

PC HEMMER

Kvantemekanikk

5. utgave

 tapir akademisk forlag

Forord

Kvantemekanikk er fundamentet for mange av fysikkens mest aktive områder, som atom- og molekyl-fysikk, faste stoffers fysikk, partikkelfysikk, kjernefysikk, astrofysikk, og for kjemi og molekylær biologi. Også instrumentelle teknikker, som bruk av laser, magnetisk resonans og nye mikroskopimetoder, er basert på kvantemekanisk innsikt.

Første del av denne boka er lagt opp som et innføringskurs i ikke-relativistisk kvantemekanikk, mens den siste delen passer for videregående kurs. Deler som det er naturlig å hoppe over i første omgang er merket med *.

Jeg er takknemlig for nyttige innspill fra kolleger i Trondheim, og for tilbakemeldinger fra skarer av studenter.

Forord til 5. utgave

I denne utgaven er kapittel 10 om periodiske potensialer vesentlig omarbeidet og forenklet. For den anomale Zeeman-effekten er vist sammenhengen mellom effektene for svake og for sterke magnetfelt. Forøvrig er det mindre endringer. Noen nye øvingsoppgaver er kommet til, og antall trykkfeil er vesentlig redusert.

Trondheim, januar 2005

P. C. Hemmer

Innhold

1	INNLEDNING TIL KVANTEMEKANIKKEN	9
1.1	Varmekapasiteten for toatomige gasser	10
1.2	Plancks strålingslov	10
1.3	Den fotoelektriske effekt	12
1.4	Compton-effekten	14
1.5	Diffraksjon av elektroner	14
1.6	Bølgepakkebeskrivelse av en fri partikkel	15
1.7	Tydning av bølgefunksjonen. Dobbeltpaltpforsøk	17
1.8	Schrödingerlikningen for partikkel i felt	19
2	FUNDAMENTALE PRINSIPPER	21
2.1	Grunnprinsippene	21
2.2	Hermiteiske operatorer	23
2.3	Stasjonære tilstander	26
2.4	Egenfunksjoner og egenverdier	27
2.4.1	Spektret til en operator	27
2.4.2	Egenverdier som måleresultater	28
2.4.3	Ortogonalitet	28
2.4.4	Normering i det kontinuerlige spektret	30
2.5	Utvikling etter egenfunksjoner	31
2.5.1	Fullstendighet	31
2.5.2	Den fysiske tydning av utviklingskoeffisientene	33
2.6	Bevarelse av sannsynlighet	35
2.6.1	Sannsynlighetsstrømtettheten	35
2.6.2	Strømtetthet i magnetfelt*	37
3	ENDIMENSJONALE POTENSIALER	39
3.1	Generelle egenskaper ved bølgefunksjonen	39
3.1.1	Grensebetingelser	39
3.1.2	Bølgefunksjonens krumning	40
3.1.3	Ingen degenerasjon i én dimensjon	41
3.2	En uendelig dyp potensialbrønn	42

3.3	En endelig potensialbrønn	44
3.4	Deltafunksjon-potensialet	49
3.5	Endimensjonal harmonisk oscillator	51
3.5.1	Egenverdilikningen	51
3.5.2	Energinivåene	52
3.5.3	Hermite-polynomene	54
3.5.4	Egenfunksjonene	57
3.5.5	Sammenlikning med en klassisk oscillator	58
3.6	Spredning i én dimensjon	59
3.6.1	Planbølgeløsninger	60
3.6.2	Spredning på potensialbrønn	61
3.6.3	Spredning på potensialbarriere	64
3.6.4	Anvendelser av tunnelering	64
4	VIKTIGE KVANTEMEKANISKE TEOREMER	69
4.1	Simultane egenfunksjoner	69
4.2	Paritet	71
4.2.1	Paritetsoperatoren og dens egenverdier	71
4.2.2	Paritetsinvarians	72
4.3	Tidsutvikling av forventningsverdier	73
4.4	Ehrenfests teorem	74
4.5	Uskarpetsrelasjoner	76
4.6	Bølgemekanikk i impulsrommet*	79
5	TREDIMENSJONALE POTENSIALER	83
5.1	Den tredimensjonale harmoniske oscillator	83
5.2	Partikkel i boks	85
5.2.1	Energinivåer	85
5.2.2	Tilstandstettheten	85
5.2.3	Periodiske grensevilkår*	86
5.3	Todimensjonale potensialer	88
5.4	Dreieimpuls	89
5.4.1	Dreieimpulsoperatorer	89
5.4.2	Kommuteringsregler	90
5.4.3	Dreieimpuls i kulekoordinater	91
5.4.4	Egenfunksjoner for L_z og $\tilde{L}^2$	92
5.4.5	Legendrepolynomene	93
5.4.6	Kuleflatefunksjoner	95
5.4.7	Oppsummering	98
5.5	Romlig rotator	99
5.6	Sentralsymmetriske potensialer	100
5.6.1	Radiallikningen	100
5.6.2	Paritet og degenerasjon	102

5.7	Coulombpotensialet	103
5.7.1	Energinivåene	103
5.7.2	Degenerasjonsgraden	106
5.7.3	Bølgefunksjonene	106
5.7.4	Radialfunksjonen uttrykt ved et Laguerrepolynom*	108
5.8	Topartikkelsystemer	110
5.9	Hydrogen-liknende systemer	112
5.9.1	Hydrogen	112
5.9.2	Andre Coulombsystemer	112
6	GENERELL FORMULERING AV KVANTEMEKANIKK	117
6.1	Diracs bra-ket notasjon	117
6.2	Fullstendighet	118
6.3	Operatorer og egenvektorer	120
6.3.1	Adjungert operator	120
6.3.2	Egenvektorer	121
6.4	Aksiomene i generell formulering	122
6.5	Ulike representasjoner	122
6.5.1	Posisjonsrepresentasjonen	122
6.5.2	Impulsrepresentasjonen	126
6.5.3	Matrisemekanikk	127
6.6	Harmonisk oscillator	129
6.6.1	Heve- og senke-operatorer	129
6.6.2	Energispektret	131
6.6.3	Egenvektorene	132
6.6.4	Bølgefunksjonene i posisjonsrommet	134
6.6.5	Matriserepresentasjon	136
6.6.6	Koherente tilstander	136
6.7	Heisenberg-bildet*	138
6.7.1	Tidsutviklingen	138
6.7.2	Schrödinger- og Heisenberg-bildene	139
7	TILNÆRMINGSMETODER FOR ENERGINIVÅER	143
7.1	Tidsuavhengig perturbasjonsteori	143
7.1.1	Perturbasjon av ikkedegenererte tilstander	144
7.1.2	Oppsummering	146
7.1.3	Eksempel: Relativistisk korreksjon til Coulombnivåene	147
7.2	Perturbasjon av et degenerert nivå	149
7.2.1	Stark-effekten i hydrogen	151
7.3	Variasjonsmetoden	154
7.3.1	Grunntilstanden	154
7.3.2	Eksempel: Triangulær brønn	155
7.3.3	Eksiterte tilstander	158

7.4	Born-Oppenheimer-metoden	158
7.4.1	Van der Waals-tiltrekning	159
7.5	WKB-approksimasjonen	162
7.5.1	WKB bølgefunksjoner	162
7.5.2	Kvantisering med harde vegger	164
7.5.3	Kvantisering med kontinuerlig potensial	165
7.5.4	Triangulær brønn	168
8	DREIEIMPULS, SPINN OG STATISTIKK	171
8.1	Dreieimpulsoperatorer	171
8.2	Eigenverdiene	172
8.2.1	Matriserepresentasjon av dreieimpulsoperatorer	174
8.3	Spinn	175
8.3.1	Eksistensen av spinn	175
8.3.2	Spinn- $\frac{1}{2}$ -tilstander	176
8.3.3	Magnetisk moment	178
8.3.4	Pauli-likningen	180
8.3.5	Larmor-presesjon	181
8.4	Addisjon av dreieimpulser	183
8.4.1	To spinn- $\frac{1}{2}$	183
8.4.2	Banedreieimpuls og spinn- $\frac{1}{2}$	186
8.4.3	Clebsch-Gordan koeffisienter	188
8.5	Identiske partikler	189
8.5.1	Spinn og symmetri	190
8.5.2	Pauliprinsippet	191
8.5.3	Statistikk-"krefter"	193
8.6	Systemer av ikke-vekselvirkende fermioner	195
8.6.1	Fritt-elektron-modellen	195
8.6.2	Nullpunktstrykk	196
9	ATOMER	199
9.1	Hydrogen	199
9.1.1	Finstruktur	200
9.1.2	Lambforskyving og hyperfinstruktur	203
9.2	Helium	204
9.3	Atomere med flere elektroner	208
9.3.1	Hartree-metoden	208
10	PERIODISKE POTENSIALER	213
10.1	Bloch-funksjoner	214
10.2	Kronig-Penney-modellen	216
10.3	Metall, isolator eller halvleder?	221

11	TIDSAVHENGIG PERTURBASJONSTEORI	225
11.1	Svake perturbasjoner	225
11.1.1	Differensiallikninger for tilstandskomponentene	225
11.1.2	Perturbasjonsutvikling	227
11.1.3	Detaljbalanse	228
11.1.4	Transiente perturbasjoner	229
11.2	Harmoniske perturbasjoner	229
11.2.1	Overgang til kontinuumstilstander	231
11.3	Anvendelse på spredning	233
12	HALVKLASSISK STRÅLINGSTEORI	235
12.1	Ladet partikkel i felt	235
12.1.1	Schrödinger-likningen	235
12.1.2	Justertransformasjoner av potensialene	236
12.2	Feltet som perturbasjon	237
12.2.1	Vekselvirkningsledd	237
12.2.2	Det elektromagnetiske feltet	239
12.3	Overganger mellom atomære tilstander	240
12.3.1	Stimulert emisjon =stimulert absorpsjon	241
12.3.2	Elektrisk-dipol-tilnærmelsen	242
12.4	Spontan emisjon via Einsteins likevektsargument	244
12.4.1	Likevektsargumentet	244
12.4.2	Levetid	246
12.5	Utvalgsregler for elektrisk-dipol-stråling	247
12.5.1	Utvalgsregler	247
12.5.2	Oscillatorstyrke. Summeregel	249
12.6	Fotoelektrisk effekt	250
12.6.1	Beregning av tverrsnittet	251
12.6.2	Diskusjon av tverrsnittet	254
13	SPREDNINGSTEORI	259
13.1	Spredningstverrsnitt	259
13.2	Klassisk spredningsteori	261
13.2.1	Klassisk spredningstverrsnitt	261
13.2.2	Eksempel: Harde kuler	263
13.2.3	Eksempel: Coulomb-potensialet	264
13.3	Spredning som stasjonært problem	266
13.4	Integrallikningen for spredningsamplituden	269
13.5	Born-approksimasjonen	272
13.5.1	Iterasjonsløsningen	272
13.5.2	Første Born-tilnærmelse	272
13.5.3	Totaltverrsnittet	274
13.5.4	Når er Born-approksimasjonen god?	274

13.5.5	Eksempel: Yukawa- og Coulomb-potensial	276
13.5.6	Elastisk spredning på atomer	277
13.6	Partialbølgemetoden	279
13.6.1	Spredningsamplituden	279
13.6.2	Totaltverrsnittet	283
13.6.3	Antall signifikante faser	284
13.6.4	Faseendringens fortegn. Ramsauer-Townsend-effekten.	285
13.6.5	Lavenergetisk spredning på hard-kule potensial	286
13.6.6	Resonansspredning	286
13.7	Det optiske teorem	287
13.8	Laboratorie- og tyngdepunkt-system	289
13.9	Spredning av identiske partikler	292
13.9.1	Spredning av spinn-0 partikler	293
13.9.2	Spredning av partikler med spinn	294
14	MAGNETFELT	297
14.1	Zeeman-effekten	297
14.1.1	Normal Zeeman-effekt	297
14.1.2	Anomal Zeeman-effekt	298
14.2	Landau-nivåer	304
14.2.1	Degenerasjon	305
14.2.2	Oscillasjon av Fermienergien	305
14.3	Aharonov-Bohm-effekten	308
14.4	Flukskvantisering i supraledere	310
15	THOMAS-FERMI-METODEN	313
15.1	Idéen	313
15.2	Atomer	314
15.2.1	Thomas-Fermi-likningen	314
15.2.2	Universalitet og skalering	318
15.2.3	Kvaliteten av approksimasjonen	318
15.2.4	Alternativ utledning	320
15.3	Ioner	321
15.4	Anvendelser av Thomas-Fermis atommodell	322
15.4.1	ℓ -verdiene i det periodiske system	322
15.4.2	Spredning av elektroner på tunge atomer	323
15.5	Thomas-Fermi-teori for skjerming	325
16	KVANTISERT STRÅLINGSTEORI	333
16.1	Kvantisering av strålingsfeltet	333
16.1.1	Klassisk Hamiltonfunksjon for feltet	333
16.1.2	Kvantisering	336
16.1.3	Intermeso: Casimir-effekten*	337

16.2	Koherente tilstander	343
16.2.1	Middelverdi og standardavvik	343
16.2.2	Poisson-fordeling av fotontallet	344
16.3	Fullt kvantisert strålingsteori	345
16.3.1	Spontan og stimulert emisjon	345
16.4	Spredning av fotoner på frie ladninger	349
16.4.1	Det differensielle spredningstverrsnitt.	349
16.4.2	Diskusjon av Thomson-tverrsnittet	352
16.5	Forbudte overganger	354
16.5.1	Høyere multipolooverganger	354
16.5.2	Bruk av vekselvirkningene H'_2 og H'_3	355
17	RELATIVISTISKE BØLGELIKNINGER	357
17.1	Klein-Gordon-likningen	357
17.1.1	Bølgelikningen	357
17.1.2	Partikkel i felt	358
17.1.3	Strøm- og sannsynlighetstetthet	361
17.2	Dirac-likningen	363
17.2.1	Dirac-likningen for en fri partikkel	363
17.2.2	Sannsynlighets- og sannsynlighetsstrømtettheter	366
17.2.3	Dirac-partiklers spinn og magnetiske moment	367
17.2.4	Planbølgeløsninger av Dirac-likningen	372

APPENDIX

A	Lagrange-Hamilton-mekanikk	377
B	Fourierintegral og Diracs δ-funksjon	383
C	Kvadratisk Starkeffekt i hydrogen	387
D	Grunntilstanden i helium	389
E	Eksakt beregning av Coulombspredning	391
	Fundamentale konstanter	tredje omslagsside
	STIKKORDREGISTER	395