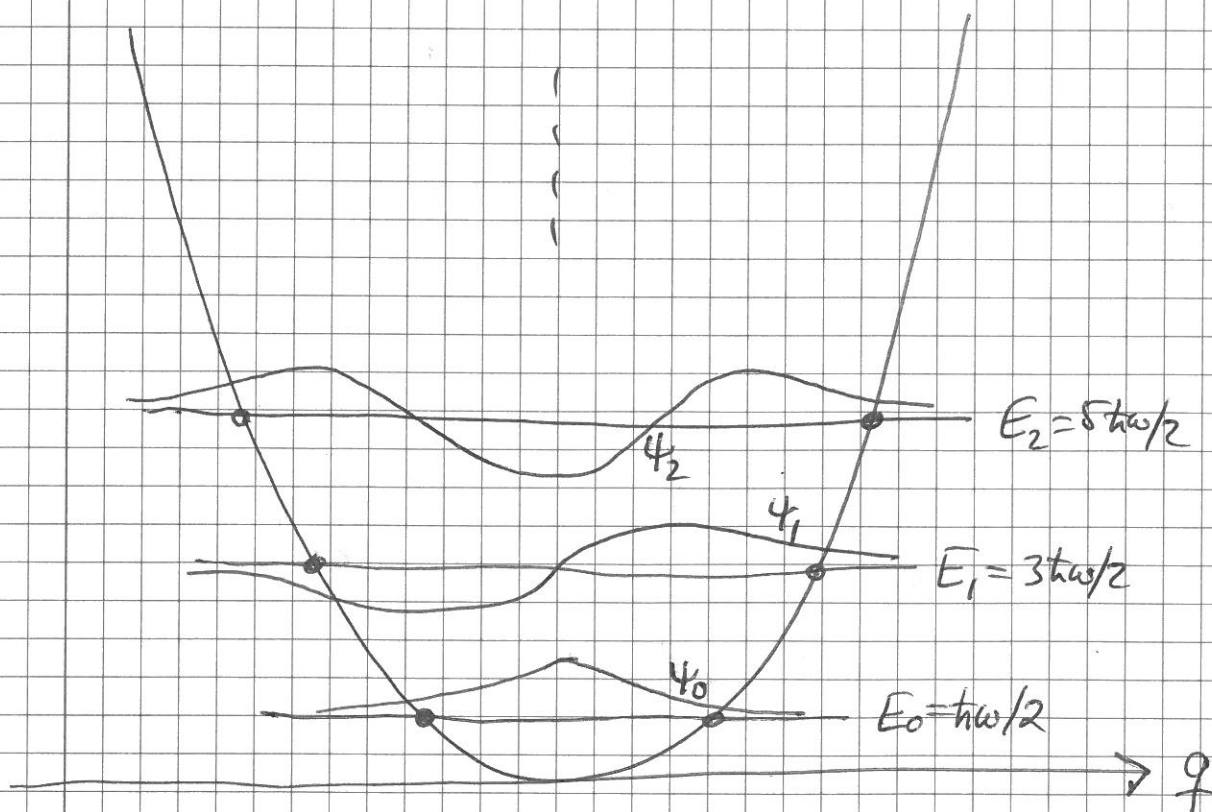
Normerte egenfunksjoner er (med  $q = \text{posisjon}$ )

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

Hermite-polynomer:

$H_0(x)=1$ ,  $H_1(x)=2x$ ,  $H_2(x)=4x^2-2$ ,

$H_3(x)=8x^3-12x$ ,  $\dots$



• Klassiske vendepunkter ( $E=V$ ;  $K=0$ )



# QM vs klassisk harmonisk oscillator

[PCH 3.5.5; DFG 2.3.2; IØ 3.4.d]

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

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

Klassisk:

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

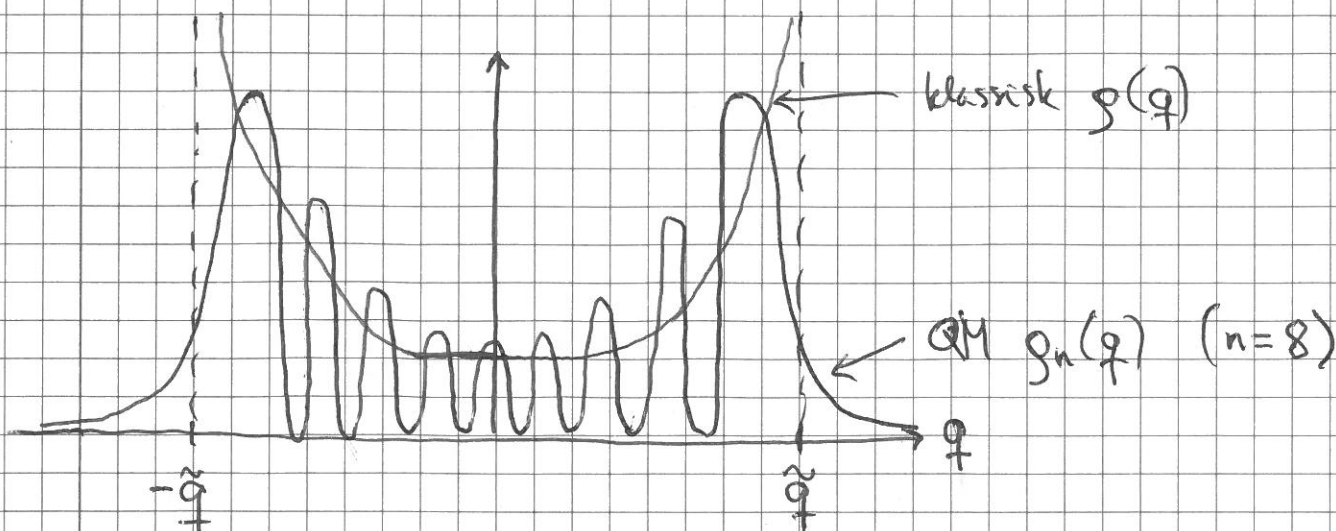
der  $T = 2\pi/\omega$  og  $dt = 2 \cdot dq/v(q)$  (2 pga fram og tilbake)

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

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

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)

$\Rightarrow$  Må lage bølgepakke for å beskrive partikkel som svinger:

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

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

Koeffisientene  $\{c_n\}$  bestemmes slik:

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

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j^*(q) \Psi(q, 0) dq &= \sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j^*(q) \Psi_n(q) dq \\ &= \sum_n c_n \delta_{jn} = c_j \end{aligned}$$

$\Rightarrow \dots \Rightarrow$

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

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

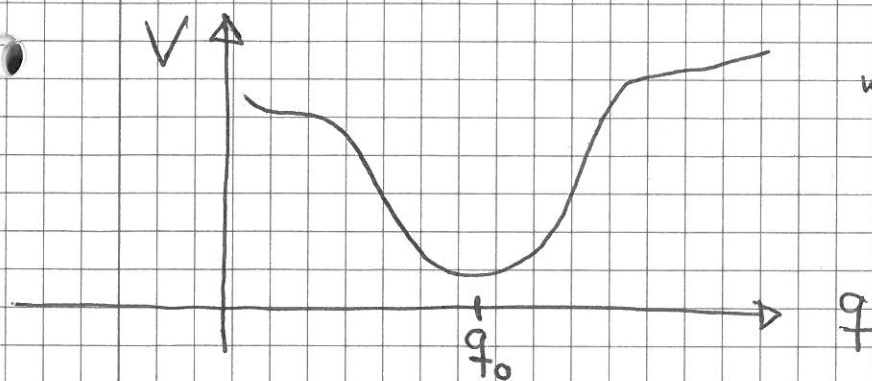
dvs som klassisk partikkel (osillator), med

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]

85



"Villkårig" potential  $V(q)$  med stabil likviditet i  $q=q_0$

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

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

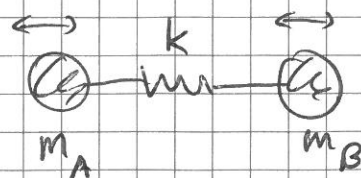
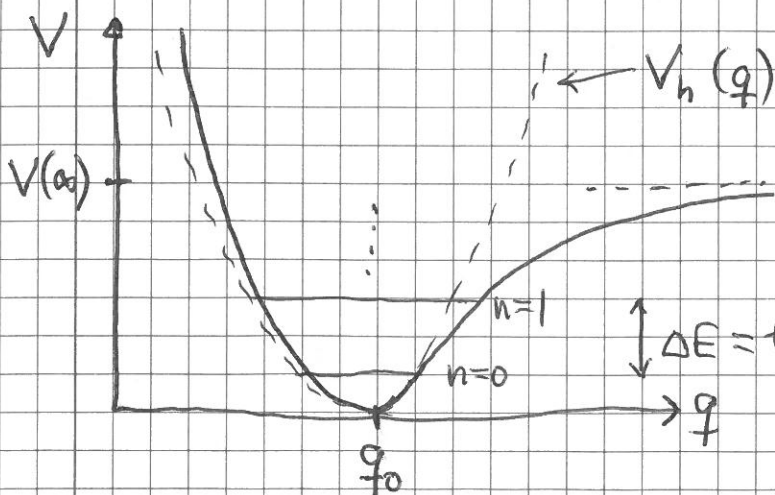
$$\Rightarrow V(q) \approx V_h(q) = V(q_0) + \frac{1}{2} k (q-q_0)^2$$

med (tilnærmede) energinivåer

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

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

Eks: Vibrasjoner i 2-atomig molekyl



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

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

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

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

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



# QM i 3D (og 2D)

(86)

[PCH 5; DFG 4; IØ 5]

## Harmonisk oscillator

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

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

$$\text{dvs } \hat{H} = \hat{H}^{(x)} + \hat{H}^{(y)} + \hat{H}^{(z)} \quad (\text{der } \hat{H}^{(x)}, \hat{H}^{(y)}, \hat{H}^{(z)} \text{ kommu-})$$

terer)

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

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

$$\text{som indsatt i } \Psi_{n_x n_y n_z}^{-1} \hat{H} \Psi_{n_x n_y n_z} = E \quad \text{gør}$$

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

$\Rightarrow$  alle [...] må være konstanter, hvor  $E_x$ ,  $E_y$  og  $E_z$ ,  
og vi vet, fra 1D harm. osc., at

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

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

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

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

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

Tre uafh. harm. osc. generaliseres dermed lett til

vilkårlig mange!

Eks: Gittervibrationer 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  $\vec{F} = -\nabla V(r) = -m\omega^2 \vec{r}$   
 ("sentralkraft";  $\vec{F} \sim \hat{r}$ )

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

$$\text{med } N = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, \dots$$

Degenerasjon: Flere enn en tilstand med lik energi

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

(ikke degenerert) ( $g_0 = 1$ )

$$E_1 = \frac{5}{2} \hbar \omega; \quad \left. \begin{array}{l} \Psi_{100} \sim x \exp(-m\omega r^2/2\hbar) \\ \Psi_{010} \sim y \exp(-m\omega r^2/2\hbar) \\ \Psi_{001} \sim z \exp(-m\omega r^2/2\hbar) \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{degenerasjonsgrad} \\ g_1 = 3 \end{array}$$

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

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

(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  $\Psi_{100}$ ,  $\Psi_{010}$  og/eller  $\Psi_{001}$  er like gode egenfunksjoner for tilstand med energi  $E_1 = 5\hbar^2 a^2 / 2$ .

Eks: Rotasjon av koordsystemet en vinkel  $\alpha$  om  $z$ -aksen gir nye akser  $(x', y', z')$  med sammenhengen

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

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

$$z' = z$$

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

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

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



## Partikkel i boks [PCH 5.2]

(89)

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

$\Rightarrow$  TVSL separerer (som for harm. osc.), og gir

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

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

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

Relevans: Ideelle gasser, dvs partikler uten <sup>innbyrdes</sup> vekselvirkning.  
F.eks. elektroner i krystaller; en "første tilnærming".  
(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.

$\Rightarrow$  Tilnærmet kontinuerlig spektrum.

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

# Tilstandstetthet [PCH 5.2.2]

("Density of states")

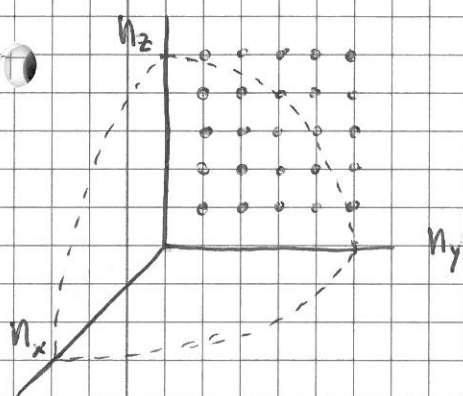
(90)

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

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

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

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

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

## QM i 2D med rotasjonssymm. $V(r)$ [PCH 5.3]

(91)

- myk overgang til 3D
- eksperimentelt mulig: Hvis  $L_z$  er så liten at  $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_z^2} \gg k_B T$ , er alle partikkene i tilstander med  $n_z = 1$ , og "z-frihetsgraden" er "frosset ut", dvs systemet er essensielt 2-dimensjonalt

$(x, y) \rightarrow$  polarkoord.  $(r, \varphi)$

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

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

$$\text{[F.eks. med kjernerregel: } \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{y/x^2}{1+(y/x)^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} =$$

$$= \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \dots = \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \dots \quad \left. \begin{array}{l} \Rightarrow \nabla^2 = \\ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \end{array} \right\}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 = \dots$$

$\Rightarrow$  TUSL for partikkel med masse  $\mu$ :

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

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

$$\underbrace{r^2 \left\{ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] R \right\}}_{\text{kun avhengig av } r} = \underbrace{- \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2}}_{\text{kun avh. av } \varphi}$$

$\Rightarrow$  Begge sider av likhetsbrevet må være lik en konstant, selvså lik  $m^2$



$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + m^2 \Phi = 0$$

[Ligningen for  $R(r)$  er vanskeligere, og avh. av formen på  $V(r)$ ]

(92)

$$\Rightarrow \Phi(\varphi) \sim e^{im\varphi}$$

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow e^{im \cdot 2\pi} = 1 \Rightarrow \text{helellig } m$$

$$\Rightarrow \Psi(r, \varphi) = R(r) e^{im\varphi}; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Dreieimpuls i 2D:

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \vec{r} \times \vec{p} = (x \hat{x} + y \hat{y}) \times (p_x \hat{x} + p_y \hat{y}) \\ &= (x p_y - y p_x) \hat{z} = L_z \hat{z} \quad (= \text{klassisk dreieimpuls i 2D}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{QM: } p_y &\rightarrow \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_x \rightarrow \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \\ L_z &\rightarrow \hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \end{aligned}$$

Polarkoordinat:

$$\begin{aligned} x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} &= r \cos \varphi \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &\quad - r \sin \varphi \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

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

$$\text{Vi ser at } \hat{L}_z \Psi(r, \varphi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} R(r) e^{im\varphi} = m\hbar \Psi(r, \varphi)$$

$\Rightarrow \Psi(r, \varphi) = R(r) e^{im\varphi}$  er egenfunksjoner for  $\hat{L}_z$  med egenverdier  $m\hbar$

$\Rightarrow$  Partikler i 2D rot. symm. pot.  $V(r)$  har kvantisert dreieimpuls:

$$L_z = 0, \pm \hbar, \pm 2\hbar, \dots$$

# Dreieckspuls in 3D [PCH 5.4; D3G ; IØ 5.2]

(93)

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

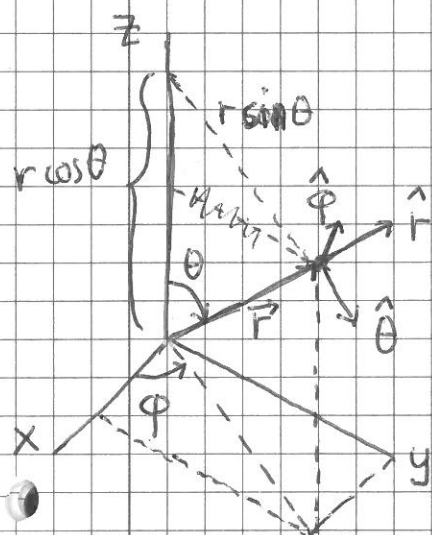
$$\vec{r} = r \hat{r}$$

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

$$[df = \nabla f \cdot d\vec{s} ; d\vec{s} = \hat{r} dr + \hat{\theta} r d\theta + \hat{\varphi} r \sin \theta d\varphi]$$

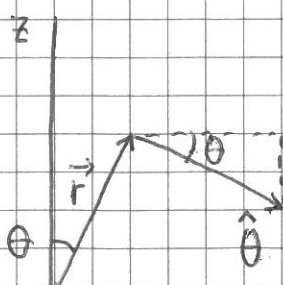
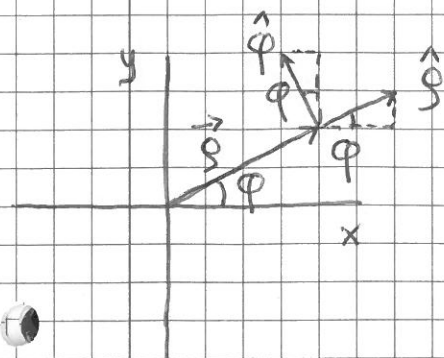
Här dessuten, när  $f = f(r, \theta, \varphi)$ , at  $df = \frac{\partial f}{\partial r} dr + \frac{\partial f}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial f}{\partial \varphi} d\varphi$

$$\text{Sammenvikning gir } (\nabla f)_r = \frac{\partial f}{\partial r}, (\nabla f)_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta}, (\nabla f)_\varphi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi}$$



$$\begin{aligned} \hat{r} \times \hat{r} &= 0 \\ \hat{r} \times \hat{\theta} &= \hat{\varphi} \\ \hat{r} \times \hat{\varphi} &= -\hat{\theta} \end{aligned}$$

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



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

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

$$\hat{\theta} = -\hat{z} \sin \theta + \hat{s} \cos \theta$$

$$= -\hat{z} \sin \theta$$

$$+ \hat{x} \cos \varphi \cos \theta$$

$$+ \hat{y} \sin \varphi \cos \theta$$

(94)

$$\Rightarrow \hat{L} = \frac{\hbar}{i} \left\{ -\hat{x} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{y} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \hat{x} \cos \varphi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \hat{y} \sin \varphi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}$$

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

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

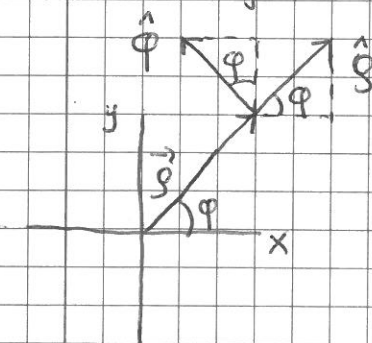
$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Vi trenger også  $\hat{L}^2 = \hat{L} \cdot \hat{L}$ , som kan regnes ut på (minst) et par måter:

$$(1) \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

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

Med (2) trengs  $\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \varphi}$ ,  $\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \theta}$ ,  $\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \varphi}$  og  $\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta}$ :



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

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

$$\hat{z} = \hat{r} \cos \theta - \hat{\theta} \sin \theta$$

$$\hat{\theta} = -\hat{z} \sin \theta + \hat{\phi} \cos \theta$$

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

$$\hat{\phi} = \hat{\theta} \cos \theta + \hat{r} \sin \theta$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \varphi} = -\hat{x} \cos \varphi - \hat{y} \sin \varphi = -\hat{\theta} = -\hat{\theta} \cos \theta - \hat{r} \sin \theta$$

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \theta} = 0; \quad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \varphi} = -\hat{x} \sin \varphi \cos \theta + \hat{y} \cos \varphi \cos \theta = \hat{\phi} \cos \theta$$

$$\text{og } \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\hat{z} \cos \theta - \hat{\phi} \sin \theta = -\hat{r} \cos^2 \theta + \hat{\theta} \sin \theta \cos \theta - \hat{\theta} \sin \theta \cos \theta - \hat{r} \sin^2 \theta = -\hat{r}$$



Tror likvid (i) er enklast!

(95)

$$\begin{aligned}\hat{L}_x \hat{L}_x &= -\hbar^2 \left( -\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \left( -\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left( \sin^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \sin\varphi \cos\varphi \left( -\frac{\sin\theta}{\sin\theta} - \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \right) \frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin\varphi \cos\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right. \\ &\quad \left. + \cos^2\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi \sin\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \frac{\partial}{\partial\theta} \right. \\ &\quad \left. - \cos\varphi \sin\varphi \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} + \cos^2\varphi \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{L}_y \hat{L}_y &= -\hbar^2 \left( \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \left( \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left( \cos^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cos\varphi \sin\varphi \left( -\frac{\sin\theta}{\sin\theta} - \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \right) \frac{\partial}{\partial\varphi} - \cos\varphi \sin\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right. \\ &\quad \left. + \sin^2\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \cos\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \frac{\partial}{\partial\theta} \right. \\ &\quad \left. + \sin\varphi \cos\varphi \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin^2\varphi \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)\end{aligned}$$

$$\hat{L}_z \hat{L}_z = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\}$$

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

I  $\hat{H}$  inngår  $\nabla^2$ , som i kulekoordin. er (uten bevis!)

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

$\Rightarrow$  Vi kan skrive: ( $\mu$ =massen)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) = \hat{K}_r + \hat{K}_L + V(r)$$

som kan vise seg nyttig! (Vi antar her kulesymm. pot.  $V(r)$ )

Frå s. 42:  $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$

• Dvs: Kan ha skarpe verdier for A og B samtidig,

$$\Delta A = \Delta B = 0,$$

(kun) dersom  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ .

Hvis  $\Delta A = \Delta B = 0$ , sier vi at A og B er kompatible.

Da må systemet (partikkelen) befinne seg i en tilstand  $\phi$  som er egentilstand til både  $\hat{A}$  og  $\hat{B}$ :

•  $\hat{A}\phi = A\phi, \hat{B}\phi = B\phi$ ;  $\phi =$  simultan egenfunksjon til  $\hat{A}$  og  $\hat{B}$

[Se også PCH 4.1; DTG ; IØ 4.1]

• Kan vi ha skarp energi E og abs.verdi av dreieimpuls,  $|\vec{L}|$ , samtidig? Dvs: Er  $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$ ?

Ja!

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

$$[\hat{K}_L, \hat{L}^2] = \frac{1}{2\mu r^2} [\hat{L}^2, \hat{L}^2] = 0$$

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

- Kan vi ha skarp  $\vec{L}$ ? Dvs skarp  $L_x, L_y$  og  $L_z$  samtidig? Dvs: Er  $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = 0$ ? ( $i, j = x, y, z$ )

Nei!

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] \\ &= -\hbar^2 [y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}, z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}] \end{aligned}$$

Her "overlever" kun  $y\frac{\partial}{\partial x}$  og  $-x\frac{\partial}{\partial y}$

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

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

$\Rightarrow$  Bare en komponent av  $\vec{L}$  kan være skarp om gangen!

- Kan vi ha skarp  $|\vec{L}|$  og  $L_i$  ( $i=x, y, z$ ) samtidig?

$$\text{Dvs: Er } [\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0?$$

Ja! Ser f.eks. på  $i=x$ .

$$[\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] = 0 \quad (\text{selvsagt})$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] &= \hat{L}_y \hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y \hat{L}_y \\ &= \hat{L}_y \hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_y \hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_x \hat{L}_y \hat{L}_y \\ &= \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x] \hat{L}_y \\ &= \hat{L}_y (-i\hbar \hat{L}_z) + (-i\hbar \hat{L}_z) \hat{L}_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] &= \dots = \hat{L}_z [\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \hat{L}_z = \hat{L}_z (i\hbar \hat{L}_y) + (i\hbar \hat{L}_y) \hat{L}_z \\ &= -[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] \end{aligned}$$



$\Rightarrow [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0$  og tilsvarende blir også

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

$\Rightarrow L = |\vec{L}|$  og en av komponentene til  $\vec{L}$  kan ha skarpe verdier samtidig!

- Dermed, for kulesymm. pot.  $V(r)$ , er  $E, |\vec{L}|$  og (f.eks.)  $L_z$  kompatible fysiske størrelser som alle kan være skarpt definert samtidig.

- Hvilke verdier kan  $L^2$  og  $L_z$  ha i et kulesymm. pot.  $V(r)$ ?

Svar:  $\hbar^2 l(l+1)$ ;  $l=0,1,2,\dots$  ( $L^2$ )

og  $m\hbar$ ;  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

Dvs:  $\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \left[ \begin{smallmatrix} \text{se} \\ \text{s. 92} \end{smallmatrix} \right]$$

Egenfunksjonene  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  kalles sferiske harmoniske.

(Evt. kulefunksjoner.)

Fra s. 92 vet vi at  $Y_{lm}$  har  $\varphi$ -afhængighed  
 givet ved  $\exp(im\varphi)$ . Dvs:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi) = \Theta(\theta) e^{im\varphi}$$

Med  $\hat{L}^2$  fra s. 95:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \Theta(\theta) e^{im\varphi}$$

Her er  $\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} e^{im\varphi} = -m^2 e^{im\varphi}$ .

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \cdot \frac{d\Theta}{d\theta} \right)$$

Substituer  $x = \cos \theta \Rightarrow dx = -\sin \theta d\theta$  og  $\sin \theta = \sqrt{1-x^2}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{d}{\sin \theta d\theta} \left( \sin^2 \theta \frac{d\Theta}{\sin \theta d\theta} \right) &= \left( -\frac{d}{dx} \right) \left( (1-x^2) \cdot \left( -\frac{d\Theta}{dx} \right) \right) \\ &= \frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{d\Theta}{dx} \right] \\ &= (1-x^2) \frac{d^2 \Theta}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta}{dx} \end{aligned}$$

Egenverdligningen,

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$

blir nå

$$-(1-x^2) \Theta'' + 2x \Theta' + \frac{m^2}{1-x^2} \Theta = l(l+1) \Theta$$

dvs

$$(1-x^2) \Theta'' - 2x \Theta' + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] \Theta = 0$$

(med heltallig  $m$  og foreløpig uløst  $l$ )

Ligningen løses med rekkeutviklingsmetoden, dvs  
 å la det vi gjorde for harmonisk oscilator.

Detaljene tas ikke her. (Se f.eks. PCH S.4.5 og S.4.6)

Vi går heller direkte til løsningene!

$m=0$ : Legendres diff. ligning,

$$\left[ (1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + l(l+1) \right] P_l(x) = 0 ; x = \cos \theta$$

Med normeringsvilkåret  $P_l(1) = 1$  er løsningene Legendre-polynomene

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \dots$$

Rodrigues' formel,

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

$m=0$  gir  $\Phi_m(\varphi) = 1$ , slik at

$$Y_{l0} \sim P_l(\cos \theta)$$

dvs

$$Y_{00} \sim 1, Y_{10} \sim \cos \theta, Y_{20} \sim 3 \cos^2 \theta - 1, \dots$$

(symm.)

(antisymm.)

(symm.)

...



$m \neq 0$ : Ma ha  $\Theta_l^{-m} = \Theta_l^m$  da  $m^2$  ingår

(101)

$\Rightarrow$  nok å ta för seg  $m > 0$

Akseptable lösningar er associerade Legendre-funktioner,

$$\Theta_l^m = P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \left( \frac{d}{dx} \right)^m P_l(x)$$

med  $x = \cos \theta$ ,  $(1-x^2)^{m/2} = \sin^m \theta$

$$\Rightarrow Y_{lm} \sim P_l^m(x) e^{im\varphi} ; \quad P_l^{-m}(x) = P_l^m(x)$$

$$Y_{1\pm1} \sim \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2\pm1} \sim \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2\pm2} \sim \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad \text{osv}$$

Terminologi:

| $l$       | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |                |
|-----------|---|---|---|---|---|---|----------------|
| "bokstav" | s | p | d | f | g | h | osv alfabetisk |

(sharp) (principal) (diffuse) (fundamental)  
från spektroskopi på 1800-talet

Kulefunksjonene er ortogonale, så med riktig normering har vi

$$\int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$\uparrow$   
 $\sin\theta d\theta d\varphi$   
 (romvinklelement)

Danner et såkalt fullstendig sett

$\Rightarrow$  Vilkårlig funksjon  $f(\theta, \varphi)$  kan uttrykkes som lineærkombinasjonen

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Symmetriegenskaper og paritet

[PCH 4.2; DFG ; IØ 4.2]

Paritetsoperator:

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

dvs  $\hat{P}$  "speiler" en funksjon mhp origo. (Evt: Rotinversjon)

I 1D:  $x \rightarrow -x$

I 2D:  $x \rightarrow -x, y \rightarrow -y$  evt  $r \rightarrow r, \varphi \rightarrow \varphi + \pi$

I 3D:  $xyz \rightarrow -x, -y, -z$  evt  $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi$

Funksjoner uten former for symmetri har generelt ingen bestemt sammenheng mellom  $\Psi(\vec{r})$  og  $\Psi(-\vec{r})$ .

Hvis  $\Psi(-\vec{r}) = \Psi(\vec{r})$  :  $\hat{P}\Psi(\vec{r}) = +1 \cdot \Psi(\vec{r})$  (like paritet)

—  $\Psi(-\vec{r}) = -\Psi(\vec{r})$  :  $\hat{P}\Psi(\vec{r}) = -1 \cdot \Psi(\vec{r})$  (odde —)

$\Rightarrow$  De to mulige egenverdier til  $\hat{P}$  er  $p = \pm 1$ .

Egenfunksjoner til  $\hat{P}$  er alle funksjoner som oppfyller enten  $\Psi(-\vec{r}) = \Psi(\vec{r})$  eller  $\Psi(-\vec{r}) = -\Psi(\vec{r})$ , dvs funksjoner "med en bestemt paritet".

### Sfæriske harmoniske og paritet

$$Y_{lm} \sim P_l^{lm}(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

$$\sim \sin^{|m|} \theta \cdot \{\text{polynom av grad } l-|m| \text{ i } \cos\theta\} e^{im\varphi}$$

Ved rominversjon  $(r, \theta, \varphi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$  :

$$x = \cos\theta \rightarrow -\cos\theta = -x$$

$$\sin\theta \rightarrow \sin(\pi - \theta) = \sin\theta$$

$$\Rightarrow P_l^{lm}(\cos\theta) \rightarrow (-1)^{l-|m|} P_l^{lm}(\cos\theta)$$

$$e^{im\varphi} \rightarrow e^{im\varphi} e^{im\pi} = (-1)^m e^{im\varphi}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{P} Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}}$$

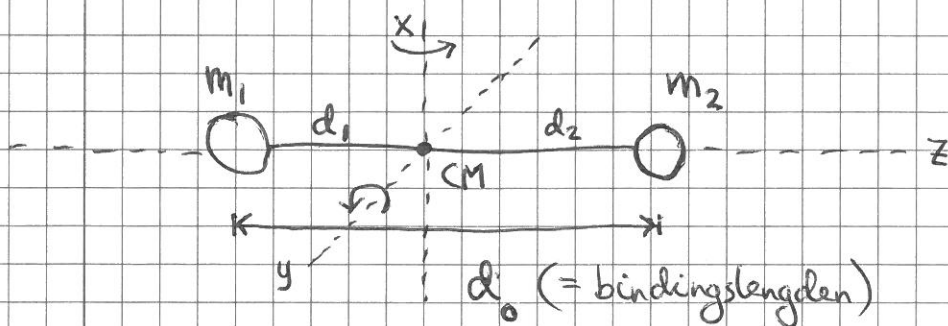


# Stiv rotator

104

[PCH 5.5; DTG Problem 4.25; IØ 5.3]

Eks: Toatomig molekyl (der vibrasjonene neglisjeres)



$$d_1 m_1 = d_2 m_2$$

$$d_1 + d_2 = d_0$$

Klassisk rotasjonsenergi:

$$K = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} m_1 \omega^2 d_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \omega^2 d_2^2$$
$$= \frac{1}{2} I \omega^2 = \cancel{\frac{1}{2} I \omega^2} = \frac{1}{2} I \left( \frac{L}{I} \right)^2 = \frac{L^2}{2I}$$

Tregheitsmoment (whp (M)):  $I = m_1 d_1^2 + m_2 d_2^2 = I_x = I_y$  ( $I_z = 0$ )

Dreieimpuls:  $L = I \omega$  ( $\vec{L} = I \vec{\omega}$ ;  $\vec{\omega} = \sum_{xy^2} \omega_j \vec{e}_j$ )

QM:

$$K \rightarrow \hat{K} \Rightarrow \hat{H} = \hat{K} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

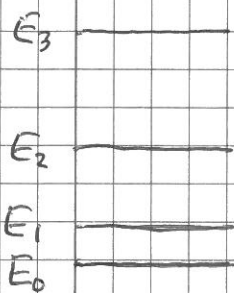
Fra s. 98:  $\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\Rightarrow \Psi_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \left\{ \begin{array}{l} l = 0, 1, 2, \dots \\ m = 0, \pm 1, \dots, \pm l \end{array} \right.$$
$$E_l = K_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$$

dvs degenerasjonsgrad  $g_l = 2l+1$

$$\Delta E_l = E_l - E_{l-1} = \frac{\hbar^2}{2I} \{ l(l+1) - (l-1)l \} = \frac{\hbar^2}{I} \cdot l$$

$$\Rightarrow E_1 - E_0 = \hbar^2/I \text{ etc.}$$



"Vanlige" molekyler ( $H_2, N_2, O_2, HCl, CO, \dots$ ):

$m_j$  fra 1u til  $\sim 50u$ ,

$d_0 \sim 1 \text{ \AA}$  til  $1.5 \text{ \AA}$

$$\Rightarrow I \sim 1 \text{ til } 100 \text{ u \AA}^2$$

$$(I = \mu d_0^2;$$

$$\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2) \\ \text{"redusert masse"})$$

$$\Rightarrow \hbar^2/I \sim 4 \text{ meV og nedover}$$

Termisk energi ved romtemp:  $k_B T \approx 25 \text{ meV}$

$\Rightarrow$  Molekyler i atmosfærisk gass ved 300 K befinner seg i grunntilstander ~~og~~ i eksiterte tilstander, mhp rotasjonsfrihetsgradene.  
(2 uavh. kvadratiske ledd i E)

Jf. vibrasjon (s. 85):  $\Delta E \sim 100 \text{ meV}$  og oppover

$\Rightarrow$  2-atomige molekyler ved 300 K er stort sett i grunntilstanden, mhp vibr. frihetsgradene (2 uavh. kvadr. ledd i E)

$\Rightarrow C_V = \frac{5}{2} k_B$  pr molekyl ved 300 K, og ikke

$\frac{7}{2} k_B$ , som forventet fra det klassiske ekvipartisjonsprinsippet, uten QM!

Overganger mellom nivå  $l$  og  $l \pm 1$  kan skje via absorpsjon eller emisjon av foton, med energi  $\hbar\omega = \Delta E_{\text{rot.}}$

# Kulesymmetrisk potensial $V(r)$

- [PGH 5.6 ; DTG 4.1 ; IØ 5.4]

Fra s. 95:  $\hat{H} = \hat{K}_r + \hat{K}_L + V(r)$

med  $\hat{K}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)$

$$\hat{K}_L = \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}$$

$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_i] = 0$  (s 96-98;  $i = x, y, z$ )

(s 96)  $\Rightarrow$  Felles egenfunksjoner for  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  og en av komponentene  $\hat{L}_i$

og  $\hat{L}^2$ ,  $L_x$ ,  $L_y$  og  $L_z$  er beregleskonstanter (se s 45)

$\Rightarrow \Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$  (som i 2D, s. 91)

Da  $\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$  gir innsettning i TUSL,

ders  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ , og divisjon med  $Y_{lm}$  ligningen for  $R(r)$ :

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (\text{Radial-ligningen})$$

Litt enklere ligning kan oppgis for  $u = r \cdot R$ :

$$\left. \begin{aligned} R' &= (u/r)' = u'/r - u/r^2 \\ R'' &= u''/r - 2u'/r^2 + 2u/r^3 \end{aligned} \right\} \Rightarrow R'' + \frac{2}{r} R' = u''/r$$



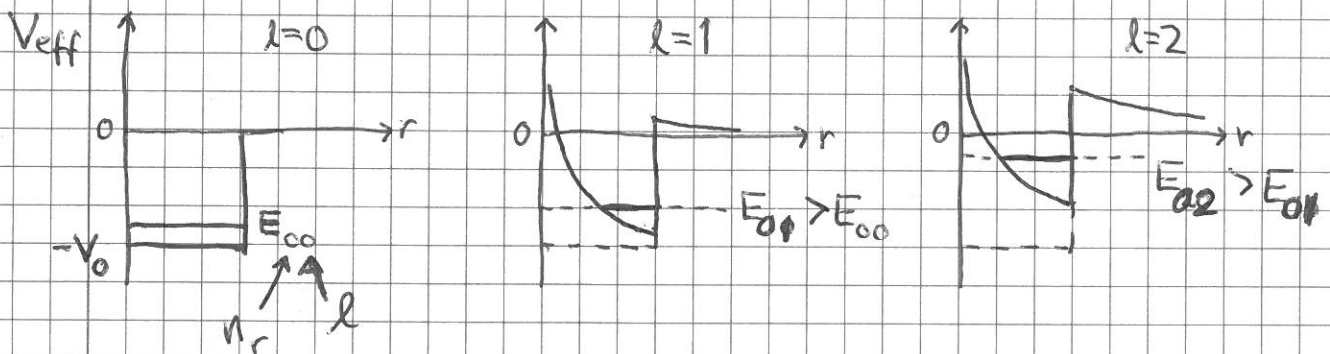
$$\Rightarrow \frac{u''}{r} + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{\hbar^2} \right\} \frac{u}{r} = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} u''(r) + V_{\text{eff}}^l(r) u(r) = E u(r)$$

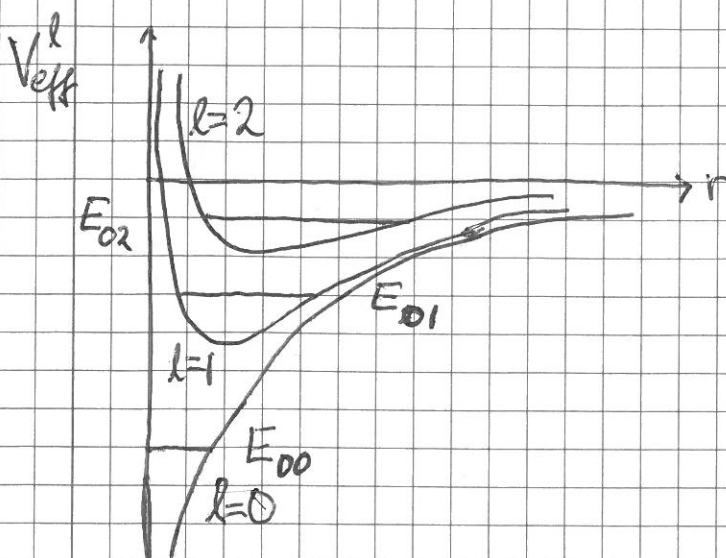
dvs som 1D problem med "effektivt potensial"

$$V_{\text{eff}}^l(r) = V(r) + \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}}_{\text{sentrifugal-leddet}}$$

Eks 1:  $V(r) = \begin{cases} -V_0 & ; r < a \\ 0 & ; r > a \end{cases}$  ("kulebrønn")



Eks 2:  $V(r) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r$  (Coulombpot.;  $Z=1$  (hydrogen))



## Generelle betraktninger:

(108)

- Sentrifugaleddet gjør  $r \geq 0$  til klassisk forbudt område, fra et "1D perspektiv"
- Må ha  $u(0) = 0$ ; hvis ikke divergerer  $R = \frac{u}{r}$  når  $r \rightarrow 0$
- Har generelt en eller flere bundne tilstander for gitt  $l$ -verdi, med økende antall nullpunkter  $n_r$  (= radielt kvantetall), og tilhørende energi  $E_{n_r, l} = E_{0l} < E_{1l} < E_{2l} < \dots$
- Kvantetallet  $m$  inngår ikke i TUSL for  $u$  og  $R$ 
  - $\Rightarrow E$  må være uavhengig av  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$
  - $\Rightarrow$  Deg. grad  $g_l = 2l + 1$  for energimåttet  $E_{n_r, l}$  (der gitt  $n_r$  og  $l$ )  
(Husk: Ikke degenerasjon i 1D  $\Rightarrow$  Kun 1 tilstand "mhp  $n_r$ ")
- Antak at  $V \rightarrow 0$  når  $r \rightarrow \infty$ ; har da også  $V_{\text{eff}}^l \rightarrow 0$  når  $r \rightarrow \infty$ 
  - $\Rightarrow E < 0$  for bundne tilstander
  - For store  $r$ :  $u'' \approx (-2\mu E/\hbar^2) u \equiv \mathcal{K}^2 u$ 
    - $\Rightarrow u(r) \sim \exp(-\mathcal{K}r)$
    - $\mathcal{K} = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2}$

- Anta  $V(r)$  (typisk  $-1/r$ ) mindre singular enn sentrifugalledet når  $r \rightarrow 0$

$$\Rightarrow u'' \approx [l(l+1)/r^2] u \quad \text{når } r \rightarrow 0$$

$$\Rightarrow u(r) \sim r^{l+1} \quad \text{når } r \rightarrow 0 \quad (u \sim r^{-l} \text{ gir ikke-normérbar } \Psi)$$

$$\Rightarrow R(r) \sim r^l \quad \text{når } r \rightarrow 0$$

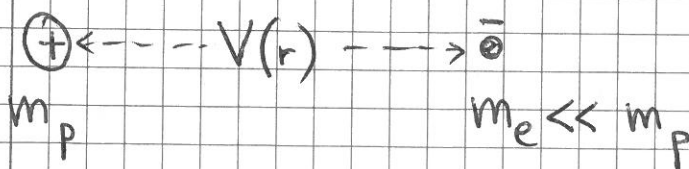
Holder også for  $l=0$ :

$$u_0'' = \frac{2\mu}{\hbar^2} [V(r) - E] u_0 \Rightarrow u_0 \sim r e^{-r/a} \sim r \quad \text{når } r \rightarrow 0$$

$$(\Rightarrow R_0 \sim e^{-r/a}, \text{ som sett på øving ...})$$

## Coulombpotensialet; H-atomet

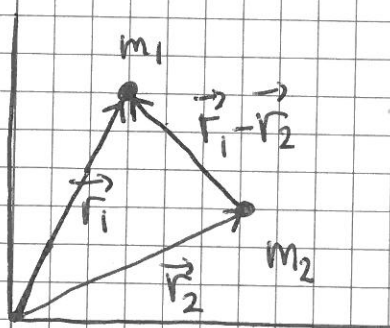
[PCH 5.7 ; DFG 4.2 ; IØ 5.5]



$\Rightarrow$  Nesten beregelig elektron omkring fast kjerne, men ikke helt!

Men: Skal se at 2-partikkelproblemet er ekvivalent med 2 stk uavh. 1-partikkelproblemer, tyngdepunkt-beregelsen (fri partikkel) og relativberegelsen (partikkel med redusert masse i potensialet  $V(r)$ ).





$$\vec{R}_{CM} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M} \quad ; \quad M = m_1 + m_2$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad ; \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{M}$$

$$\Rightarrow \vec{r}_1 = \vec{R}_{CM} + \frac{m_2}{M} \vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{R}_{CM} - \frac{m_1}{M} \vec{r}$$

$$\Rightarrow K = \frac{1}{2} m_1 \dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{\vec{r}}_2^2 = \dots =$$

$$= \frac{1}{2} M \dot{\vec{R}}_{CM}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{\vec{r}}^2 = \vec{P}^2 / 2M + \vec{p}^2 / 2\mu$$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{CM}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r)$$

$$\Rightarrow \Psi(\vec{R}_{CM}, \vec{r}) = \Psi_{CM}(\vec{R}_{CM}) \cdot \Psi_r(\vec{r})$$

og TUSL separerer i

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{CM}^2 \Psi_{CM} = E_{CM} \Psi_{CM}$$

(dvs: CM beveger seg som fri partikkel, "uinteressant")  
(masse M)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi_r + V(r) \Psi_r = E_r \Psi_r$$

dvs: partikkel med masse  $\mu$  i potensial  $V(r)$

$$\text{Total energi: } E = E_{CM} + E_r$$

For H-atomet:  $m_p/m_e \approx 1836$

(111)

$$\Rightarrow \mu \approx 0.9995 m_e$$

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + V_{\text{eff}}^l(r) u(r) = E u(r) ; u(0) = 0$$

$$\text{med } V_{\text{eff}}^l(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

$$\bullet \text{ [Hvis kjerne med } Z \text{ protoner: } e^2 \rightarrow Ze^2]$$

$$\text{Store } r: u(r) \sim \exp(-\kappa r) ; \kappa = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2} \quad (\text{s. 108})$$

$$\text{Små } r: u(r) \sim r^{l+1} \quad (\text{s. 109})$$

Dividerer lign. for  $u$  med  $4E$ :

$$\bullet \frac{d^2 u}{d\left\{\sqrt{-8\mu E/\hbar^2} r\right\}^2} + \left\{ -\frac{e^2}{16E\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{8E\mu r^2} - \frac{1}{4} \right\} u = 0$$

$$\Rightarrow \text{introducerer } g \equiv \sqrt{-8\mu E/\hbar^2} r \quad (\text{dimensionsløs})$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 u}{dg^2} + \left\{ \frac{\lambda}{g} - \frac{l(l+1)}{g^2} - \frac{1}{4} \right\} u = 0$$

$$\text{med } \lambda = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{\mu}{-2E}} \quad (\text{dim.løs})$$

$$\text{Ser at } \kappa r = g/2 \Rightarrow u \sim e^{-g/2} \text{ for store } g$$

$$\Rightarrow \text{vi prøver } u(\rho) = e^{-\rho/2} \cdot v(\rho)$$

$$\Rightarrow \frac{du}{d\rho} = e^{-\rho/2} \left( -\frac{1}{2}v + v' \right)$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = e^{-\rho/2} \left( \frac{1}{4}v - v' + v'' \right)$$

$$\Rightarrow v'' - v' + \frac{\lambda}{\rho} v - \frac{l(l+1)}{\rho^2} v = 0$$

Prøver rekkeutviklingen

$$v(\rho) = c_0 \rho^{l+1} + c_1 \rho^{l+2} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^{l+1+k}$$

hvaetter innsetting gir rekursjonsformelen

$$c_k = c_{k-1} \cdot \frac{l+k-\lambda}{k(2l+1+k)} ; \quad k=1,2,\dots$$

Hvis rekka ikke bytter av, vil  $c_k/c_{k-1} \sim 1/k$  for store  $k$ , som tilsvarer at  $v(\rho) \sim \exp(\rho)$  og  $u(\rho) \sim \exp(+\rho/2)$ , dvs den uakseptable divergente løsningen.

Avbryttskraw:  $\lambda =$  heltall minst lik  $l+1$

$$\Rightarrow \lambda = n = l+1 + n_r ; \quad n_r = 0,1,2,\dots$$



Gir energikvantiseringen:

$$\lambda = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{\mu}{-2E}} = n = l+1 + n_r$$

$= \alpha c$  (finsstrukturkonstanten  $\cdot$  lysfarten, se s. 12)

$$\Rightarrow E = -\mu c^2 \alpha^2 / 2n^2 = -\mu c^2 \alpha^2 / 2(l+1+n_r)^2$$

[Z protoner  $\Rightarrow \alpha \rightarrow Z\alpha$ ]

$$\left. \begin{array}{l} l = 0, 1, 2, \dots \\ n_r = 0, 1, 2, \dots \end{array} \right\} \Rightarrow n = 1, 2, 3, \dots$$

H-atomet:  $\mu \approx m_e$ ,  $\alpha \approx 1/137 \Rightarrow E_n \approx -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$

Merk at summen av  $l$  og  $n_r$  bestemmer  $E_n$ , ikke  $l$  og  $n_r$  hver for seg! (spesielt for  $1/r$ -potensialet)

Degenerasjon:

$$(n_r: n-1, n-2, n-3, \dots, 0)$$

$$n_r \geq 0 \Rightarrow l = n-1-n_r = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Dvs  $n$  mulige  $l$ -verdier for gitt verdi av  $n$ .

For hver  $l$ -verdi:  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

Dvs  $2l+1$  mulige  $m$ -verdier for gitt verdi av  $l$

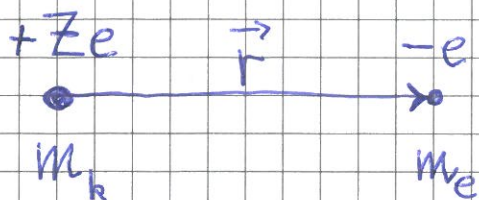
$$\Rightarrow g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 1 + 3 + 5 + \dots + (2n-1) \quad (n \text{ ledd})$$

$$= \cancel{1+2n-1} \underbrace{[1+2n-1]}_{2n} + \underbrace{[3+2n-3]}_{2n} + \dots \quad \left(\frac{n}{2} \text{ ledd}\right)$$

$$= 2n \cdot \frac{n}{2} = \underline{\underline{n^2}} \quad [\text{Gjelder ogs\aa for } \underline{\text{odde}} \text{ } n; \text{ sjekk selv!}]$$

# Coulombpotential; repulsion (++)

114



$$V(r) = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\mu = m_e m_k / (m_e + m_k)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = P_l^m(\cos \theta) \cdot e^{im\varphi}$$

$$l = 0, 1, 2, \dots ; \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

$$Y_{00} \sim 1, \quad Y_{10} \sim \cos \theta, \quad Y_{20} \sim 3\cos^2 \theta - 1, \dots$$

$$Y_{1,\pm 1} \sim \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm 1} \sim \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm 2} \sim \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

osv



$$R(r) = u(r)/r$$

(1/5)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + V_{\text{eff}}^l(r) u(r) = E u(r)$$

$$V_{\text{eff}}^l(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

$$\rho = \sqrt{-8\mu E/\hbar^2} r \quad (\text{dim. lgs})$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left\{ \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4} \right\} u = 0$$

$$\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{\mu}{-2E}} \quad (\text{dim. lgs})$$

$$u(\rho) = e^{-\rho/2} \cdot v(\rho)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 v}{d\rho^2} - \frac{dv}{d\rho} + \frac{\lambda}{\rho} v - \frac{l(l+1)}{\rho^2} v = 0$$

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^{l+1+k}$$

$$\Rightarrow C_k = C_{k-1} \cdot \frac{l+k-\lambda}{k(2l+1+k)} ; \quad k=1, 2, \dots$$



Aubruddskrav:

$$\lambda = n = l+1 + n_r ; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

Energikvantisering:

$$\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{-2E}} = Z \cdot \alpha \cdot \sqrt{\frac{\mu c^2}{-2E}} = n$$

Hovedkvantelt  
↓

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

$$\Rightarrow E_n = -\frac{1}{2} (Z\alpha)^2 \cdot \frac{\mu c^2}{n} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Hydrogen:  $Z=1, \mu \approx m_e \Rightarrow E_n \approx -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$

$E_n \ll \mu c^2$  (= relativistisk hvileenergi)  $\Rightarrow$  ikke-relativistisk behandling OK.

Degenerasjon:  $g_n = n^2$

(utledet s. 113)

Andre 1-elektron-systemer (ioner):

$\text{He}^+ : Z=2, E_n \approx -\frac{4 \cdot 13.6 \text{ eV}}{n^2} = -\frac{54.4 \text{ eV}}{n^2}$

osv.

Tunge atomer: Mange elektroner, men  $E_n^{(Z)} \sim Z^2 \cdot E_n^H$

$\Rightarrow$  av størrelse 100 keV hvis  $Z \sim 10^2$



⇒ relativistisk teori blir etterhvert nødvendig  
(for nøyaktige beregninger)

Noen eksplisitte radialfunksjoner  $R_{nl}(r)$ :

| $n$ | $l$ | $R_{nl}(r)$                                                      | "Navn" |
|-----|-----|------------------------------------------------------------------|--------|
| 1   | 0   | $R_{10} \sim e^{-r/a}$                                           | 1s     |
| 2   | 0   | $R_{20} \sim (1 - \frac{r}{2a}) e^{-r/2a}$                       | 2s     |
|     | 1   | $R_{21} \sim \frac{r}{a} e^{-r/2a}$                              | 2p     |
| 3   | 0   | $R_{30} \sim (1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2r^2}{27a^2}) e^{-r/3a}$ | 3s     |
|     | 1   | $R_{31} \sim \frac{r}{a} (1 - \frac{r}{6a}) e^{-r/3a}$           | 3p     |
|     | 2   | $R_{32} \sim (\frac{r}{a})^2 e^{-r/3a}$                          | 3d     |

med

$$a = \frac{1}{Z} \frac{m_e}{\mu} \cdot a_0 ; \quad a_0 = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} \approx 0.529 \text{ \AA}$$

(= Bohr-radius)



$$\begin{aligned}\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) &= R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ &= \frac{u_{nl}(r)}{r} \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)\end{aligned}$$

Normering:  $(n=0, 1, 2, \dots; l=0, \dots, n-1; m=0, \pm 1, \dots, \pm l)$

$$\begin{aligned}\int |\Psi_{nlm}|^2 d^3r &= \int_0^\infty [R_{nl}(r)]^2 r^2 dr \cdot \int |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \\ &= \int_0^\infty [u_{nl}(r)]^2 dr = 1\end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Sanns. for å finne elektronet i avstand mellom  $r$  og  $r+dr$  fra kjernen er

$$[u_{nl}(r)]^2 dr$$

$\Rightarrow$  "Radialtetthet":  $P_{nl}(r) = [u_{nl}(r)]^2 = r^2 [R_{nl}(r)]^2$

$$\begin{aligned}\text{Eks: } \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} &= \int \frac{1}{r} |\Psi_{nlm}|^2 d^3r \\ &= \int_0^\infty \frac{1}{r} [u_{nl}(r)]^2 dr \\ &= \dots \\ &= \frac{1}{n^2 a}\end{aligned} \left. \begin{array}{l} \Rightarrow \text{Orbitlens} \\ \text{utstrekning:} \\ \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm}^{-1} = n^2 a \\ = \frac{n^2}{Z} \frac{m_e}{\mu} a_0 \end{array} \right\} \text{Dvs: Øker kraftig med } n$$



Utvælgsregler, nivå-skjema og strålingsoverganger

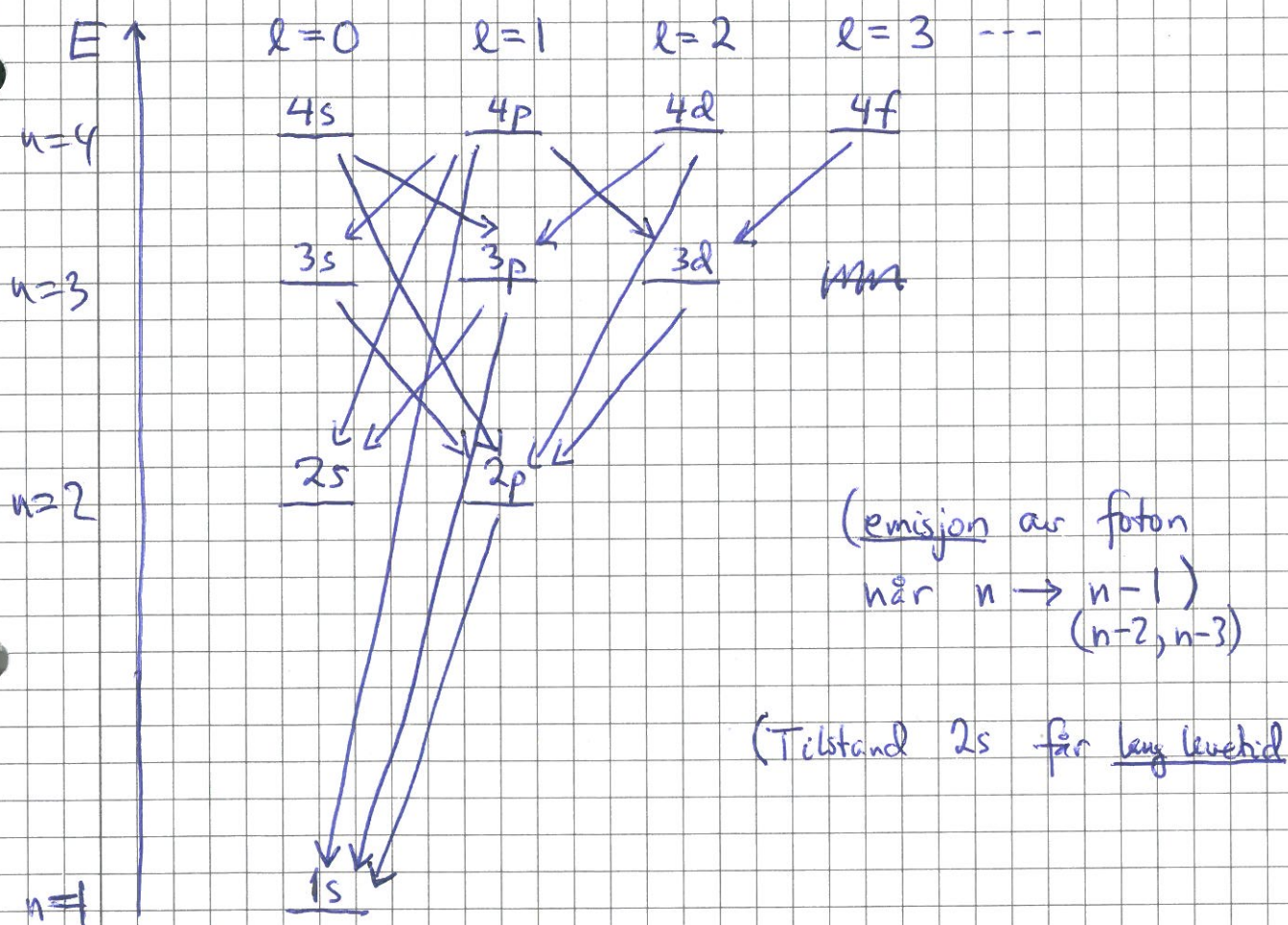
Overgang av elektron fra tilstand  $(nlm)$  til  $(n'l'm')$  hvis

$$\Delta l = \pm 1 \quad ; \quad \Delta m = 0, \pm 1$$

Utvælgsregler

[Henger sammen med dreieimpulsbevarelse og at absorbert/emittert foton har spinn (indre dreieimpuls) tilsvarende kvantetall lik 1.]

→ Nivå-skjema  $m$ /tillatte strålingsoverganger:



[Strålingsteori  $\Rightarrow$  Tillatte overganger dersom

"matriseelementet"  $\vec{r}_{fi} = \int \Psi_f^*(\vec{r}) \vec{r} \Psi_i(\vec{r}) d^3r$

er forskjellig fra null. Se FY2045, TFY4205,

PCH 12,16; IØ "16"]



# Atomer og molekyler [PCH 8,9; IØ 6]

D3G 5

(120)

## Identiske partikler, symmetri, Pauliprinsipp og spinn [6.1.1]

Partikler som elektroner er identiske: Ikke mulig å skjelne mellom to elektroner.

Konsekvens:  $|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2$

Dvs: Ingen fysisk konsekvens av å bytte "navn" (nummer) på to identiske partikler.

[1  $\hat{=}$  alle koordinater for elektron nr 1 ;

2  $\hat{=}$  ————— " ————— 2]

Dermed:  $\Psi(1,2) = e^{i\alpha} \Psi(2,1)$  (med reell  $\alpha$ )

Bosoner: Symmetrisk  $\Psi$  ved ombytte ( $1 \leftrightarrow 2$ )

$$\Rightarrow \Psi(1,2) = +\Psi(2,1)$$

Fermioner: Antisymmetrisk  $\Psi$  når  $1 \leftrightarrow 2$

$$\Rightarrow \Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$$

Elektroner (og protoner, nøytroner etc) er fermioner.

[Mulig med vilkårlig  $\alpha$  i 1D og 2D; anyoner!

Vist av Jon Magne Leinaas (UiO) og Jan Myrheim (NTNU)]



## Pauliprinsippet: [6.1.1.b]

(121)

- En direkte følge av antisymmetrikravet

$$\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$$

for fermioner.

Beweis:

Anta to fermioner uten innbyrdes v.v.:

$$\hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2)$$

$$\text{TUSL: } \hat{H} \Psi(1,2) = E \Psi(1,2)$$

Matematisk er produktform

$$\Psi(1,2) = \psi_i(1) \psi_j(2)$$

OK, med

$$\hat{H}(1) \psi_i(1) = E_i \psi_i(1), \quad \hat{H}(2) \psi_j(2) = E_j \psi_j(2)$$

$$E = E_i + E_j$$

$\psi_i(n)$  = en partikkel tilstand nr  $i$  for partikkel nr  $n$   
( $i = 1, 2, 3, \dots$ ;  $n = 1$  eller  $2$ )

Problem:

$$\psi_i(1) \psi_j(2) \neq -\psi_i(2) \psi_j(1), \quad \text{dvs } \Psi(1,2) \neq -\Psi(2,1),$$

dvs antisymmetrikravet er ikke oppfylt.



Løsning: Siden  $\psi_i(2)\psi_j(1)$  er like bra løsning

(matematisk!) som  $\psi_i(1)\psi_j(2)$ , og med samme energi  $E = E_i + E_j$ , kan vi godt bruke en linearkomb. av disse to, f.eks.

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_i(1)\psi_j(2) - \psi_i(2)\psi_j(1) \}$$

Nå er

$$\psi_A(2,1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_i(2)\psi_j(1) - \psi_i(1)\psi_j(2) \} = -\psi_A(1,2)$$

som var kravet ved ombytte av to identiske fermioner!

Tilsvarende (Omvendt!) for to bosoner:

$$\psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_i(1)\psi_j(2) + \psi_i(2)\psi_j(1) \} = \psi_S(2,1),$$

dvs symmetikravet oppfylt ved ombytte av to identiske bosoner!

Anta nå at de to fermionene befinner seg i samme enpartikkeltilstand, dvs at  $i = j$ .

Da blir  $\psi_A(1,2) = 0$  ! Dette er Pauliprinsippet:

To fermioner kan ikke være i samme enpartikkeltilstand.



# Generalisering til system med $N$ fermioner:

Vi ser at vi kan skrive  $\Psi_A(1,2)$  som en determinant:

$$\Psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_i(1) & \psi_i(2) \\ \psi_j(1) & \psi_j(2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_i(1)\psi_j(2) - \psi_i(2)\psi_j(1) \}$$

Med  $N$  enpartikkeltilstander  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_N$  kan en  $N$ -partikkeltilstand med riktig antisymmetri skrives som en såkalt Slater-determinant

(John C. Slater, 1929):

$$\Psi_A(1,2,3,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \dots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \dots & \psi_2(N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix}$$

- Ombytte av to partikkel-koordinater, f.eks.  $1 \leftrightarrow 2$ , tilsværer ombytte av to kolonner, som gir fortegnsskifte:

$$\Psi_A(1,2,\dots,N) = -\Psi_A(2,1,\dots,N). \text{ Antisymm.kravet oppfylt!}$$

- To identiske enpartikkeltilstander, f.eks.  $\psi_1 = \psi_2$ , gir to identiske rader, som gir verdi null for determinanten:

Dette er Pauliprinsippet: Ikke to fermioner i samme enpartikkeltilstand!



## Spinne [6.1.1.c]

(124)

- Jorda har banedreieimpuls  $\vec{L}$ , rektet til banebewegelsen rundt sola, og "indre dreieimpuls" ("spin"),  $\vec{S}$ , rektet til klodens rotasjon om sin egen N-S-akse.

Her er både  $\vec{L}$  og  $\vec{S}$  et resultat av masse i bevegelse i rommet, dvs  $\sum_i \vec{r}_i \times m_i \vec{v}_i$ .

Elementærpartikler har også (spin) (indre dreieimpuls)  $\vec{S}$ , med lignende egenskaper som  $\vec{L}$ .

Men: For elektroner, protoner, nøytroner etc., er spinn  $\vec{S}$  ikke et resultat av masse i rotasjon om en akse.

Mer om spin i FY2045.

- Her, kan noen "facts" om elektronspinn:

- Kvantetall  $s$  og  $m_s$  (i stedet for  $l$  og  $m$ ), med  $s = 1/2$ , og  $m_s = +1/2$  eller  $m_s = -1/2$

- Egenverdi for  $\vec{S}^2$ :  $s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$

- — " —  $S_z$ :  $m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$

- Egentilstander:  $\chi_{m_s}$ ;  $m_s = \pm 1/2$

- Ortonormering:  $\langle \chi_{m_s}, \chi_{m'_s} \rangle = \delta_{m_s, m'_s}$