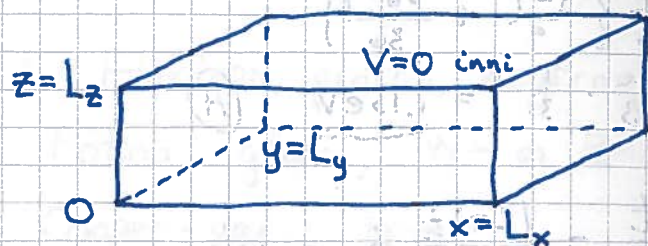


Partikkel i boks. Pauliprinsipp. Tilstandstetthet

[PCH 5.2]



$V = \infty$ utenfor

TUSL separerer og gir produktløsninger

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \frac{2^{3/2}}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

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

Kubisk boks, $L_x = L_y = L_z = L$, gir degenerasjon:

$$E_1 = E_{111} = 3\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 ; g_1 = 1$$

$$E_2 = E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 ; g_2 = 3 \text{ osv.}$$

Anvendelse: Ideelle gasser (dvs ikke-vekselvirkende partikler); enkleste modell for elektroner i faste stoffer (krystaller). Her er riktignok potensialet periodisk, $V(\vec{r} + \vec{R}_j) = V(\vec{r})$, med \vec{R}_j en gittervektor, men siden løsningene av TUSL med et periodisk potensial er Bloch-tilstander (jf. numensk øving),

$$\Psi(\vec{r}) = u(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} ; u(\vec{r} + \vec{R}_j) = u(\vec{r}),$$

dvs "nesten" plane bølger, er det et rimelig bra utgangspunkt å betrakte elektronene i en (perfekt) krystall som frie elektroner (med effektiv masse m^*).

Pauliprinsippet:

Partikler er enten fermioner eller bosoner.

Fermioner: Elektron, proton, nøytron, ...

Bosoner: Foton, gluon, W- og Z-boson, Higgs-boson, Cooper-par, fonon, ...

Fermioner har halvtallig spinn ($\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$).

Bosoner har heltallig spinn ($0, 1, \dots$).

Pauliprinsippet slår fast at to (eller flere) fermioner ikke kan okkupere en og samme kvantemekaniske enpartikkeltilstand.

Gjelder ikke for bosoner, som kan okkupere samme enpartikkeltilstand. Ved tilstrekkelig lav temperatur kan mange (\approx alle!) bosoner okkupere grunntilstanden (dvs tilstanden med lavest mulig energi). Fenomenet kalles Bose-Einstein-kondensasjon.

Spinn:

"En slags" indre dreieimpuls, \vec{S} , som kommer i tillegg til partikkelens dreieimpuls, \vec{L} .

Elektronet: $S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar$, med spinn-krantall $s = 1/2$. En måling av en komponent av \vec{S} , f.eks. S_z ved hjelp av et magnetfelt $\vec{B} = B \hat{z}$, gir enten $S_z = +\hbar/2$ eller $S_z = -\hbar/2$.

Dvs: $S_z = m_s \hbar$, med kvantetall $m_s = \pm 1/2$.

Hver romlige tilstand $\psi(\vec{r})$ ("orbital") kan altså kombineres med to mulige spinntilstander χ_+ og χ_- , noe som gir to distinkte enpartikkel-
tilstander

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

for hver orbital $\psi(\vec{r})$.

Pauliprinsippet tillater dermed inntil 2 elektroner i hver orbital $\psi(\vec{r})$, et med "spinn opp" (χ_+) og et med "spinn ned" (χ_-). Symbolisk:



Tilstandstetthet: [PCH 5.2.2]

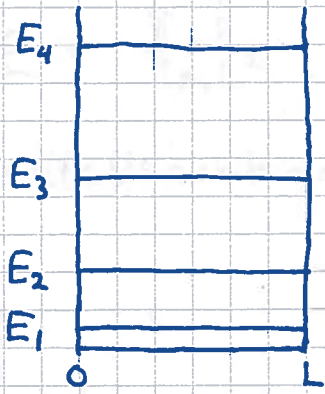
Engelsk: Density of states (DOS)

En makroskopisk krystall har så store L_x, L_y, L_z at energisppekteret blir kontinuerlig.

Systemets grunntilstand tilsvarer at elektronene okkuperer tilstander med lavest mulig energi, i tråd med Pauliprinsippet.

Med kontinuerlig spektrum er det naturlig å innføre tettheten av tilstander $g(E) = dN/dE$, der dN er antall tilstander på intervallet $(E, E + dE)$.

1D, "boks" med lengde L



Vi ser at $g_1(E)$ øker med økende E .

Stor L gir tettliggende nivåer.
Antall orbitaler med energi mindre enn en gitt E :

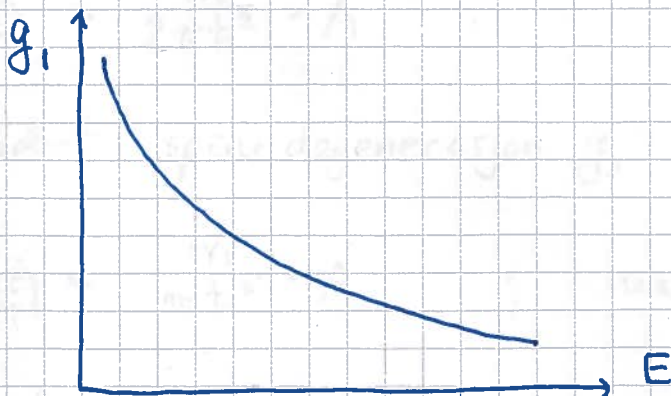
$$N_1(E) = \sqrt{\frac{2mL^2 E}{\pi^2 \hbar^2}} \quad (\text{sidan } E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2})$$

Tettheten av orbitaler blir da

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

Og med 2 spinmuligheter pr orbital blir total tilstandstetthet i én dimensjon:

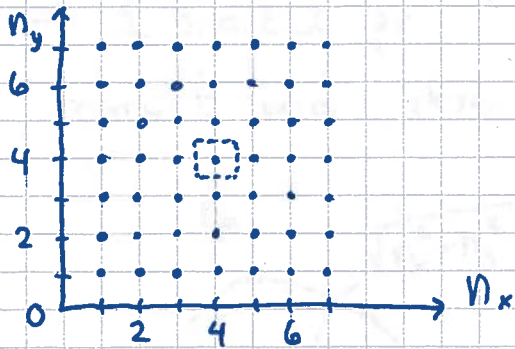
$$g_1(E) = \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/2} L E^{-1/2}$$



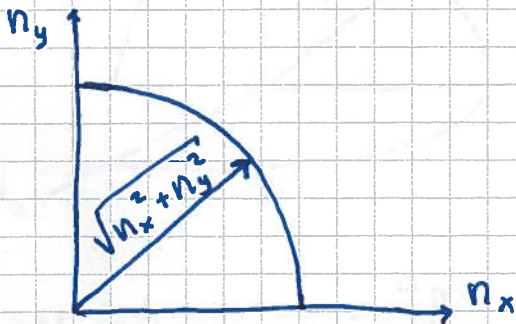
2D, flate med areal $A = L^2$

(99)

$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2) \Rightarrow$ 1 orbital for hver positive heltalls-kombinasjon av n_x og n_y



\Rightarrow 1 orbital pr "areal" 1 i positivt kvadrant i rommet med akser n_x og n_y



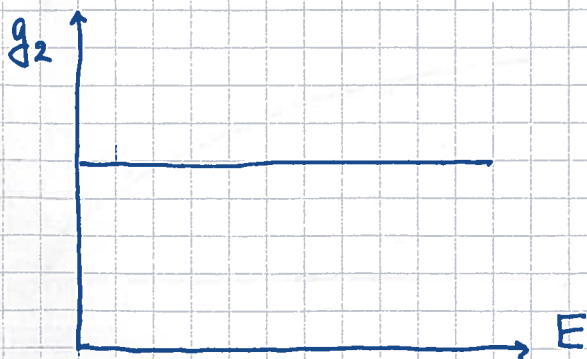
Arealet $\frac{1}{4} \pi (n_x^2 + n_y^2)$ tilsvarer antall orbitaler med energi mindre enn E

$$N_2(E) = \frac{1}{4} \pi \cdot \frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot E$$

$$\Rightarrow \frac{dN_2}{dE} = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \cdot A$$

Inkludert spindegenerasjon $g_s = 2$:

$$g_2(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot A \quad ; \quad \text{uavhengig av } E$$



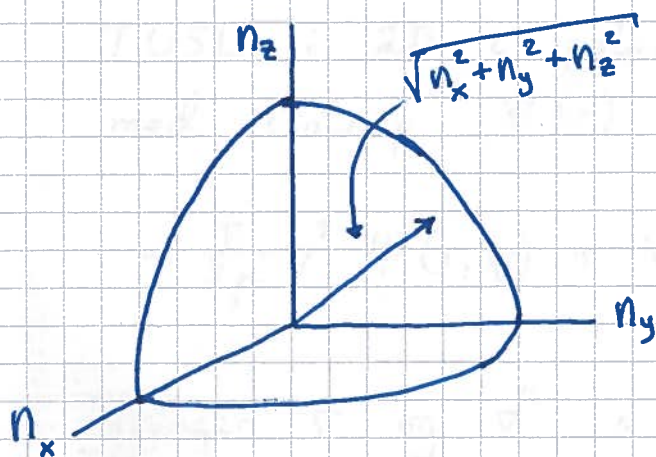
3D, kubisk boks, $V = L^3$

(100)

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \Rightarrow 1 \text{ orbital pr}$$

positive heltallskombinasjon av n_x , n_y og n_z

\Rightarrow 1 orbital pr "volum" 1 i positiv oktant i rommet med akser n_x , n_y og n_z



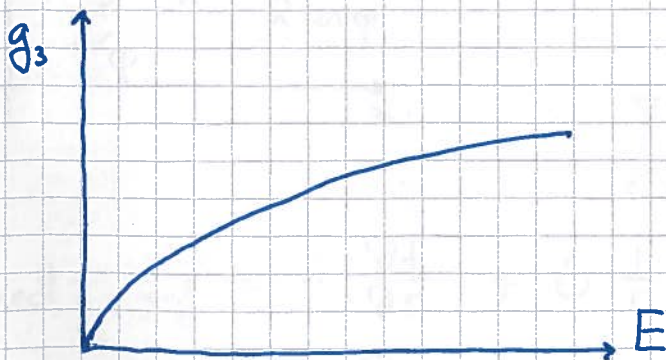
\Downarrow
Volumet $\frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2}$
tilsvareer antall orbitaler
med energi mindre enn E

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

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

Inkl. spinndeg. $g_s = 2$:

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



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

(101)

Et 3D system med $L_x, L_y \gg L_z$ og $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu L_z^2} \gg k_B T$ (μ = partikkelens masse) er effektivt et 2D system: Partikkelens kinetiske energi knyttet til z -retningen er grunntilstandsenergien $\pi^2 \hbar^2 / 2\mu L_z^2$, en "uinteressant konstant".

TUSL i 2D i polarkoordinater (naturlig valg med isotrop $V(r)$):

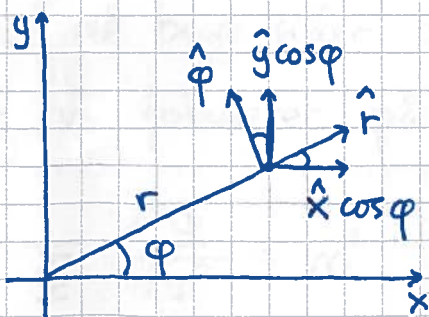
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi(r, \varphi) + V(r) \Psi(r, \varphi) = E \Psi(r, \varphi)$$

Trenger ∇ og ∇^2 i polarkoordinater:

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

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

Utrekning:



$$df = \frac{\partial f}{\partial r} dr + \frac{\partial f}{\partial \varphi} d\varphi$$

og

$$df = \nabla f \cdot d\vec{r}$$

med

$$\nabla f = \hat{r} (\nabla f)_r + \hat{\varphi} (\nabla f)_\varphi$$

$$d\vec{r} = \hat{r} dr + \hat{\varphi} r d\varphi$$

$$\text{Dermed: } \nabla f = \hat{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \varphi}$$

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

Fra figuren ser vi:

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

$$\Rightarrow \frac{\partial \hat{r}}{\partial r} = \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial r} = 0 ; \quad \frac{\partial \hat{r}}{\partial \varphi} = -\hat{x} \sin \varphi + \hat{y} \cos \varphi = \hat{\varphi} ;$$

$$\frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} = -\hat{x} \cos \varphi - \hat{y} \sin \varphi = -\hat{r}$$

Dermed:

$$\underline{\underline{\nabla^2}} = \nabla \cdot \nabla = \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \cdot \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$= \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \underbrace{\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}}_{=0} + \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$= \underline{\underline{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}}}$$

Vi prøver $\Psi(r, \varphi) = R(r) \cdot \Phi(\varphi)$; multipliserer TUSL

med $-2\mu r^2/\hbar^2 \Psi$, og får:

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

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

og vi fokuserer på "vinkelfunksjonen" $\Phi(\varphi)$:

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = m^2 \Rightarrow \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0$$

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

Krav om entydig løsning, $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$, gir

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

Vi må selvsagt kjenne $V(r)$ for å bestemme radialfunksjonen(e) $R(r)$ og energieigenverdiene E .

I to dimensjoner har dreieimpulsen \vec{L} bare en komponent, her L_z :

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

Ifølge operatorpostulatet er da operatoren til L_z :

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

som blir enkel i polarkoordinater:

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

$$\begin{aligned}\frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{x}{r}, & \frac{\partial r}{\partial y} &= \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{y}{r} = \sin \varphi \\ &= \cos \varphi\end{aligned}$$

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

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

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

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

Da innser vi at $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$ er egenfunksjoner til \hat{L}_z , med tilhørende egenverdier $m\hbar$:

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

Dvs:

En partikkel som befinner seg i et 2D isotropt potensial $V(x,y) = V(r)$ har kvantisert dreiemoment $L_z = m\hbar$; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Kommentar: Også $\Psi_m(r,\varphi) = R(r)\Phi_m(\varphi) = R(r)e^{im\varphi}$ er selvsagt egenfunkt. til \hat{L}_z , siden $\hat{L}_z \Psi_m = R \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{im\varphi} = m\hbar \Psi_m$

Med andre ord: Her har \hat{H} og \hat{L}_z felles egenfunksjoner $\Psi_m(r,\varphi) = R(r) \cdot e^{im\varphi}$

Kompatible størrelser og felles egenfunksjoner

[PCH 4.1 ; D&G 3.5 ; IØ 4.1]

A og B er kompatible hvis vi kan ha $\Delta A = 0$ og $\Delta B = 0$ samtidig.

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

Hvis $\Delta A = 0$ og $\Delta B = 0$, er partikkelen i følge målepostulatet i en stasjonær tilstand ψ som er egenfunksjon til både \hat{A} og \hat{B} ,

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

Med andre ord: ψ er felles ("simultan") egenfunksjon til \hat{A} og \hat{B}

Dvs: Hvis A og B har operatorer \hat{A} og \hat{B} som kommuterer, er det mulig å finne felles egenfunksjoner til \hat{A} og \hat{B} .

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

$\psi(r, \varphi) = R(r)e^{im\varphi}$ er felles egenf. til \hat{H} og \hat{L}_z

Da er $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$, og vi kan ha

$$\Delta E = \Delta L_z = 0 \quad \text{samtidig}$$

Symmetri og paritet [PCH 4.2; IØ 4.2]

(106)

Paritetsoperatoren \hat{P} speiler en funksjon gjennom origo:

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

$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ i ulike koordinatsystem:

1D: $x \rightarrow -x$

2D: $x, y \rightarrow -x, -y$

$r, \varphi \rightarrow r, \varphi + \pi$ (polarkoord.)

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

$r, \theta, \varphi \rightarrow r, \pi - \theta, \varphi + \pi$ (kulekoord.)

$\rho, \varphi, z \rightarrow \rho, \varphi + \pi, -z$ (sylinderkoord.)

Like paritet: $\Psi(-\vec{r}) = \Psi(\vec{r})$

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

Odde paritet: $\Psi(-\vec{r}) = -\Psi(\vec{r})$

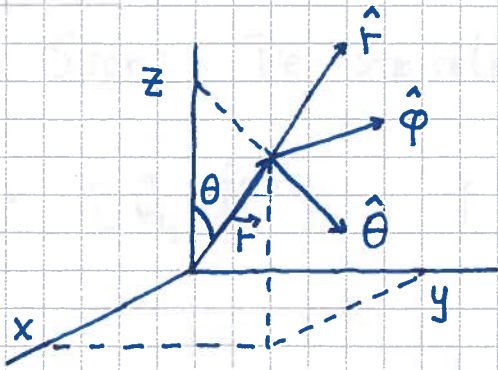
$$\Rightarrow \hat{P}\Psi(\vec{r}) = -\Psi(\vec{r})$$

Vi ser at alle funksjoner med en bestemt paritet, dvs når $\Psi(-\vec{r}) = \pm \Psi(\vec{r})$, er egenfunksjoner til \hat{P} , med egenverdier $p = \pm 1$.

Eks: 2D isotrop $V(r)$; $\Psi(r, \varphi + \pi) = R(r) \cdot e^{im(\varphi + \pi)} =$
 $= \Psi(r, \varphi) \cdot (-1)^m$; dvs like paritet for $m = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$
og odde paritet for $m = \pm 1, \pm 3, \dots \Rightarrow \hat{P}\Psi_m = (-1)^m \Psi_m$

Dreieimpuls i 3D [PCH 5.4; DFG 4.3; IØ 5.2] (107)

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



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

$$d\vec{s} = \hat{r} dr + \hat{\theta} r d\theta + \hat{\phi} r \sin\theta d\phi$$

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

$$\hat{r} \times \hat{r} = 0, \quad \hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\phi}, \quad \hat{r} \times \hat{\phi} = -\hat{\theta}$$

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

som med (se f.eks. s. 87, 2018)

$$\hat{\phi} = -\hat{x} \sin\phi + \hat{y} \cos\phi; \quad \hat{\theta} = \hat{x} \cos\phi \cos\theta + \hat{y} \sin\phi \cos\theta - \hat{z} \sin\theta$$

gir kartesiske komponenter

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

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

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (\text{som vi visste fra før; s. 103})$$

Med produktregel og kjernerregel for derivasjon (se s. 95, 2016):

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

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

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

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

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

Hva er nå, med isotrop $V(r)$, kompatible størrelser? Dus, hvilke størrelser kan ha skarpe verdier samtidig?

Svar: De størrelsene som har kommuterende operatører.

$$\begin{aligned} \bullet \quad [\hat{H}, \hat{L}^2] &= \underbrace{[\hat{K}_r + V(r), \hat{L}^2]}_{\text{kun } r} + \underbrace{[\hat{K}_L, \hat{L}^2]}_{\text{kun } \theta, \varphi} \\ &\sim [\hat{L}^2, \hat{L}^2] \\ &= 0 \end{aligned}$$

$\Rightarrow E$ og L^2 (og dermed $L = |\vec{L}|$) kan måles skarpt samtidig (og L^2 er en bevegelseskonstant)

$$\begin{aligned} \bullet \quad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= -\hbar^2 \left[y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right] \\ [y \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial z}] &= 0; \quad [z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x}] = 0 \\ [y \frac{\partial}{\partial z}, z \frac{\partial}{\partial x}] f &= y \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial x} f - z \frac{\partial}{\partial x} y \frac{\partial}{\partial z} f = y \frac{\partial}{\partial x} f \\ [z \frac{\partial}{\partial y}, x \frac{\partial}{\partial z}] f &= z \frac{\partial}{\partial y} x \frac{\partial}{\partial z} f - x \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial y} f = -x \frac{\partial}{\partial y} f \end{aligned}$$

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

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

\Rightarrow Bare en komponent av \vec{L} kan være skarp på et gitt tidspunkt. \vec{L} kan ikke måles skarpt!

(Med mindre $L=0$)

- Hva med L^2 og en komponent L_j ($j = x, y, z$)? (109)

Vi regner ut $[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x]$:

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

$$[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] = \hat{L}_y \hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_y \hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_x \hat{L}_y \hat{L}_y$$

$$= \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x] \hat{L}_y$$

$$= \hat{L}_y (-i\hbar) \hat{L}_z + (-i\hbar) \hat{L}_z \hat{L}_y$$

$$[\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = \dots \text{ med tilsvarende "triks" } \dots$$

$$= \hat{L}_z i\hbar \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z$$

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

På tilsvarende vis finnes: $[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0$; $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$

Konklusjon: L^2 (evt. L) og en av komponentene L_j kan måles skarpt samtidig

- $[\hat{H}, \hat{L}_j] = [\hat{K}_r + \hat{K}_L + V(r), \hat{L}_j] = 0$

$\Rightarrow E$ og L_j kan måles skarpt samtidig

(og L_x, L_y og L_z er bevegelseskonstanter)

Oppsummering:

Med isotrop $V(r)$ kan E, L^2 (dvs L) og en komponent av \vec{L} , f.eks. L_z , være skarpe samtidig.

Da er det mulig å finne felles egenfunksjoner for \hat{H}, \hat{L}^2 og \hat{L}_z

Egenfunksjoner og egenverdier til \hat{L}^2 og \hat{L}_z

(110)

Fra før: $\hat{L}_z \Phi(\varphi) = L_z \Phi(\varphi)$ med

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}; \quad L_z^m = m\hbar; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Produktløsninger $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi) = \Theta(\theta) \cdot e^{im\varphi}$
(og forsåvidt også $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$) er nå egenfunksjoner til både \hat{L}_z og \hat{L}^2 :

$$\hat{L}_z Y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Theta(\theta) e^{im\varphi} = m\hbar Y$$

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Theta(\theta) e^{im\varphi} \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) Y \end{aligned}$$

Skriver nå $\hat{L}^2 Y = L^2 Y$ med $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, der l er en konstant. Diff.lign. for Θ blir, for gitt m :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right\} \Theta = 0$$

Forenkles ved å substituere $x = \cos \theta$; da er $dx = -\sin \theta d\theta = -\sqrt{1-x^2} d\theta$:

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta} \frac{d\Theta}{dx} = -\sqrt{1-x^2} \cdot \Theta'; \quad \Theta' = \frac{d\Theta}{dx}$$

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = \frac{dx}{d\theta} \frac{d}{dx} \left(-\sqrt{1-x^2} \cdot \Theta' \right) = (1-x^2) \Theta'' - x \Theta'$$

$$\Rightarrow (1-x^2) \Theta'' - 2x \Theta' - \frac{m^2}{1-x^2} \Theta + l(l+1) \Theta = 0$$

$m=0$: Legendres diff. ligning

(111)

$$(1-x^2) \Theta'' - 2x \Theta' + l(l+1) \Theta = 0$$

Prøver $\Theta(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ (jf harmonisk oscillator)

$$\Rightarrow \frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{n(n+1) - l(l+1)}{(n+1)(n+2)}$$

For store n er $a_{n+2}/a_n \approx n/(n+2)$ slik at

$$\Theta(x) \approx \sum_n \frac{1}{n} x^n$$

Som divergerer når $|x| = 1$ (dvs $\theta = 0$ ~~),~~
med mindre rekke brytes av.

Dvs: $l = 0, 1, 2, \dots$

Med normering slik at $P_l(1) = 1$ er løsningene Legendrepolynomene

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \dots$$

som kan genereres med f.eks. Rodrigues' formel

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

Egenfunksjonene $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ kalles sfæriske harmoniske:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi) = \Theta_{lm}(\theta) e^{im\varphi}$$

Med $m=0$:

$$Y_{l0} = \Theta_{l0}(\theta)$$

der

$$\Theta_{00} \sim 1, \Theta_{10} \sim \cos \theta, \Theta_{20} \sim 3 \cos^2 \theta - 1, \dots$$

$m \neq 0$: Se IØ Tillegg 5, s. 44-45 for detaljer

(112)

Diff.lign for Θ inneholder $m^2 \Rightarrow \Theta_{lm} = \Theta_{l-m}$

\Rightarrow Nok å se på $m > 0$

Fysisk akseptable løsninger er assosierte Legendre-funksjoner

$P_l^m(x)$ med $x = \cos \theta$. Genereres fra $P_l(x)$:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad ; \quad (1-x^2)^{m/2} = \sin^m \theta$$

Dermed: $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) e^{im\varphi}$

$$\Theta_{lm} \sim P_l^m$$

Må selvsagt ha $|m| \leq l$ fordi $|L_z| \leq |L^2|$,

dvs $|m\hbar| \leq \sqrt{l(l+1)}\hbar$.

Dvs: $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

Ortonormering:

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\Omega = \delta_{ll'} \cdot \delta_{mm'} \quad ; \quad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$$

Paritet:

$$Y_{lm} \sim P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$$\sim \sin^{|m|} \theta \cdot (\text{polynom av grad } l-|m| \text{ i } \cos \theta) \cdot e^{im\varphi}$$

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \Rightarrow r, \theta, \varphi \rightarrow r, \pi - \theta, \varphi + \pi$$

$$\Rightarrow \cos \theta \rightarrow \cos(\pi - \theta) = -\cos \theta$$

$$\sin \theta \rightarrow \sin(\pi - \theta) = \sin \theta$$

$$\Rightarrow P_l^{|m|}(\cos \theta) \rightarrow (-1)^{l-|m|} \cdot P_l^{|m|}(\cos \theta)$$

Fra før: $e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^{|m|} e^{im\varphi}$

$\Rightarrow Y_{lm} \rightarrow (-1)^{l-|m|+|m|} Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}$

$\Rightarrow \hat{P} Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}$

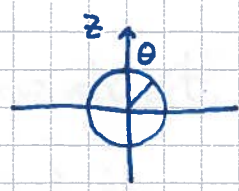
$l = 0, 1, 2, \dots$
 $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

Polardiagram:

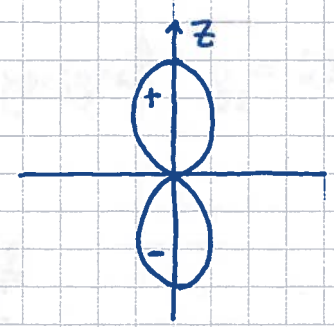
Tegner en kurve med afstand til origo som angir $|Y_{lm}|^2$ (evt. $|Y_{lm}|$) i retning θ . ($|Y_{lm}|$ varh. av φ)

Eks:

$Y_{00} \sim 1, |Y_{00}|^2 \sim 1$

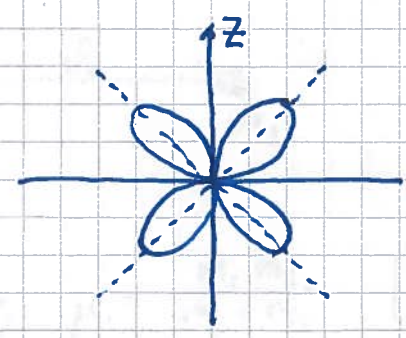


$Y_{10} \sim \cos \theta, |Y_{10}|^2 \sim \cos^2 \theta$



$Y_{2,\pm 1} \sim \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$

$|Y_{21}|^2 \sim \sin^2 \theta \cos^2 \theta \sim \sin^2 2\theta$



(Kan lage flader ved å rotere kurvene om z-aksen.)

Terminologi (fra spektroskopi på 800-tallet):

l	0	1	2	3	4	5	...
bokstaver	s	p	d	f	g	h	...

(sharp, principal, diffuse, fundamental)

Stiv rotator [PCH 5.5; DFG Problem (4.25); IØ 5.3] (14)

Klassisk rotasjonsenergi for stivt legeme:

$$K = \frac{1}{2} I \omega^2 ; \quad I = \text{tregghetsmoment mhp rotasjonsaksen}$$

Dreieimpuls ved ren rotasjon: $\vec{L} = I \vec{\omega}$

$$\text{Dermed: } L^2 = I^2 \omega^2 \Rightarrow K = L^2 / 2I$$

$$\text{Kvantisering: } K \rightarrow \hat{K} = \frac{1}{2I} \hat{L}^2$$

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots ; \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell$$

Dus: Rotasjonsenergien er kvantisert,

$$K_{\ell} = \hbar^2 \ell(\ell+1) / 2I, \quad \text{med degenerasjonsgrad } g_{\ell} = 2\ell + 1$$

Splitting mellom to nabonivåer:

$$\Delta K_{\ell} = K_{\ell} - K_{\ell-1} = \frac{\hbar^2}{2I} \{ \ell^2 + \ell - (\ell^2 - \ell) \} = \frac{\hbar^2 \ell}{I}$$

Eks: Toatomige molekyler



Mhp akser gjennom massesenteret:

$$I_z = 0 ; \quad I_x = I_y = I = \mu \cdot d^2 ; \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \left[\text{Se s. 94} \right. \\ \left. 2018 \right]$$

$$\text{Tallverdier: } m_{1,2} \sim 1u - 50u \Rightarrow \mu \sim 0.5u - 25u$$

$$d \sim 1 - 2 \text{ \AA}$$

$$\Rightarrow \Delta K_{\ell} = \hbar^2 / I \lesssim 15 \text{ meV} < k_B T \approx 25 \text{ meV ved } 300 \text{ K}$$

\Rightarrow De to rotasjonsfrihetsgradene oppfyller typisk ekvipartisjonspriippet og bidrar med $2 \cdot \frac{1}{2} k_B$ til C_V pr molekyl.