

FY6019 Moderne fysikk

①

Kap. 37 - 44 i Young & Freedman (YF)

37 Relativitetsteori. Dekkes i FY6015.

38, 39 Partikkel-bølge-dualisme.

40 Kvantemekanikk. Schrödingerligningen.

41 Atomer.

42 Molekyler. Faste stoffer. Anvendelser.

43 Kjernefysikk. Radioaktivitet.

44 Partikkelfysikk.

Sannsynlig plan:

Samling 1 og 2: YF 38 - 41

Selvstudium: YF 42 - 43

Orienteringsstoff: YF 44

Vurderingsordning: 100% hjemmeeksamen

"Obligatoriske" øvinger

Kompetansemål VGS:

②

Bohrs atommodell

Spektrallinjer

Fotoelektrisk effekt

Compton - spredning

Partiklers bølgenatur

Heisenbergs uskarphetsrelasjon

Røntgen, ultralyd, magnetisk resonans

Fisjon, fusjon

Elementærpartikler.

Standardmodellen.

} YF44

Halvledere. Diode, transistor

} FY6018

Annen litteratur:

P.C. Hemmer

"Kvantemekanikk"

I. Øverbø

"Tillegg"

J.A.S.

Tarlenotater

} BB

Innledning til kvantemekanikk

(3)

[YF 38, 39 (37)]

Status, klassisk fysikk ca 1900 :

- Mekanikk. Newtons lover. Galileisk relativitet. [Galilei 1564-1642; Newton 1642-1727]
- Termodynamikk. Statistisk mekanikk. [W. Thomson (Lord Kelvin) 1824-1907; L. Boltzmann 1844-1906;]
- Elektromagnetisme. Maxwells ligninger. Lys er bølger. [Gauss, Ampere, Henry, Faraday, Hertz, Maxwell,]
- Atomer. Materie er partikler. Elektronet. "Rosinbollemodell". [J.J. Thomson 1856-1940, NP 1906]

NP : Nobelpris i fysikk, f.o.m. 1901

Problemer med klassisk fysikk, og teoretisk utvikling ca 1900-1923 : (4)

- Linjespektre : Absorpsjon og emisjon av EM stråling med bestemte bølgelengder.

Eksempler :

Na, $\lambda = 589 \text{ nm}$ (gult) [Melville 1752]

Mørke linjer i solspekteret (pga absorpsjon i atmosfæren) [Wollaston 1802 ; Fraunhofer 1814]

H, Balmerserien, 410, 434, 486 og 656 nm
(= Fraunhofers h, G', F og C)

J. Balmer 1885 : $\lambda = B \cdot \frac{n^2}{n^2 - 4}$; $n = 3, 4, 5, 6$;

$B = 364.5 \text{ nm}$

N. Bohr 1913, NP 1922 : Bohr-modellen
(mer om den senere)

- Lysfarten (i vakuum) er like stor i alle inertialsystemer, uansett deres relative bevegelse. Galileisk relativitet holder ikke for lys.

Exp: Michelson & Morley 1887

↑ NP 1907

Teori: A. Einstein 1905, Spesiell relativitetsteori (SR), litt mer om det senere.

- Stråling fra svart legeme:

EM stråling inn mot legeme absorberes, reflekteres og transmitteres, med andeler

$$a, r \text{ og } t \Rightarrow a + r + t = 1$$

Svart legeme: idealisering med $a = 1$

Ved termisk likevekt (konstant temperatur T)

må legemet absorbere og emitte like mye energi $\Rightarrow a = e = 1$; $e = \text{emissivitet}$

⑥

$j(T) = \int_0^{\infty} I(\nu, T) d\nu =$ utstrålt energi pr
tids- og flateenhet ; $\nu =$ frekvensen

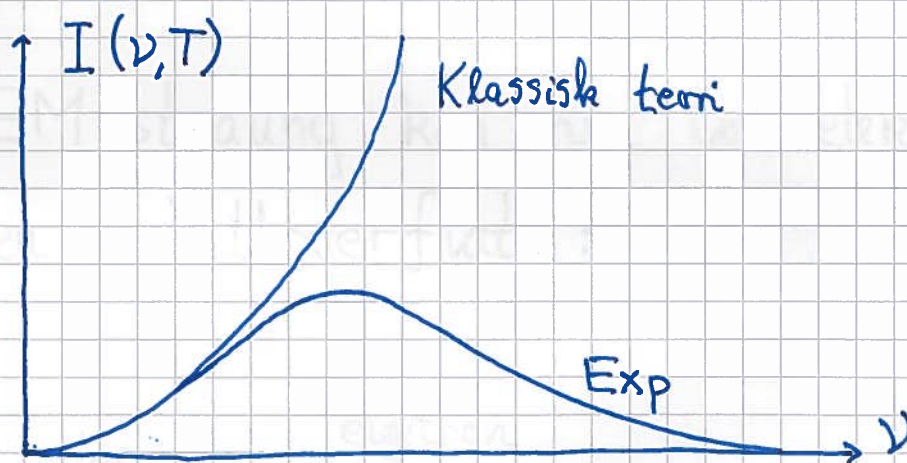
$I(\nu, T) =$ utstrålt effekt pr flate- og frekvensenhet

Klassisk teori gir Rayleigh - Jeans lov

$$I(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} k_B T$$

($c =$ lysfarten ; $k_B =$ Boltzmanns konstant)

som stemmer med eksperimenter for lave frekvenser
(dvs lange bølglengder λ), men ikke for høye ν :



"ultrafiolett katastrofen" :

$j(T) \rightarrow \infty$ med klassisk teori

Max Planck, 1900, NP 1918:

(7)

EM stråling med frekvens ν har kvantisert energi,

$$E = 0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots$$

Plancks kvantehypotese

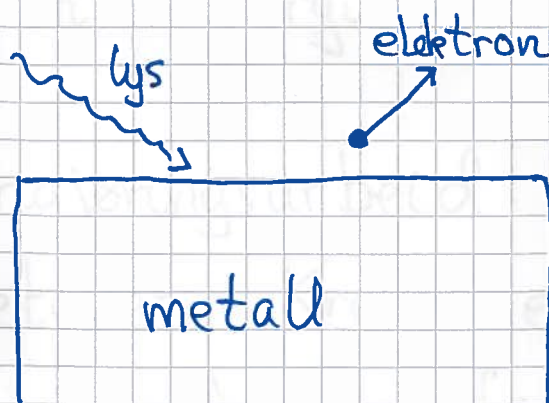
som gir

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

Plancks strålingslov

- Fotoelektrisk effekt:

EM stråling kan rive løs elektroner fra en metalloverflate:



Exp:

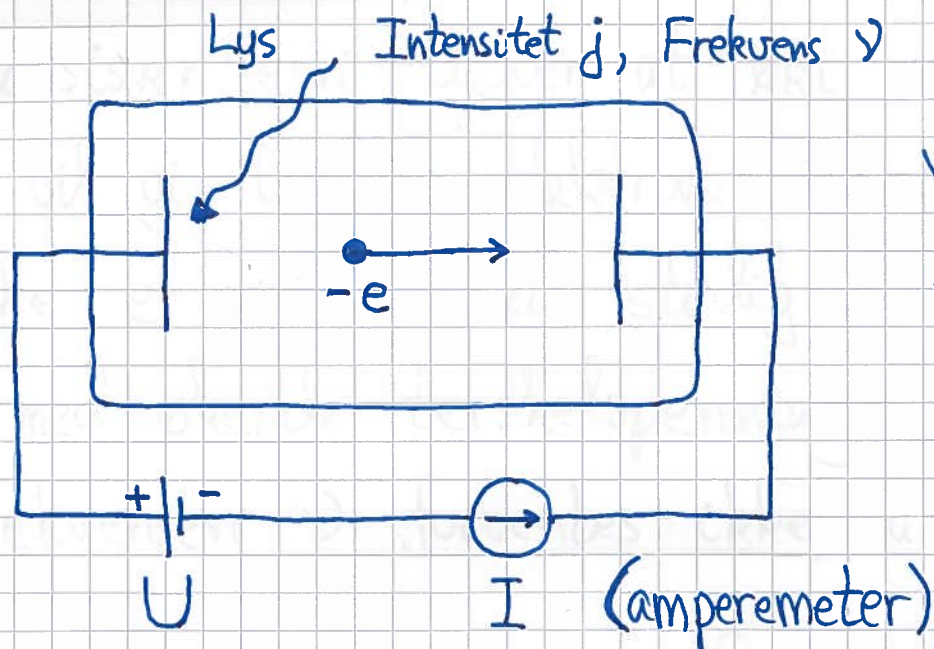
Hertz 1887

Lenard 1900

R. Millikan 1914

(NP 1923)

(8)



Terskelspanning : Noen løsrevne elektroner treffer den andre elektroden ; gir strøm I i kretsen. Trenger motspanning

$$U = K_{\max} / e$$

for å redusere I til null. Kaller U terskelspanningen. Her er $K_{\max}$ maksimal kinetisk energi for løsrevne elektroner.

Frigjøringsarbeid : Elektronene er bundet til metallet. Kreves en minsteenergi

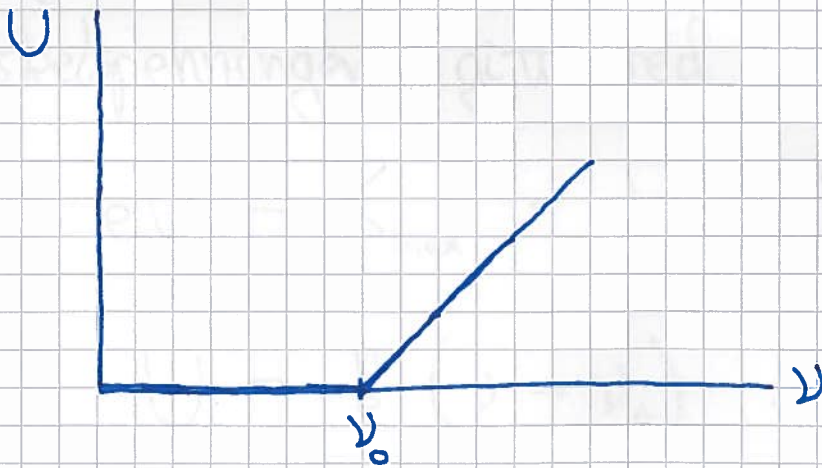
$W =$ frigjøringsarbeidet for å rive løs elektroner.

Klassisk teori tilsier at økt intensitet ⑨
j vil gi løsrevne elektroner (når liten intensitet
ikke er nok), med stadig økende $K_{\max}$ og
dermed økende terskelspenning U .
Frekvensen ν forventes ikke å påvirke U .

Ekperimentene gav $I = 0$ så lenge ν var
mindre enn en bestemt (materialavhengig)
terskel frekvens ν_0 , selv med økt intensitet.

Dvs: $U = 0$ så lenge $\nu < \nu_0$.

Hvis $\nu > \nu_0$, øker U lineært med ν .



Millikan 1914, NP 1923

Einstein forklarte resultatene med (10)

Plancks kvantehypotese: (1905, NP 1921)

Lysets energi kommer i "hele pakker" proporsjonale med frekvensen, $E = h\nu$, med h som innført av Planck. Et elektron i metallet kan bare absorbere hele energien $h\nu$. (Liten sannsynlighet for å absorbere to eller flere energipakker samtidig.)

Må nå ha $h\nu \geq W$ for å rive løs elektroner.

Med $h\nu > W$ får løsrevne elektroner kinetisk energi inntil $h\nu - W$. Dermed blir terskelspanningen gitt ved

$$eU = K_{\max} = h\nu - W$$

dvs

$$U = \frac{h}{e} (\nu - \nu_0) = \text{terskelspanning}$$

med

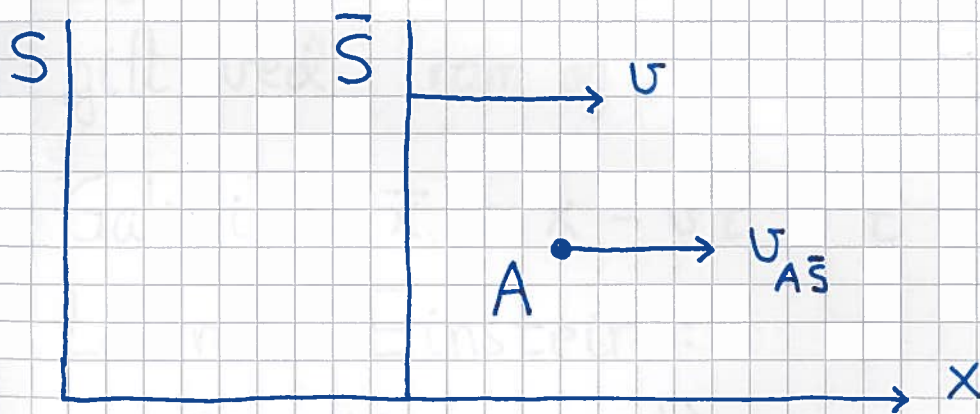
$$\nu_0 = W/h = \text{terskeelfrekvens}$$

Millikan målte $e \approx 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ i 1909, slik at $U(\nu)$ gav exp. verdi for h ($\approx 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$)

- Einsteins spesielle relativitetsteori: (11)
Bygger på to postulater: (1905)

1. Relativitetsprinsippet: De samme naturlover gjelder i alle inertialsystemer. (Også formulert av Galilei mye tidligere.)
2. Lysfarten i vakuum er den samme for alle observatører, uavhengig av observatørens relative bevegelse.

Konsekvenser av disse postulatene:



S og $\bar{S}$ er to inertialsystemer ("koordinat-systemer") i relativ bevegelse:

$u = u_{\bar{S}S}$ = farten til $\bar{S}$ relativt S ,
dvs slik at omvendt er $u_{S\bar{S}} = -u$

- (12)
- Samtidighet er relativt: Samtidige hendelser i S er ikke samtidige i $\bar{S}$.
 - Tidsdilatasjon: Klokke i bevegelse går saktere enn klokke som er i ro.
 - Lengdekontraksjon: Objekter i bevegelse er kortere enn objekter i ro.
 - Galileisk relativitet holder ikke:

$$v_{AS} \neq v_{A\bar{S}} + v_{\bar{S}S}$$

- Nye regler for transformasjon av hendelser gitt ved "rom og tid" (x, y, z, t) .

Galilei: $\bar{x} = x - vt$; $\bar{t} = t$

Lorentz / Einstein:

$$\bar{x} = \gamma (x - vt)$$

$$\bar{t} = \gamma \left(t - \frac{v}{c^2} x \right)$$

med

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

$$c = \text{lysfarten} \approx 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

- (13)
- Nye uttrykk for impuls $\vec{p}$ og energi E , for å få prinsippene om impuls- og energibevarelse i samsvar med relativitetsprinsippet:

$$\vec{p} = \gamma m \vec{v} \quad ; \quad E = \gamma mc^2 = E_0 + K$$

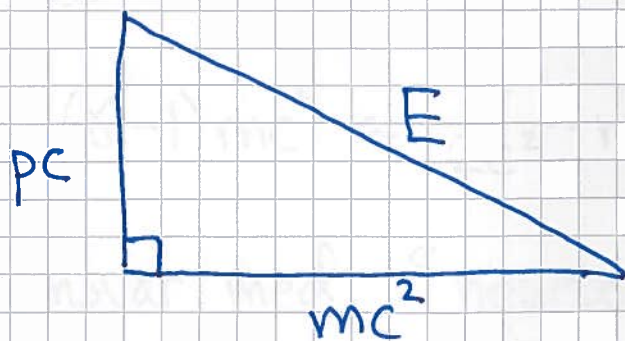
Hvilkeenergi: $E_0 = mc^2$

Kinetisk energi: $K = E - E_0 = (\gamma - 1)mc^2$

Gir sammenhengen

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$$

for partikkel med masse m , impuls p og energi E .



Eks: Lys; bølgelengde λ , frekvens ν og (bølge-)fart c . Er samtidig å betrakte som partikler (pga fotoelektrisk effekt). Siden $v = c$, vil $\gamma \rightarrow \infty$ for lyskvant (fotoner). Med $p = \gamma m v$ må vi da ha $m = 0$, for å unngå at $p \rightarrow \infty$. Med $m = 0$ blir $E = pc$. Med $c = \lambda \nu$ og $E = h\nu$ følger det at

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

Eks: K for partikkel med $v \ll c$

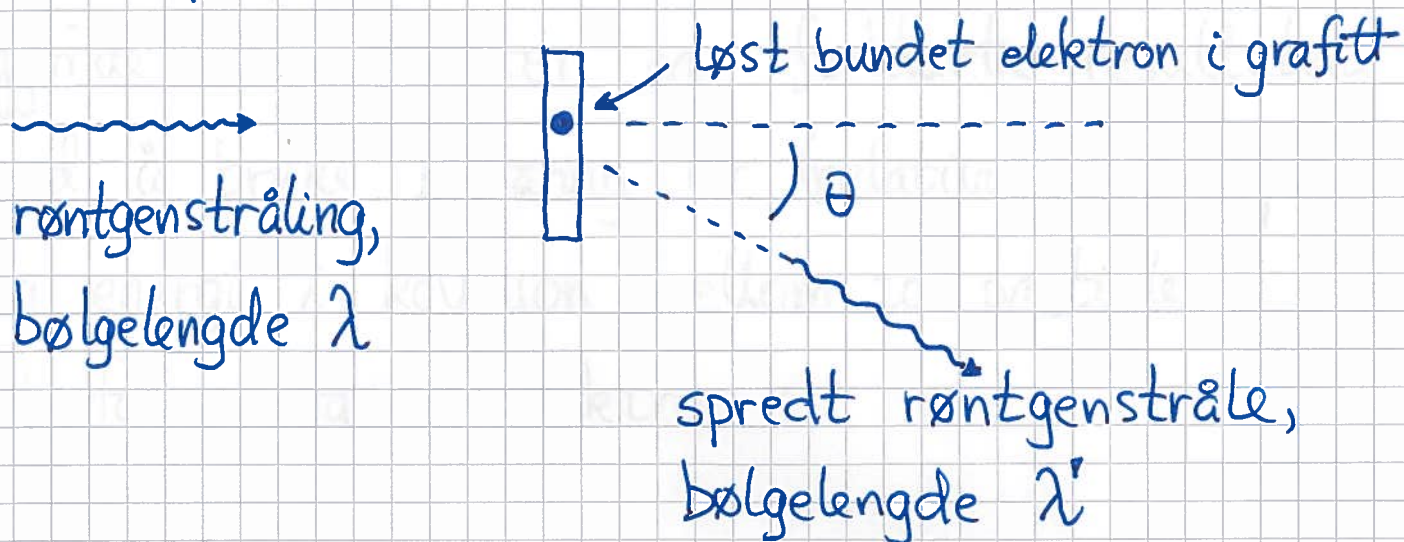
Med $v \ll c$ er $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} \approx 1 + \frac{v^2}{2c^2}$ slik at

$$K = (\gamma - 1)mc^2 \approx \frac{v^2}{2c^2} \cdot mc^2 = \frac{1}{2}mv^2$$

i samsvar med "newton-mekanikk".

• Compton - effekten :

(15)



Klassisk teori :

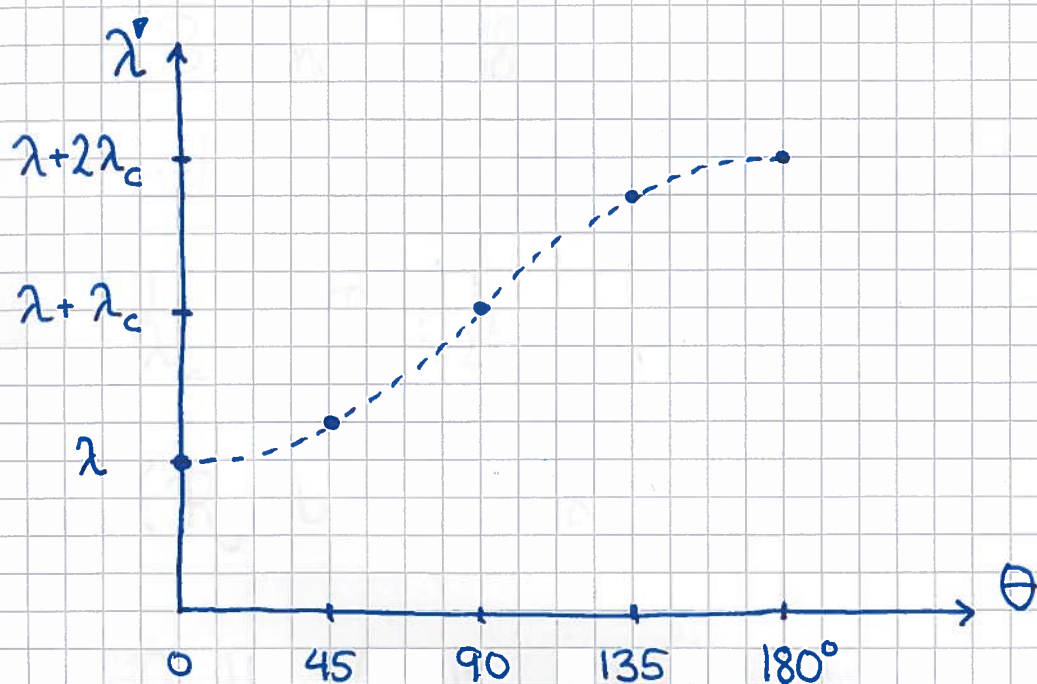
Røntgenstrålene er EM bølger med frekvens $\nu = c/\lambda$. EM-bølger har oscillerende elektrisk felt $\vec{E}(t)$ som gir oscillerende kraft $\vec{F}(t) = -e\vec{E}(t)$ på elektronet. Elektronet settes i svingninger med samme frekvens ν . I følge Maxwells ligninger vil en slik oscillerende ladning sende ut EM-bølger med frekvens ν .

Dermed bør spredt røntgenstråle ha samme bølgelengde som innkommende stråle, dvs $\lambda' = \lambda$; uavhengig av vinkelen θ .

A. H. Compton (1923, NP 1927)

(16)

gjorde eksperimenter og forklarte resultatene ved å bruke bevaring av (relativistisk) impuls og energi i kollisjon mellom to partikler, et foton og et elektron :



A. H. Compton,
Phys. Rev. 21,
483 (1923)

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

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} \approx 2.4 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 0.024 \text{ \AA}$$

= compton-bølgelengden for elektronet

Et overbevisende resultat i favør av fotonbegrepet.

Bohr - modellen (1913, NP1922)

(17)

Bakgrunn for Niels Bohrs ideer:

- Balmerserien for H-atomet.

$$\lambda_n = B \frac{n^2}{n^2 - 4} ; B \approx 364.5 \text{ nm} ; n=3,4,5,6$$

(Balmer 1885)

ert.

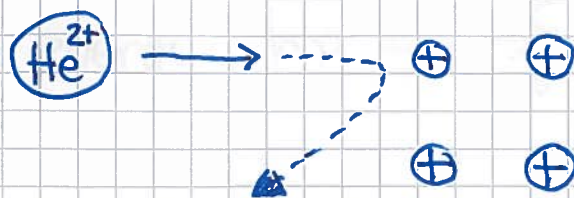
$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) ; R = \frac{4}{B} \approx 10^7 \text{ m}^{-1}$$

(Rydberg 1888)

- Rutherfords atommodell (1911).

Atomenes positive ladning er samlet i en liten kjerne; ikke jevnt fordelt som i Thomsons modell.

Exp. motivert: α -partikler (He^{2+}) ble sendt mot tynn gullfolie. Noen ble sterkt avbøyd.



- Plancks kvantehypotese og Einsteins 18
forklaring av fotoelektrisk effekt. Viste
at strålingsenergi opptrer i enheter av $h\nu$.

Bohrs postulater:

- Stasjonære tilstander, med bestemte energier. Klassisk fysikk tilsier at elektronet i H-atomet må tape energi i form av EM stråling, fordi det er i akselerert bevegelse. Dette må være forhindret.
- Kvantepresprang. Absorpsjon og emisjon av foton gir overgang for elektronet mellom stasjonære tilstander.

Balmerserien antyder at energinivåene i H-atomet er

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

siden et foton har energi $h\nu = \frac{hc}{\lambda}$.

- Elektronet går i klassiske sirkelbaner (19) rundt kjernen. [Stemmer ikke!]

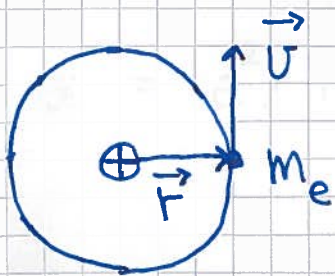
Newtons 2. lov, $F = m_e a$, med $a = v^2/r$

og $F = e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$ gir $v^2 = e^2/4\pi\epsilon_0 m_e r$,

$K = \frac{1}{2} m_e v^2 = e^2/8\pi\epsilon_0 r$, og total energi

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

- Elektronets dreieimpuls er kvantisert. [Stemmer!]



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

Bohrs forslag: $L = n\hbar$, med $n = 1, 2, 3, \dots$

og $\hbar = h/2\pi \approx 1.05 \cdot 10^{-34}$ Js ("h-strek")

[Stemmer ikke!]

Dermed:

$$L^2 = r^2 m_e^2 v^2 = r^2 m_e^2 e^2 / 4\pi\epsilon_0 m_e r = n^2 \hbar^2,$$

dvs sirkelbanene har radius

$$r_n = n^2 \cdot 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2 = n^2 \cdot a_0$$

der Bohr-radien er $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2 \approx 0.529 \text{ \AA}$

Energiniivåene:

(20)

$$E_n = -e^2 / 8\pi\epsilon_0 r_n = - \frac{m_e e^4 / 32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}{n^2} \approx \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

i samsvar med Balmers (og Rydbergs) formel!

Vi ser at $|E_n| \ll m_e c^2$ = elektronets hvileenergi:

$$E_n = -\frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 / n^2$$

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



- Riktige energiniivåer for hydrogen.
- L er kvantisert, og proporsjonal med $\hbar$, men $L=0$ i grunntilstanden for hydrogen, ikke $\hbar$ som i Bohrs modell.
- Bohr-modellen fungerte dårlig på andre atomer.
- Ideen om elektronet som klassisk partikkel i baner rundt kjernen måtte forkastes.

Interferens med partikler

(21)

Louis de Broglie (1892-1987):

"Hvis lys er både bølger og partikler, bør massive partikler være både partikler og bølger!"

(1923/24 ; NP 1929)

For lys: $E = h\nu$ og $E = pc$

$$\Rightarrow p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Dermed, for massive partikler med impuls p og energi E :

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}, \quad \nu = \frac{E}{h}}$$

de Broglies
hypotese

For en ikke-relativistisk ideel gass av atomer eller molekyler har vi

$$K_{\text{trans}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2} k_B T$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} = \text{partiklens termiske de Broglie bølgelengde}$$

Noen exp. som viser partiklers bølgeegenskaper :

Davisson & Germer 1927 : Diffraksjon av elektroner mot Ni-krystall.

[Davisson, G. P. Thomson NP 1937]

C. Jönsson. 1961 : Dobbeltspalteforsøk med elektroner.

Tonomura et al 1989 : Interferensmønster selv med ett og ett elektron mot dobbeltspalte.

Zeilinger et al 2003 : Interferens med ett og ett C_{60} -molekyl mot diffraksjonsgitter.

Arndt et al 2015 : Interferens med $C_{168}H_{94}F_{152}O_8N_4S_4$ - molekyler.

Schrödingerligningen [YF40]

(23)

Erwin Schrödinger (1925 ; NP1933 med Paul Dirac ; Werner Heisenberg fikk NP i 1932):

"Hva slags bølgeligning kan fungere for de Broglies partikkelbølger?"

Vi rekapitulerer fra mekanikk og elmag:
Bølgelign. som beskriver mekaniske og EM bølger er

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

evt, i 3D,

$$\nabla^2 y = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} ; \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

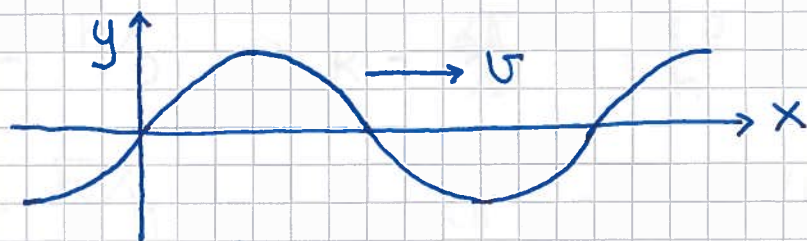
med løsninger på formen

$$y(x,t) = y(x \pm vt)$$

Her kan y være: utsving på en streng, avvik fra likevektstrykket i luft, elektrisk felt $\vec{E}$, magnetfelt $\vec{B}$ osv.

Eks: Harmonisk bølge

$$y(x,t) = A \sin(kx - \omega t)$$



$k = 2\pi/\lambda$ = bølgetallet ; λ = bølgelengden

$\omega = 2\pi/T = 2\pi\nu$ = vinkelfrekvensen ; T = perioden

$v = \lambda/T = \lambda\nu = \omega/k$ = fasehastigheten

$v_g = d\omega/dk$ = gruppehastigheten

Vi ser på enkleste mulige eksempel :

Fri partikkel med veldefinert fart i x-retning.

$$\vec{v} = v \hat{x}$$

$$\vec{p} = m\vec{v} = mv \hat{x} = \text{impuls}$$

$$E = K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \text{energi}$$

(der vi har valgt pot. energi $V=0$)

I følge de Broglie har partikkelen bølgeegenskaper:

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

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

Så vi prøver å beskrive partikkelbølgen med bølgefunksjonen

$$\Phi(x, t) = \cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right) ; \text{ evt sinus.}$$

Kan vi finne en noenlunde enkel bølgeligning som har slike løsninger, og som samtidig er konsistent med at $E = p^2/2m$?

Derivasjon (husk kjerneregel!) 2 ganger mhp x og 1 gang mhp t "trekker ut" hhv faktorer prop. med p^2 og E og går nesten bra. Men:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \cos\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi = \left(\frac{E}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)$$

Forsøk på å kombinere disse til en ligning på formen

(26)

$$(p^2/2m - E) \cdot (\text{en funksjon av } x \text{ og } t) = 0$$

lykkes ikke. Men vi vet at derivasjon av exp-funksjonen gir samme funksjon tilbake. Kombinasjonen

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

bør derfor gå bedre.

Dette er Eulers formel, og vi kaller gjerne funksjonen $\exp[i(px - Et)/\hbar]$ for en plan bølge.

Her er $i = \sqrt{-1}$, slik at $i^2 = -1$.

Se notatet "Matematikk: Komplekse tall".

Vi prøver med bølgefunksjonen

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

som gir

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 e^{i(px - Et)/\hbar} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi$$

slik at

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = \frac{p^2}{2m} \Psi(x, t)$$

Videre er

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi$$

slik at

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = E \Psi(x, t)$$

Husk at vi her har antatt en fri partikkel og valgt $V=0$, slik at $E=K=p^2/2m$.

Da kan vi skrive $E\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi$, eller

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t)} \quad \begin{matrix} \text{SL i} \\ \text{1D} \end{matrix}$$

som er selveste Schrödingerligningen, for en fri partikkel i én dimensjon (1D).

Merknader:

- SL er den enkøste diff. ligning som oppfylles av plane de Broglie-bølger for en ikke-relativistisk (dvs $v \ll c$, slik at $K = p^2/2m$) fri partikkel.
- SL viser seg å fungere i praksis, også for $V = \text{konstant} \neq 0$, og til og med for $V \neq \text{konstant}$, dvs $V(x)$, evt $V(\vec{r})$ i 3D.
- Vi må ha komplekse løsninger av SL.
 Reell Ψ gir reell "høyreside" $(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2})$
 og imaginær "venstreside" $(i\hbar \partial \Psi / \partial t)$,
 og det er ikke mulig.
- Målbare fysiske størrelser er reelle.
 Dermed kan bølgefunksjonen Ψ
ikke være en direkte målbar størrelse.

Tolkning av bølgefunksjonen:

(29)

Max Born (1926, NP 1954) foreslo en statistisk tolkning,

$dP = |\Psi(x,t)|^2 dx$ = sannsynligheten for å finne partikkelen (som beskrives av Ψ) mellom x og $x+dx$ dersom dens posisjon måles ved tidspunktet t

Da blir $|\Psi(x,t)|^2 = dP/dx$, dvs sannsynligheten pr lengdeenhet, eller sannsynlighetstettheten.

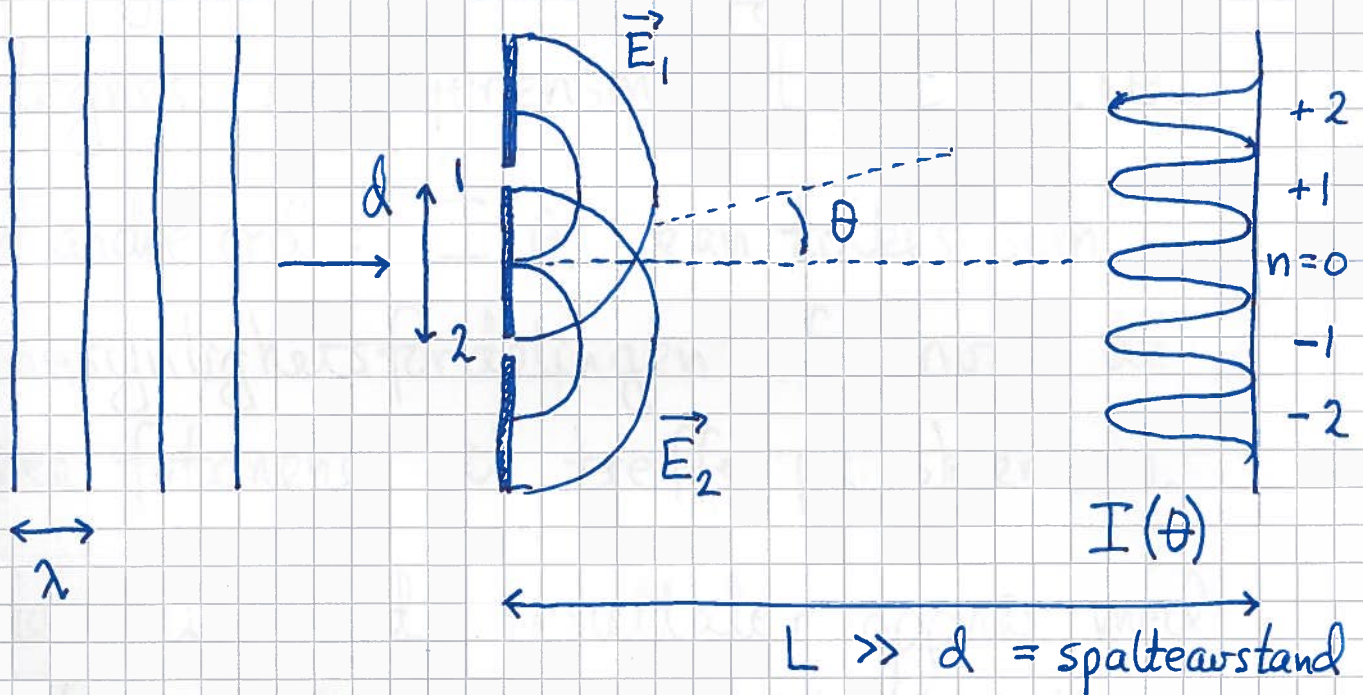
Normering av sannsynlighet:

Et eller annet sted må partikkelen være, til enhver tid, slik at $\int dP = 1$. Dvs

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

Begrunnelse for en slik tolkning av Ψ : (30)

Ser på plan EM-bølge inn mot vegg med to smale åpne spalter (T. Young 1801).



Total bølge som treffer skjermen: $\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$

Intensitet på skjermen: $I \sim |\vec{E}|^2 = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$

Veilengdeforskjell, til skjerm fra 1 og 2:

$$\Delta r = d \sin \theta$$

$\Rightarrow$ Konstruktiv interferens når $d \sin \theta = n\lambda$;

da er $\vec{E}_2 \approx (+1)\vec{E}_1$ og $I \sim 4E_1^2$

Destruktiv interferens når $d \sin \theta = (n + \frac{1}{2})\lambda$;

da er $\vec{E}_2 \approx -\vec{E}_1$ og $I \approx 0$

Men lys er også partikler (fotoner): (31)

Hvis ett og ett foton sendes mot dobbeltspalten, får vi tilsynelatende tilfeldige treffsteder på skjermen. Etter mange fotoner avtegnes interferensmønsteret $I(\theta)$.

Med andre ord: $I(\theta)$ kan tolkes som sannsynlighetsfordelingen for hvor de ulike fotonene vil treffe på skjermen.

Siden tilsvarende resultater oppnås med elektroner inn mot en dobbeltspalte

(jf. Tonomura et al, Am J. Phys 57, 117 (1989)), blir det naturlig å tolke $|\Psi(x,t)|^2$ som en sannsynlighetsfordeling for hvor en vil finne elektronet ved tidspunkt t .

Bølgepakker:

Planbølge med veldefinert ("skarp")

impuls p , $\Psi(x,t) = \exp[i(px - Et)/\hbar]$,
er ikke normerbar, fordi

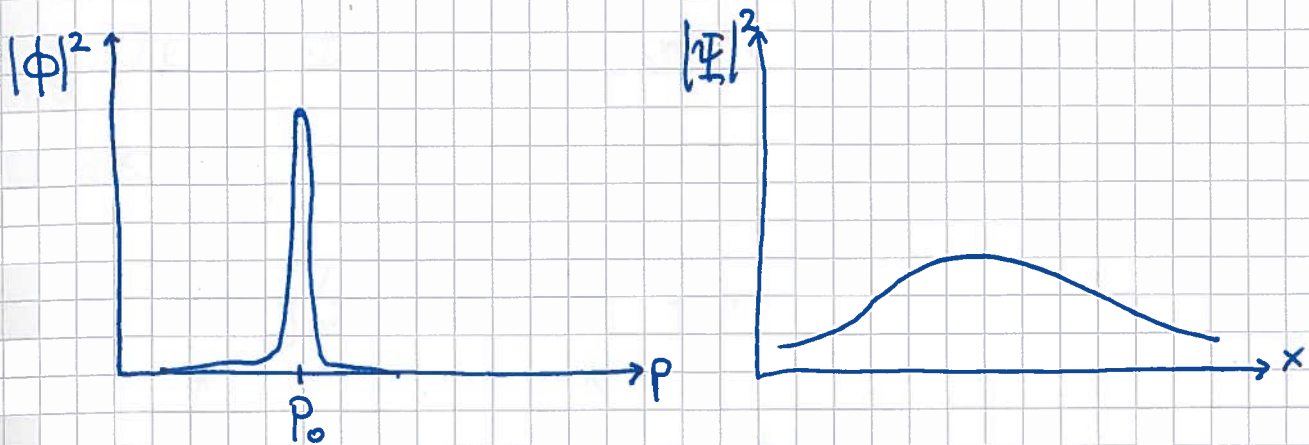
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 \cdot dx = \infty$$

Vi kan "lokalisere" partikkelen, og normere sannsynligheten, ved å beskrive partikkelen med en sum av planbølger med ulike impulser, dvs en bølgepakke:

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

Her tolker vi $\phi(p)$ som andelen av $\Psi(x,t)$ som har impuls p , slik at $|\phi(p)|^2 dp$ blir sannsynligheten for at en måling av partikkelens impuls vil gi resultat mellom p og $p+dp$.

Dersom $|\phi(p)|^2$ er smal, vil $|\Psi(x,t)|^2$ (33)
være bred, og omvendt. F.eks slik:



Hvis Δp og Δx er hhv "uskarpheten"
i partikkelens impuls og posisjon,
skal vi senere se at vi alltid har

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

som er Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Operator. Egenfunksjon. Egenverdi

Hvis en operator virker på en funksjon $f(x)$, og resultatet blir samme $f(x)$ ganget med en konstant, dvs

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

$\uparrow$ operator $\uparrow$ konstant

da er $f(x)$ en egenfunksjon til operatoren $\hat{A}$, med tilhørende egenverdi A .

Eks:

- $\frac{\partial}{\partial x} \cos(px/\hbar) = -(p/\hbar) \sin(px/\hbar)$
 $\Rightarrow \cos(px/\hbar)$ er ikke egenf. til oper. $\partial/\partial x$
- $\frac{\partial}{\partial x} \exp(ipx/\hbar) = (ip/\hbar) \exp(ipx/\hbar)$
 $\Rightarrow \exp(ipx/\hbar)$ er egenf. til $\partial/\partial x$,
 med egenv. $ip/\hbar$
- $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \exp(ipx/\hbar) = p \exp(ipx/\hbar)$
 $\Rightarrow \exp(ipx/\hbar)$ er egenf. til $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ med egenv. p

$\Rightarrow$ Vi kaller $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ en impulsoperator,

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

og vi kaller ligningen

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

en egenverdligning.

Og vi ser at $\exp(ipx/\hbar)$, og dermed også den plane bølge.

$$\Psi(x,t) = \exp(ipx/\hbar - iEt/\hbar)$$

er egenfunksjon til $\hat{p}$ med egenverdi p .

La oss ta for oss energien, først for en fri partikkel med $V=0$, slik at

$$E = K = p^2/2m$$

Det er da rimelig å kalle operatoren

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

en energioperator, mer presist en oper. for kin. energi.

I klassisk mekanikk kalles energien, eller funksjonen som beskriver energien, gjerne Hamiltonfunksjonen H .

I QM (kr.mek.) kaller vi derfor oper. for energi Hamiltonoperatoren $\hat{H}$.

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

Fri part., med $V=V_0 \neq 0$:

$$E = K + V = p^2/2m + V_0$$

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \hat{K} + V \quad (\hat{V} = V)$$

$$= \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0$$

Hva med $V \neq \text{konst.}$? Dvs $F = -\frac{dV}{dx} \neq 0$?

Schrödinger satset på samme ligning, dvs

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi ; \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

som er SL i 1D, og som fungerer!

$$[3D: \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla ; V(x) \rightarrow V(\vec{r}) ; \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})]$$

Stasjonære tilstander og tidsuavhengig (37)

Schrödingerligning (TUSL)

Ofte er potensialet $V(x)$ uavhengig av tiden t . Da har SL løsninger på formen

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

Dette er et eksempel på en stasjonær tilstand, med sannsynlighetsfordeling som ikke avhenger av t :

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

fordi $|\exp(-iEt/\hbar)|^2 = 1$.

Bewis: SL, dvs $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$,
har produktløsninger $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot T(t)$
når $\hat{H}$ er uavhengig av t . Innsetting og
divisjon med Ψ gir

$$\cancel{i\hbar \partial \Psi / \partial t} \quad i\hbar \frac{\partial T / \partial t}{T} = \frac{\hat{H} \psi}{\psi}.$$

Her er v. side kun avh. av t og h. side kun av x .

Da må begge sider av lign. være lik en og samme konstant, som vi kan kalle E . Løser for T :

$$\frac{dT}{T} = \frac{E dt}{i\hbar} \Rightarrow T(t) = \text{konst.} \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

Lign. for $\Psi(x)$:

$$\boxed{\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)} \quad \text{TUSL i 1D}$$

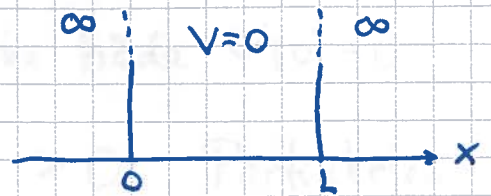
med $\hat{H} = \hat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$. Siden $\hat{H}$ er operator for total energi, er det naturlig å tolke egenverdiene E som systemets mulige energier og $\Psi(x)$ som systemets mulige tilstander.

Men husk at $\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-iEt/\hbar}$ er den fulle løsningen av SL. Dette er stasjonære tilstander, fordi $|\Psi(x,t)|^2 = |\Psi(x)|^2$ er uavh. av t .

Partikkel i boks (1D)

En partikkel, masse m , i potensialet

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



En klassisk partikkel i dette potensialet har $E = K = \frac{1}{2}mv^2$, og alle $E \geq 0$ er mulige. Partikkelen seiler fram og tilbake med farten $v = \sqrt{2E/m}$.

Kvantemekanisk må vi løse SL, som har løsninger

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

der $\psi(x)$ og E er hhv. egenf. og egenv. til

$$\hat{H} = \hat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \text{ dvs}$$

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

Utenfor boksen: $V = \infty$, og vi må ha $\psi = 0$; her kan ikke partikkelen befinne seg.

Inni boksen: $V = 0$. Vi må kunne anta at

$E \geq 0$, og at $\psi(x)$ er kontinuerlig, slik at $|\psi|^2$ blir kontinuerlig.

Da er $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$.

(40)

Da er $E=0$ ikke mulig: I såfall er $\Psi''(x) = 0$,
dvs $\Psi(x) = Ax + B$, men da er ikke både $\Psi(0) = 0$
og $\Psi(L) = 0$ mulig! Dvs: $E > 0$. Partikkelen
kan ikke ligge i ro!

Generell løsning av TUSL der $V=0$:

$$\Psi'' + k^2 \Psi = 0 \quad ; \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

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

$$\Psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0 \Rightarrow \Psi(x) = A \sin kx$$

$$\Psi(L) = 0 \Rightarrow \sin kL = 0 \Rightarrow k_n \cdot L = n \cdot \pi \quad ; \quad n=1,2,3,\dots$$

Vi har fått kvantisering av energien:

$$E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m = n^2 \cdot \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2 \quad ; \quad n=1,2,3,\dots$$

Tilhørende egenf: $\Psi_n(x) = A_n \sin \frac{n\pi x}{L}$

Fastlegger A_n med normeringskravet:

$$\int_0^L |\Psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad (\text{for hver } n)$$

Skriver om kvadratet av sinus :

$$\sin^2 \alpha = \left\{ \frac{1}{2i} (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}) \right\}^2 = -\frac{1}{4} \{ e^{2i\alpha} + e^{-2i\alpha} - 2 \}$$

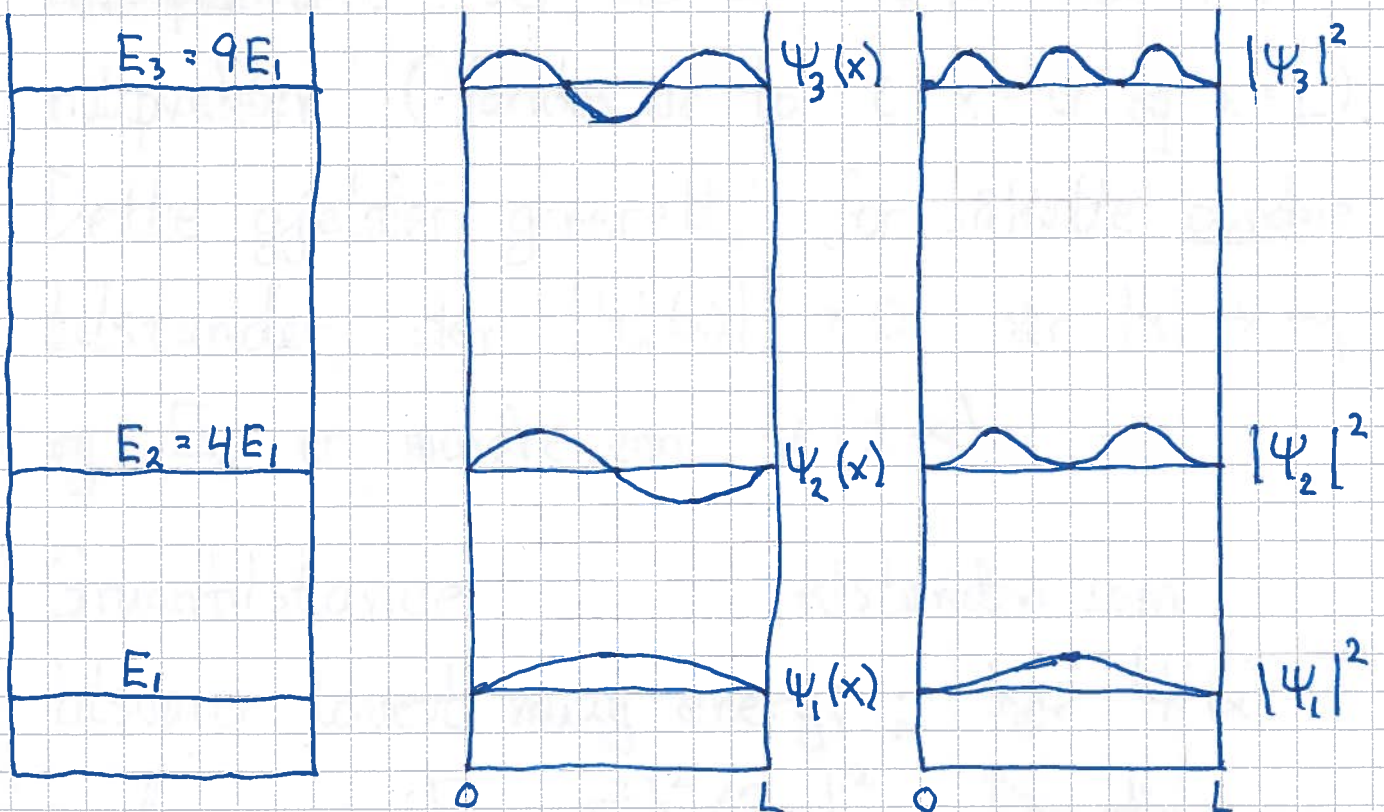
$$= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2\alpha$$

Dermed:

$$|A_n|^2 \int_0^L \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{L} \right) dx = 1$$

$$\Rightarrow |A_n|^2 \cdot \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\Rightarrow \text{Normerte egenfunksjoner : } \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$



En klassisk analogi : Stående bølger på streng.

Merknader:

(42)

- Symmetri. Her er $V(x)$ symmetrisk om $x = L/2$.
Da må også $|\Psi_n(x)|^2$ være symm. om $x = L/2$.
Da må $\Psi_n(x)$ være symm. eller antisymm. om $x = L/2$. Vi ser at dette stemmer her: $\Psi_n(x)$ er symm. for $n = 1, 3, 5, \dots$ og antisymm. for $n = 2, 4, 6, \dots$
- Nullpunkter. Ser her at $\Psi_n(x)$ har $n-1$ nullpunkter (foruten de to i $x = 0$ og $x = L$). Dette gjelder generelt, for såkalte bundne tilstander, der $|\Psi_n(x)| \rightarrow 0$ når $|x| \rightarrow \infty$, og E_n er mindre enn $V(\pm\infty)$.
- Grunntilstanden er den tilstanden som tilsvarer lavest mulig energi; her $\Psi_1(x)$ med energi $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$. Deretter er $\Psi_2(x)$ 1. eksiterte tilstand, osv.

- Grensebetingelser.

$\Psi(x)$ må være kontinuerlig overalt. Hvis ikke, blir sannsynlighetstettheten $|\Psi(x)|^2$ ikke entydig i alle posisjoner x ; det ville være fysisk urimelig.

Omskrivning av TUSL gir

$$\Psi''/\Psi = \frac{2m}{\hbar^2} (V-E),$$

som viser at $\Psi'(x)$ også er kontinuerlig overalt, bortsett fra der $V(x)$ gjør et uendelig stort sprang. Der blir $\Psi'(x)$ diskontinuerlig, dvs $\Psi(x)$ har et "knekkpunkt". (I vårt eksempel skjer dette i $x=0$ og $x=L$.)

- Bølgefunksjonens krumningsegenskaper.

(44)

Vi har $\Psi''/\Psi = \frac{2m}{\hbar^2} (V-E)$.

Der $E > V$ er dermed $\Psi''/\Psi < 0$, og Ψ krummer mot x -aksen. Omvendt, der $E < V$ blir $\Psi''/\Psi > 0$, og Ψ krummer bort fra x -aksen.

I klassisk fysikk kan en partikkel bare være der $E \geq V$ (dvs $K \geq 0$). Vi kaller dette et klassisk tillatt område.

Med kvantemekanikk skal vi se at partikler også kan være i områder der $E < V$ (så lenge V er endelig, dvs $|V| < \infty$). Vi kaller dette et klassisk forbudt område.

[Hvis $V = \infty$, er $\Psi = 0$, så slike områder er forbudt, både klassisk og kvantemekanisk!]

- Ortogonalitet.

Vanlige vektorer er ortogonale hvis skalarproduktet er null: $\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = 0 \Leftrightarrow \vec{V}_i \perp \vec{V}_j$.

Hvis lengden (absoluttverdien) av $\vec{V}_i$ dessuten er lik 1, kan vi si at vektorene også er normerte.

Eller, for enkelhets skyld, ortonormerte dersom de er både ortogonale og normerte.

Dette kan uttrykkes svært "kompakt" med en Kronecker-delta,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{hvis } i=j \\ 0 & \text{hvis } i \neq j \end{cases}$$

Dvs: Vektorsettet $\{\vec{V}_i\}$ ($i=1,2,3,\dots$) er ortonormert dersom $\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij}$

På lignende vis sier vi at funksjonssettet $\{\psi_n(x)\}$; $n=1,2,3,\dots$ er ortonormert dersom

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

Ulike egenfunksjoner til $\hat{H}$ (med ulike tilhørende egenverdier E_n) vil generelt være ortogonale. La oss vise dette i vårt eksempel, ved å regne ut integralet

$$\int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \cdot \sin \frac{j\pi x}{L} dx \quad (\text{med } n \neq j)$$

Vi slår opp i f.eks. Rothmann, eller bruker Eulers formel til å skrive om integranden:

$$\begin{aligned} \sin \alpha \cdot \sin \beta &= \frac{1}{2i} (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}) \cdot \frac{1}{2i} (e^{i\beta} - e^{-i\beta}) \\ &= -\frac{1}{4} (e^{i(\alpha+\beta)} + e^{-i(\alpha+\beta)} - e^{i(\alpha-\beta)} - e^{-i(\alpha-\beta)}) \\ &= \frac{1}{2} \cos(\alpha-\beta) - \frac{1}{2} \cos(\alpha+\beta) \end{aligned}$$

$$\left[\text{der vi brukte at } \sin \alpha = \frac{1}{2i} (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}), \right. \\ \left. \cos \alpha = \frac{1}{2} (e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}), \text{ samt } i^2 = -1 \right]$$

Integralet ovenfor blir dermed

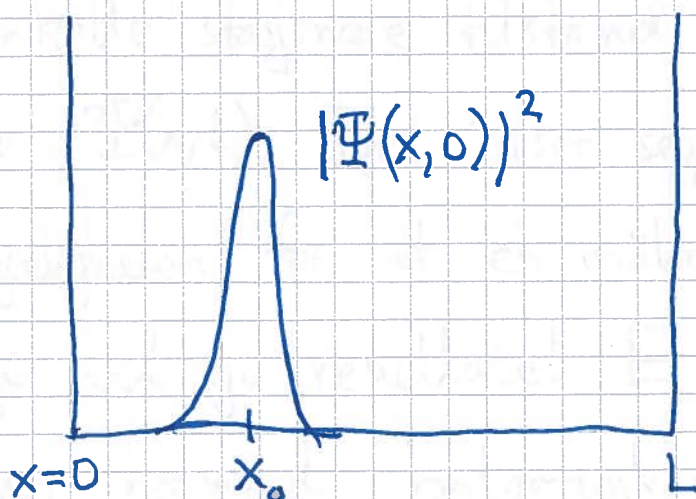
$$\frac{1}{2} \int_0^L \left(\cos \frac{(n-j)\pi x}{L} - \cos \frac{(n+j)\pi x}{L} \right) dx = 0$$

fordi vi får $\sin \frac{(n \pm j)\pi x}{L}$, som innsatt $x=L$ og $x=0$ i begge tilfelle gir 0.

Ikke-stasjonære løsninger av SL

(47)

Anta at vi i vår endimensjonale "boks", med $V=0$ på $0 < x < L$ og $V=\infty$ ellers, kunne foreta en serie med praktisk talt identiske forsøk, der vi lar en partikkel med masse m ved tid $t=0$ starte i posisjon x_0 med hastighet v_0 , dvs med impuls $p_0 = m v_0$. Hvordan skulle vi beskrive dette, med kvantemekanikk? Heisenbergs uskarphetsprinsipp, $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$, forbyr oss å kjenne både x_0 og p_0 presist ved et gitt tidspunkt. Men vi kan tillate en viss usikkerhet Δx og Δp i vår kjennskap til partikkelenes posisjon og impuls ved $t=0$. En "rimelig" sannsynlighetsfordeling $|\Psi(x,0)|^2$ ved $t=0$ kunne da se omtrent slik ut:



Vi ser uten videre at $\Psi(x,0)$ ikke er en (48)
av de stasjonære tilstandene $\psi_n(x)$ som vi har funnet.
Samtidig vet vi at en partikkel som befinner seg i
denne boksen, ikke kan ha andre energier enn de
egenverdiene E_n som vi har funnet.

Men da er det vel rimelig å anta at $\Psi(x,0)$ må
kunne skrives som en sum (lineærkombinasjon) av
stasjonære løsninger, dvs

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x),$$

slik at partikkelen for senere tider, $t > 0$,
beskrives av bølgefunksjonen

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Koeffisientene c_n må da uttrykke i hvor stor grad
den enkelte stasjonære tilstand bidrar til den
totale $\Psi(x,t)$. Det viser seg at $|c_n|^2$ gir
sannsynligheten for at en måling av partikkelens
energi vil gi resultatet E_n , dersom $\Psi(x,t)$
er en normert bølgefunksjon.

Det må selvsagt bety at

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1,$$

for en eller annen energiverdi må jo en måling av partikkelenes energi gi!

Hvis vi kjenner starttilstanden $\Psi(x, 0)$, er det "enkelt" å beregne koeffisientene c_n :

Vi ganger ligningen $\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \Psi_n(x)$ med $\Psi_j^*(x)$ på begge sider og integrerer på begge sider over x fra $-\infty$ til $+\infty$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j^*(x) \Psi(x, 0) dx = \sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j^*(x) \Psi_n(x) dx$$

Verdien av integralet på høyre side er δ_{jn} (se s. 45), slik at høyre side blir

$$\sum_n c_n \delta_{jn} = c_j$$

Med andre ord:

$$c_j = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j^*(x) \Psi(x, 0) dx \quad ; \quad j = 1, 2, 3, \dots$$

La oss sjekke påstanden om at $\sum_n |c_n|^2 = 1$. (50)

Med normert $\Psi(x,t)$ og et ortonormert funksjonssett $\{\psi_n\}$ har vi:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \{c_1^* \psi_1^*(x) e^{+iE_1 t/\hbar} + \dots\} \cdot \{c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \dots\} dx \\ &= |c_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x)|^2 dx + |c_2|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_2(x)|^2 dx + \dots \\ &\quad + c_1^* c_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx + \dots \\ &= |c_1|^2 \cdot 1 + |c_2|^2 \cdot 1 + \dots + c_1^* c_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \cdot 0 + \dots \\ &= |c_1|^2 + |c_2|^2 + \dots = \sum_n |c_n|^2 \quad ; \quad \text{OK!} \end{aligned}$$

Ofte vil det være vanskelig/umulig å regne ut

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x,0) dx$$

analytisk ("eksakt"), men det er ikke vanskelig å tenke seg eksempler på $\Psi(x,0)$ som gjør det relativt enkelt. Et konkret eksempel: $\Psi(x,0) = \sqrt{2/L}$

for $L/4 < x < 3L/4$ og $\Psi(x,0) = 0$ ellers. Da er f.eks. $c_1 = \sqrt{2/L} \cdot \sqrt{2/L} \int_{L/4}^{3L/4} \sin(\frac{\pi x}{L}) \cdot 1 \cdot dx = \frac{2\sqrt{2}}{\pi}$, og $c_2 = c_4 = c_6 = \dots = 0$ (pga symmetri).

Men la oss her se på et eksempel der vi kjenner 51
 c_1 og c_2 , mens $c_3 = c_4 = \dots = 0$. Hvordan
vil da $\Psi(x,t)$ og $|\Psi(x,t)|^2$ oppføre seg?

Løsning:

$$\begin{aligned} |\Psi(x,t)|^2 &= |c_1 \Psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \Psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}|^2 \\ &= \{c_1^* \Psi_1^* e^{iE_1 t/\hbar} + c_2^* \Psi_2^* e^{iE_2 t/\hbar}\} \cdot \\ &\quad \{c_1 \Psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \Psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}\} \\ &= |c_1|^2 \cdot |\Psi_1|^2 + |c_2|^2 \cdot |\Psi_2|^2 + \\ &\quad c_1^* c_2 \Psi_1^* \Psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + \\ &\quad c_1 c_2^* \Psi_1 \Psi_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \end{aligned}$$

Her er de to siste leddene kompleks konjugert av hverandre,
og generelt er $z + z^* = 2 \cdot \text{Re } z$. Her er Ψ_1 og Ψ_2
reelle funksjoner, og vi kan velge reelle c_1 og c_2 ,
slik at de to siste leddene blir

$$\begin{aligned} &c_1 c_2 \Psi_1 \Psi_2 \left\{ e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} + e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right\} \\ &= 2 c_1 c_2 \Psi_1 \Psi_2 \cos \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} \end{aligned}$$

La oss nå være helt konkrete og velge $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$
(slik at $|c_1|^2 + |c_2|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$). Da har vi

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L} + \frac{1}{L} \sin^2 \frac{2\pi x}{L} \quad (52)$$

$$+ \frac{2}{L} \cdot \sin \frac{\pi x}{L} \cdot \sin \frac{2\pi x}{L} \cdot \cos \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}$$

dvs en sannsynlighetstetthet som oscillerer med
 vinkelfrekvens $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar = 3E_1/\hbar$, dvs med
 periode $T = 2\pi/\omega = 2\pi\hbar/3E_1$, som med $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$
 blir $T = 4mL^2 / 3\pi\hbar$.

Har vi riktig enhet? $[mL^2/\hbar] = \text{kg} \cdot \text{m}^2 / \text{Js}$, som med
 $\text{J} = \text{Nm} = (\text{kg m/s}^2) \cdot \text{m} = \text{kg m}^2/\text{s}^2$ blir nettopp s.

Hva slags "tidsskala" snakker vi om? T.eks. for et
 elektron i en boks med lengde $L = 10 \text{ nm}$?

Da blir

$$T = \frac{4 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot (10^{-8})^2}{3 \cdot \pi \cdot 1.05 \cdot 10^{-34}} \text{ s} = \frac{36.44}{3.15 \pi} \cdot 10^{-13} \text{ s}$$

$$\approx 3.6 \cdot 10^{-13} \text{ s} = \underline{0.36 \text{ ps}} \quad (\text{p} = \text{piko} = 10^{-12})$$

På 1. samling :

- Historisk bakgrunn for QM
- Spesiell relativitetsteori
- Bohr - modellen
- de Broglie og "partikkelbølger"
- Schrödingerligningen (SL og TUSL)
- Bølgefunksjon. Sannsynlighetstolkning
- Partikkel i boks :

Grensebetingelser

Energikvantisering

Symmetri

Ortonormerte bølgefunksjoner

Bølgepakker



På 2. samling : Det tida tillater !!

Inkl. et labbesøk (håper jeg).

Kvantemekanikkens postulater

Empirisk grunnlag for klassisk mekanikk er Newtons lover.

Empirisk grunnlag for kvantemekanikk er følgende postulater:

A. Operatorpostulat

Til en målbar størrelse i klassisk mekanikk,

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

har vi i QM en lineær operator

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

Her er

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

$$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} = \text{impulskoordinat } p_j$$

Eks: En partikkel i en dimensjon.

$$N=1. \quad \hat{q}_1 = q_1 = x, \quad \hat{p}_1 = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

Fysiske størrelse

QM operator

$$x, y, z$$

$$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z$$

$$p_x, p_y, p_z$$

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{etc.}$$

$$\vec{p}$$

$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla = \frac{\hbar}{i} \left(\hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$K = p^2 / 2m$$

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \hat{\vec{p}}^2 / 2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \end{aligned}$$

$$V(\vec{r})$$

$$\hat{V} = V(\vec{r})$$

$$E = K + V$$

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

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

$$L_x = y p_z - z p_y$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = z p_x - x p_z$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = x p_y - y p_x$$

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

OSU.

B. Tilstandspostulat

(56)

Systemets tilstand er fullstendig beskrevet ved bølgefunksjonen $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$ som oppfyller ligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (SL)$$

der

$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$ = systemets Hamiltonoperator (energioperator).

Eks: 1 partikkel i 1D boks

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

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

C. Forventningsverdi postulat

Et stort antall målinger av en fysisk størrelse F , på systemer preparert i samme tilstand Ψ , vil gi en middelværdi som nærmer seg

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi dq_1 dq_2 \dots dq_N$$

Eks: 1D boks, grunntilstanden ($n=1$)

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} ; \quad \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

$$\langle x \rangle = \int_0^L \Psi_1^*(x,t) x \Psi_1(x,t) dx$$

$$= \int_0^L x |\psi_1(x)|^2 dx = \dots = L/2$$

$$\langle p \rangle = \int_0^L \Psi_1^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \Psi_1 dx$$

$$\sim \int_0^L \sin \frac{\pi x}{L} \cdot \cos \frac{\pi x}{L} dx = 0$$

(pga antisymmetrisk integrand)

D. Målepostulat

En måling av F kan bare gi som resultat en av egenverdiene f_j , dvs slik at

$$\hat{F} \Psi_j = f_j \Psi_j$$

Etter måling av F , der resultatet ble f_j , harner systemet i egentilstanden Ψ_j .

Dvs: Målingen påvirker systemet!

Eks: 1D boks. Anta en starttilstand

$$\Psi(x, t_0) = c_1 \Psi_1(x, t_0) + c_2 \Psi_2(x, t_0)$$

En energimåling ved $t_1 > t_0$ vil da gi E_1 eller E_2 , med sannsynlighet hhv $|c_1|^2$ og $|c_2|^2$.

Hvis målingen gav (f.eks) E_2 , så er

$$\Psi(x, t) = \Psi_2(x, t) \quad \text{for } t > t_1.$$

Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

Standardavvik er et vanlig mål for usikkerhet i en fysisk størrelse:

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

Hensiktsmessig omskriving:

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

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}} \quad \text{Standardavviket i størrelsen } x$$

For posisjon og impuls (postulat C):

$$\langle x^n \rangle = \int \Psi^* x^n \Psi dx = \int x^n |\Psi|^2 dx$$

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

Eks: Med "gaussisk" starttilstand

$$\Psi(x, 0) = C \cdot e^{-\alpha(x-x_0)^2} \cdot e^{i p_0 x / \hbar} \quad \text{fås (øving 2)}$$

$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$, som er minste teoretiske verdi for uskarphetsproduktet $\Delta x \cdot \Delta p$.

For to vilkårlige fysiske størrelser A og B , (60)
med QM operatorer $\hat{A}$ og $\hat{B}$, kan en vise at

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

der $[\hat{A}, \hat{B}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ = kommutatoren mellom $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Eks: $\hat{A} = \hat{x} = x$, $\hat{B} = \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Vi beregner $[\hat{x}, \hat{p}]$ ved å la den virke på en funksjon $\Psi(x)$.

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] \Psi(x) &= x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (x \Psi(x)) \\ &= \frac{\hbar}{i} x \frac{d\Psi}{dx} - \frac{\hbar}{i} \Psi - \frac{\hbar}{i} x \frac{d\Psi}{dx} = i\hbar \Psi(x) \end{aligned}$$

Dvs, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, som gir

$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \cdot |\langle i\hbar \rangle| = \hbar/2$, som er Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Merk: Hvis $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, er $\Delta A \cdot \Delta B \geq 0$,
dvs det er (teoretisk) mulig å måle både

A og B helt nøyaktig, samtidig. Eks: $[x, \hat{p}_y] = 0$
 $\Rightarrow x$ og p_y kan måles nøyaktig samtidig

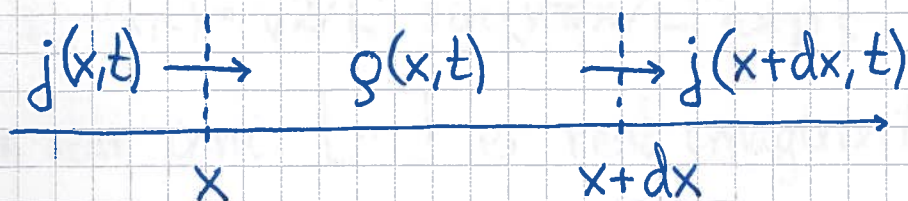
(61)

Sannsynlighetsstrøm og -bevarelse

Sanns. tetthet: $g(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$, med enheten
 $[g] = 1/m$ i 1D. ($1/m^3$ i 3D)

Normering: $\int_{-\infty}^{\infty} g(x,t) dx = 1$

Hvis g endrer seg et sted, må det skyldes en netto strøm (inn eller ut) av sannsynlighet her:



Sanns. strøm ved pos. x ved tid t : $j(x,t)$,
 med enhet $[j] = [\text{sanns.} / \text{tid}] = 1/s$ i 1D.
 ($\frac{\text{sanns.}}{\text{tid} \cdot \text{flate}}$ i 3D, enhet $1/s \cdot m^2$)

Sanns. bevarelse er nå uttrykt via en såkalt
kontinuitetsligning for sannsynlighet:

$$\boxed{\frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0} \quad 1D$$

(Vi har tilsvarende kont.lign. for ladning i
 elektromagnetisme, for masse i hydrodynamikk, etc.)

Det er "rett fram" å vise at SL,
 $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$, med $\rho = \Psi^* \Psi$ gir
 sanns. bevarelse, med sanns. strøm

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

Eks 1: Stasjonær tilstand i 1D boks ; $j_n = ?$

Løsn: $\Psi_n(x,t) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L) \exp(-iE_n t/\hbar)$

Det som står inni [...] er rent imaginært $\Rightarrow j_n = 0$

Som ventet: Ingen netto strøm knyttet til stående bølger.

Eks 2: Fri partikkel, $\Psi(x,t) = e^{ikx} \cdot e^{-iEt/\hbar}$.

Løsn: $\partial \Psi / \partial x = ik \cdot \Psi$

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

Som ventet. (Her ble $[j] = \text{m/s}$ fordi vi brukte en dimensjonsløs Ψ .)

Tidsutvikling av forventningsverdier

Fra SL følger at (så lenge $\partial \hat{A} / \partial t = 0$)

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

Hvis $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, er $\langle A \rangle$ en bevægelseskonstant.

Eks: Fri partikkel, $\Psi(x) = e^{ipx/\hbar}$; $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = ?$

Nå er $\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m$, slik at $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$,

dvs $\langle p \rangle = p = \text{konstant}$

Klassiske bevægelsesligninger i 1D:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} ; \quad \frac{dp}{dt} = - \frac{dV}{dx} (= F)$$

I QM har vi tilsvarende lign. for $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$.

Vi må regne ut $[\hat{H}, x]$ og $[\hat{H}, \hat{p}]$, med

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \hat{p}^2 / 2m + V(x):$$

$$[\hat{H}, x] = \frac{1}{2m} [\hat{p}^2, x] + \underbrace{[V(x), x]}_{=0}$$

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

$$\Rightarrow \underline{\frac{d\langle x \rangle}{dt}} = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} (-2i\hbar) \langle \hat{p} \rangle = \underline{\frac{\langle p \rangle}{m}}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}] = \frac{1}{2m} \underbrace{[\hat{p}^2, \hat{p}]}_{=0} + [V(x), \hat{p}] = [V(x), \hat{p}]$$

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

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

Oppsummert er dette Ehrenfests teorem:

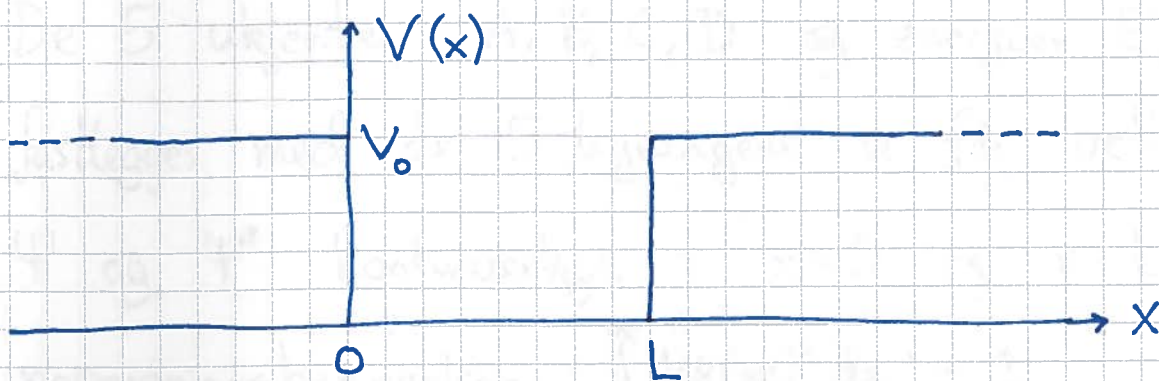
$$\boxed{\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} ; \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle}$$

evt. i 3D:

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m} ; \quad \frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = \langle -\nabla V \rangle$$

Eksempler og anvendelser

Endelig potensialbrønn



$V(x) = 0$ for $0 < x < L$; $V(x) = V_0$ ellers
(Relevans: Halvledere. Nanoteknologi.)

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

$$\Rightarrow \Psi''(x) = \begin{cases} -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(x) & ; \quad 0 < x < L \\ \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \Psi(x) & ; \quad \text{ellers} \end{cases}$$

Med $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ og $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ blir bundne tilstander, med $E < V_0$, på formen

$$\Psi(x) = \begin{cases} C \sin kx + D \cos kx & ; \quad 0 < x < L \\ A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} & ; \quad \text{ellers} \end{cases}$$

Må her velge $\psi(x) = A e^{\kappa x}$ for $x < 0$ (66)

og $\psi(x) = B e^{-\kappa x}$ for $x > L$, for å unngå
at $|\psi| \rightarrow \infty$ når $|x| \rightarrow \infty$.

De 5 ukjente, A, B, C, D og energien E ,
fastlegges med de 5 ligningene vi får ved å kreve
 ψ og ψ' kontinuerlige i $x=0$ og $x=L$, samt
normeringsbetingelsen $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$.

Gir symmetriske $\psi(x)$ med energier bestemt ved

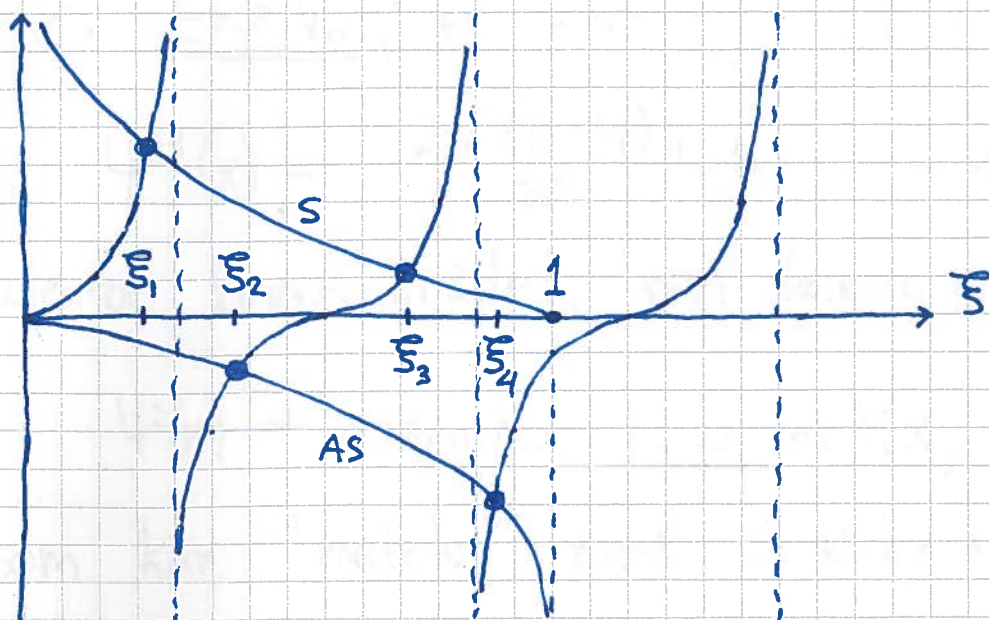
$$\tan(kL/2) = \kappa/k$$

og antisymmetriske $\psi(x)$ med energier bestemt ved

$$\tan(kL/2) = -\kappa/k$$

Disse kan ikke løses "på lukket form", men
kan framstilles grafisk. Innfører den dim.løse
størrelsen $\xi = \sqrt{E/V_0} < 1$, som gir ligningene

$$\tan\left(\xi \cdot \frac{\sqrt{2mV_0} L}{2\hbar}\right) = \begin{cases} \sqrt{1-\xi^2}/\xi & ; \text{ symm.} \\ -\xi/\sqrt{1-\xi^2} & ; \text{ antisymm.} \end{cases}$$



- Alltid minst 1 bundet tilstand
- Vekselvis $S, AS, S, \dots$ for økende energi
- Flere bundne tilstander jo dypere og bredere brønn
- Her: 4 bundne tilst. med energi $E_n = V_0 \cdot \xi_n^2$
- Merk at $|\psi|^2 > 0$ også utenfor brønnen, der $E < V$: Partikkelen kan "besøke" det klassisk forbudte området!

Hvis $E > V_0$, er

$$\psi''(x) = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \psi(x) = -K^2 \psi(x)$$

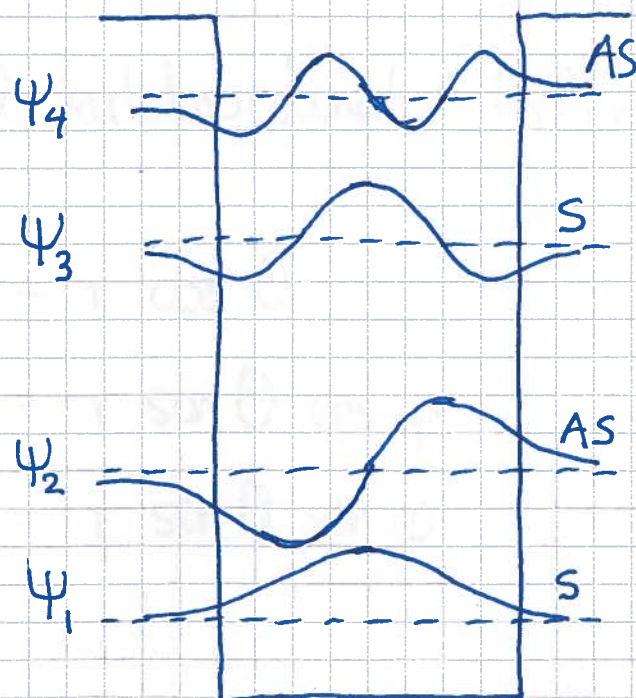
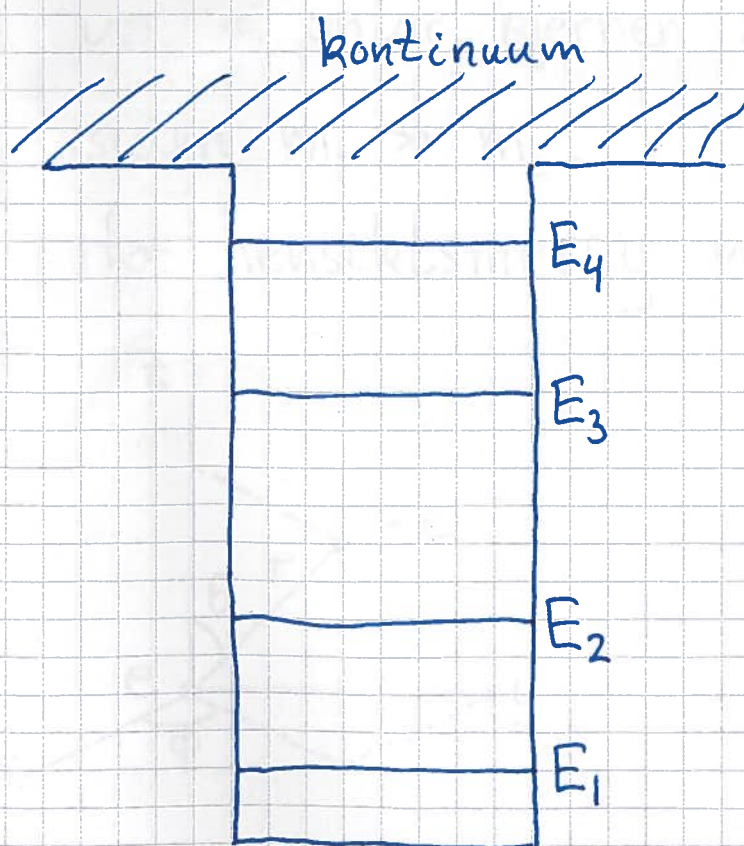
utenfor brønnområdet, med løsning

$$\psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx,$$

som kan "matches" med $C \sin kx + D \cos kx$

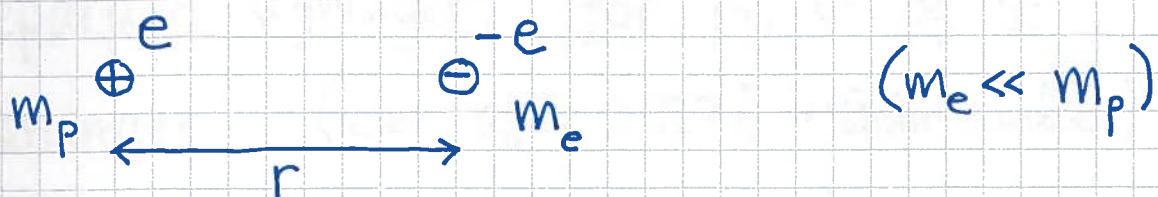
(dvs ψ og ψ' begge kontinuerlige i $x=0$ og $x=L$)

for alle verdier av $E > V_0$. Dvs, vi har et kontinuerlig energispektrum for $E > V_0$.



Coulombpotensialet

Vi gjør som Schrödinger og ser på H-atomet:



$$V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (\text{kulesymmetrisk})$$

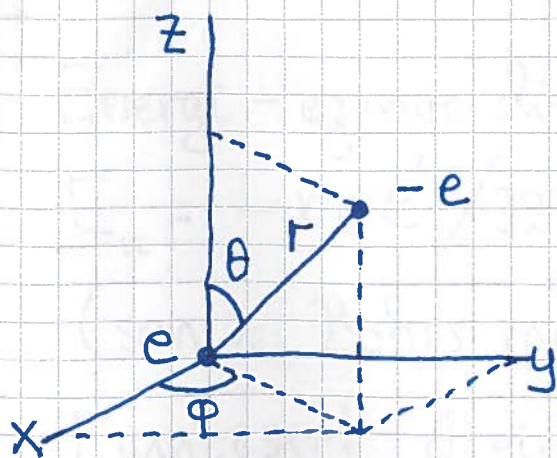
$$\text{TUSL: } \hat{H}\psi = E\psi$$

med

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Dvs, vi antar kjernen i ro; OK tilnærme siden $m_p \gg m_e$.

Her hensiktsmessig med kulekoordinater (r, θ, φ) :



$$z = r \cos \theta$$

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

Schrödinger løste TUSL; vi nøyer oss med å se nærmere på løsningen.

TUSL har produktløsninger

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

med separate ligninger for R , Θ og Φ
og løsninger (der $a_0 \approx 0.529 \text{ \AA} = \text{Bohr-radien}$)

$$R_{n\ell}(r) = e^{-r/na_0} \cdot \{\text{polynom i } r/a_0\}$$

$$\Theta_{\ell m_\ell}(\theta) = \text{polynom i } \sin \theta \text{ og/eller } \cos \theta$$

$$\Phi_{m_\ell}(\varphi) = e^{i m_\ell \varphi}$$

Dvs tre kvantetall n, ℓ, m_ℓ :

$n = 1, 2, 3, \dots$ = hovedkvantetallet

$\ell = 0, 1, \dots, n-1$ = dreieimpulskvantetallet

$m_\ell = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell$ = det magnetiske kvantetallet

Energi - egenverdier:

$$E_n = -m_e e^4 / 32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2 \approx - \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

(som i Bohrs modell)

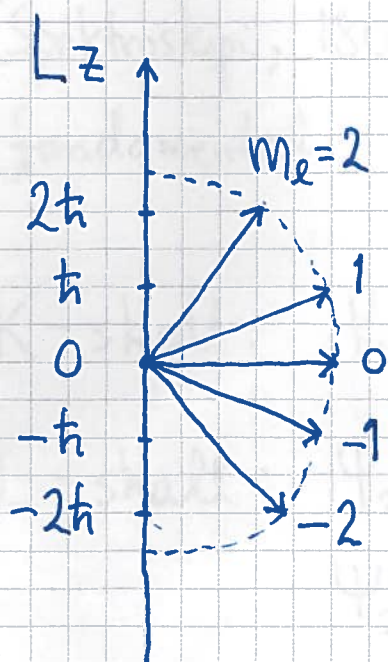
Kvantisert dreieimpuls:

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{\ell(\ell+1)} \hbar = 0, \sqrt{2} \hbar, \sqrt{6} \hbar, \dots, \sqrt{n(n-1)} \hbar$$

Kvantisert en komponent av $\vec{L}$, her valgt (71)
i z-retning:

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

Eks: Hvis $l=2$, er $L = \sqrt{6} \hbar$, og L_z kan ha 5 ulike verdier.



Hvis H-atomet befinner seg i en gitt tilstand Ψ_{nlm_l} , betyr det at både E , L og L_z er skarpe samtidig. Da må $\hat{H}$, $\hat{L}$ og $\hat{L}_z$ kommutere innbyrdes (s.60), noe de gjør! (Så lenge V er isotrop, $V = V(r)$.)

Men: Med skarp L_z er både L_x og L_y uskarpe!

$\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ og $\hat{L}_z$ kommuterer ikke innbyrdes:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x,$$

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

Notasjon:

(72)

n	1	2	3	4	...
skall	K	L	M	N	

Økende $n \Rightarrow$ økende utstrekning: $\langle \frac{1}{r} \rangle^{-1} = n^2 a_0$

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

(Spektroskopi, 1800-tallet: sharp, principal, diffuse, fundamental; deretter alfabetisk)

K-skall: $\psi_{100} = 1s$

L-skall: $\psi_{200} = 2s$

$\psi_{21-1}, \psi_{210}, \psi_{211} = 2p$

M-skall: $\psi_{300} = 3s$

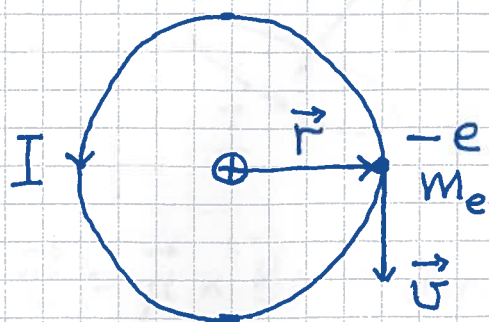
$\psi_{31-1}, \psi_{310}, \psi_{311} = 3p$

$\psi_{32-2}, \psi_{32-1}, \psi_{320}, \psi_{321}, \psi_{322} = 3d$

Degenerasjonsgrad: $g_n =$ antall ulike tilstander

$\psi_{n\ell m_\ell}$ med lik energi E_n ; $g_1=1, g_2=4, g_3=9, \dots$

dvs $g_n = n^2$.

Elektroner i magnetfelt: spinn

Strøm: $I = \frac{q}{T} = \frac{e}{\frac{2\pi r}{v}} = \frac{ev}{2\pi r}$

Dreieimpuls: $L = r m_e v$

Magnetisk dipolmoment:

$$\mu = IA = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{1}{2} evr$$

$$\Rightarrow \vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

Gyromagnetisk forhold: $\mu/L = e/2m_e$

Bohr: $L = n\hbar$; $n=1, 2, 3, \dots$

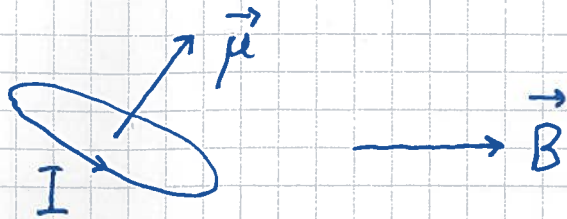
$$\Rightarrow \mu = n \cdot \frac{e\hbar}{2m_e} = n \cdot \mu_B$$

med $\mu_B = e\hbar/2m_e = 1$ Bohr-magneton
 $\approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^2$

Schrödinger: $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$; $l = 0, 1, \dots, n-1$

$$L_z = m_l \hbar \quad ; \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

Magnetisk dipol i magnetfelt $\vec{B}$: (FY6017) (74)



$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \text{dreiemoment på dipolen}$$

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \text{dipolens potensielle energi}$$

$\Rightarrow$ lavest energi med $\vec{\mu} \parallel \vec{B}$

$$\vec{F} = -\nabla V = \nabla (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \text{kraft på dipolen}$$

$\Rightarrow \vec{F} = 0$ i uniformt $\vec{B}$ -felt

Zeeman - effekten (P. Zeeman 1897; NP 1902):

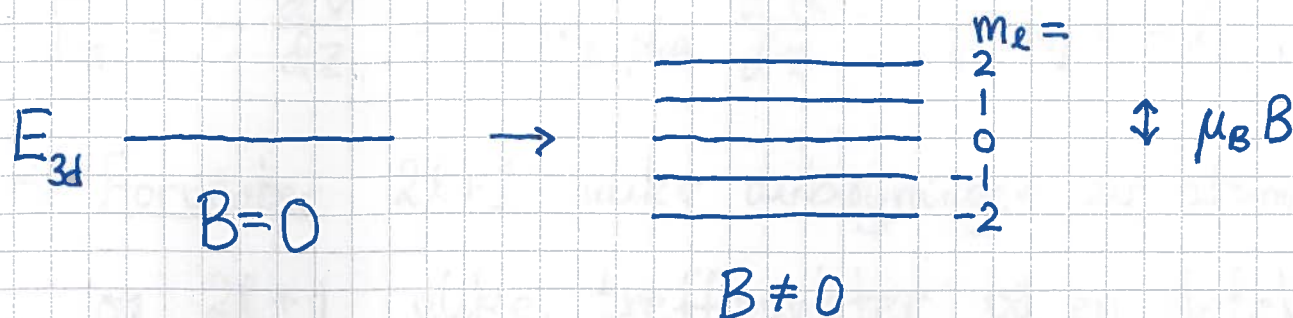
Hvis H-atomer med $\vec{\mu} = (-e/2m_e) \vec{L}$ plasseres i magnetfelt $\vec{B} = B \hat{z}$, har de et bidrag til pot. energi,

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} L_z B = m_l \cdot \frac{eh}{2m_e} \cdot B = m_l \mu_B B$$

der $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Gir oppsplitting av energinivåer med $l > 0$, i $2l+1$ nivåer.

$$E_{ks}: 3d; l=2; m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$

(75)



Liten (men målbar) effekt:

Med $B = 1 \text{ T}$ (et ganske sterkt magnetfelt) er

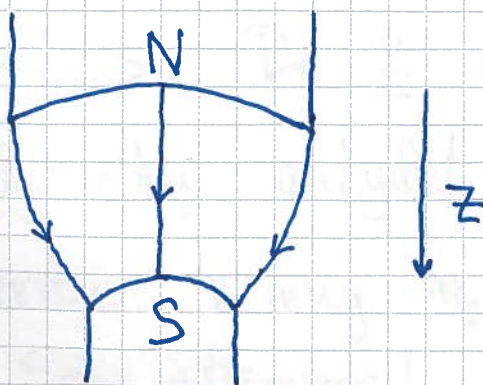
$$\Delta E = \mu_B B = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J} \approx 6 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

Til sammenligning er f.eks.

$$E_{3d} - E_{2p} = 13.6 \text{ eV} \cdot \left(-\frac{1}{3^2} + \frac{1}{2^2} \right) \approx 2 \text{ eV}$$

Stern - Gerlach - eksperimentet
(1922; O. Stern NP 1943):

Sendte (sølv-)atomer gjennom område med
inhomogent magnetfelt $\vec{B}(z)$:



Kraft på atomene:

$$F_z = - \frac{dV}{dz} = - m_\ell \mu_B \frac{dB_z}{dz} \quad ; \quad m_\ell = -l, \dots, 0, \dots, l$$

⇒ Forventer $2l+1$ ulike avbøyninger av atomene og $2l+1$ ulike treffpunkter på en detektor plassert bak magneten.

Ekspementene gav 2 treffpunkter (striper)!

Goudsmit og Uhlenbeck foreslo (i 1925) at elektronet har en indre dreieimpuls - et spinn - $\vec{S}$, med et tilhørende magnetisk dipolmoment $\vec{\mu}_s$. I analogi til en kvantisert (bane-)dreieimpuls med $L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$ og $L_z = m_\ell \hbar$, med $m_\ell = -l, \dots, 0, \dots, +l$, foreslo de at spinnet også er kvantisert, med

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar \quad \text{og} \quad S_z = m_s \hbar$$

med $m_s = -s, \dots, s$. De 2 avbøyningene i Stern-Gerlach-eksp. antydte at m_s bare har 2 mulige verdier, nemlig $m_s = -1/2$ og $m_s = 1/2$, ders $s = 1/2$. Som stemmer!

Kommentarer :

- "Klassisk" forventer vi nå at $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e} \vec{S}$
(siden $\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$)
- Eksperimenter gir $\vec{\mu}_s \approx -\frac{e}{m_e} \vec{S}$; meget gode
exp. gir gyromagnetisk faktor

$$g_s = 2.002319304374 \pm 8 \cdot 10^{-12}$$

når vi skriver

$$\vec{\mu}_s = g_s \cdot \left(\frac{-e}{2m_e}\right) \vec{S}$$

- Relativistisk QM (dvs Dirac-ligningen)
gir $g_s = 2$.

- Kvanteelektrodynamikk (QED) gir

$$g_s = 2.00231930$$

- Også protonet og nøytronet er "spinn- $\frac{1}{2}$ -partikler",
med $s = \frac{1}{2}$ og $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Gyromagnetisk faktor
er hhv $g_p = 5.59$ og $g_n = -3.83$, dvs

$$\vec{\mu}_p = 5.59 \cdot \frac{e}{2m_p} \vec{S}_p ; \quad \vec{\mu}_n = -3.83 \cdot \frac{e}{2m_n} \vec{S}_n$$

- Total dreieimpuls for elektron i tilstand med dreieimpulskvantetall l :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

med kvantisert $J = |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)} \hbar$

og $J_z = m_j \hbar$; $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$

Her kan $\vec{S}$ peke i (mer eller mindre) samme retning som $\vec{L}$ eller (mer eller mindre) motsatt retning av $\vec{L}$, slik at $j = l + 1/2$ eller $j = l - 1/2$. (Bare $j = 1/2$ dersom $l=0$.)

Eks: H-atom med elektronet i en tilstand med $l=1$. Da er $j = 1/2$ eller $j = 3/2$.

Hvis derimot atomet er i grunntilstanden, dvs

ψ_{100} , er $l=0$. Da er $j = 1/2$ og $\vec{J} = \vec{S}$

og $J_z = S_z$, dvs $m_j = m_s = \pm j = \pm s = \pm 1/2$,

som vi typisk betegner hhv "spinn opp" ($m_s = 1/2$)

og "spinn ned" ($m_s = -1/2$).

Pauliprinsippet

Elektroner (og andre typer elementærpartikler) er identiske : Ombytte av to elektroner har ingen målbar konsekvens. Dermed :

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

der 1 og 2 representerer koordinatene til elektron nr 1 og 2, $1 \hat{=} (\vec{r}_1, s_1)$ og $2 \hat{=} (\vec{r}_2, s_2)$.

To muligheter :

Bosoner : Symmetrisk Ψ ved ombytte $1 \leftrightarrow 2$

$$\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$$

Eks: Fotonet

Fermioner : Antisymmetrisk Ψ ved ombytte $1 \leftrightarrow 2$

$$\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$$

Eks: Elektronet, protonet, nøytronet

Et system med to elektroner kan da beskrives med bølgefunksjonen

$$\Psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Phi_i(1) \Phi_j(2) - \Phi_i(2) \Phi_j(1) \}$$

der Φ_i og Φ_j er to vilkårlige enpartikkeltilstander.

Da ser vi at dersom de to elektronene er i samme enpartikkeltilstand, dvs $\phi_i = \phi_j$, så blir $\Psi_A(1,2) = 0$!!

Konklusjon:

I et system med to (eller flere) elektroner må alle elektronene befinne seg i ulike enpartikkeltilstander.

Dette er Paulis eksklusjonsprinsipp.

Vi må huske at hver enpartikkeltilstand ϕ_j avhenger av både romlige koordinater $\vec{r}$ og spinnkoordinaten s , dvs

$$\phi_j(\vec{r}, s) = \psi(\vec{r}) \cdot \chi_{m_s}(s)$$

med romlig orbital $\psi(\vec{r})$ og spinnfunksjon $\chi_{m_s}(s)$.

For elektroner er $s = 1/2$ og $m_s = \pm 1/2$.

Det innebærer at hver romlige orbital $\psi(\vec{r})$ kan kombineres med $\chi_{1/2}$ og $\chi_{-1/2}$, og dermed okkuperes av inntil 2 elektroner.

Atomer og det periodiske system

(81)

For H-atomet "løste" vi TUSL og fant de romlige orbitalene $\Psi_{nlm_l}(\vec{r})$, dvs Ψ_{100} (1s), Ψ_{200} (2s), Ψ_{21-1} , Ψ_{210} , Ψ_{211} (2p) osv.

For atomer med to eller flere elektroner klarer vi ikke å løse TUSL eksakt, men numeriske løsningsmetoder viser at vi får en lignende "struktur" som i H-atomet, med en kulesymmetrisk 1s-tilstand med lavest energi osv. I følge Pauliprinsippet vil da f.eks He-atomet, med 2 elektroner, ha en grunntilstand med begge elektronene i denne 1s-tilstanden, ett med spinn opp ($\chi_{1/2}$) og ett med spinn ned ($\chi_{-1/2}$). Totalt spinn i He-atomet er derfor null, og siden begge elektronene har $l=0$, blir total dreieimpuls for de to elektronene lik null.

Vi angir elektronkonfigurasjonen til He som $1s^2$.

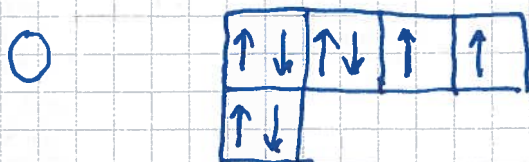
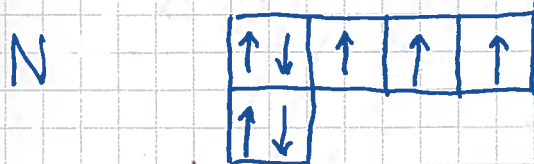
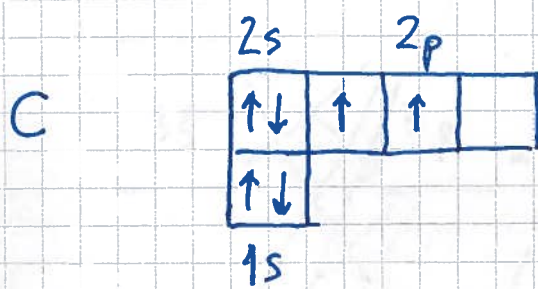
Li har tre elektroner; nr 3 kan ikke være i 1s-orbitalen, men må okkupere orbitalen med nest lavest energi, 2s. Gir elektronkonfig. for Li : $1s^2 2s$

Os: Be $1s^2 2s^2$
 B $1s^2 2s^2 2p$
 C $1s^2 2s^2 2p^2$

- He (2 e.), Ne (10), Ar (18), Kr (36), Xe (54)
 Har fylte skall, elektronkonfig. hhv $1s^2$,
 $1s^2 2s^2 2p^6$, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$
 $4s^2 4p^6$
 og $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$
 Har lite ønske om å dele sine elektroner med andre
 atomer. Er derfor edelgasser; lite reaktive.
- Li, Na, K, ...
 Ett svakt bundet elektron i ytterste skall, som lett
 kan avgis / deles med et annet atom, f.eks. et halogen.
- F, Cl, Br, ...
 Halogener. Mangler ett elektron i ytterste skall, tar
 gjerne i mot et elektron, f.eks. fra Li, Na, K, ...
 (Høy elektronegativitet.)
 ⇒ Danner salter som NaCl, LiF osv

- Tilfeldig at E ikke avhenger av l (bare n) (83)
i H-atomet. I atomer med to eller flere elektroner
er $E_{2s} < E_{2p}$ osv. Ofte er $E_{4s} < E_{3d}$ osv,
men ikke alltid.
- Hund's regel: Grunntilstanden i et atom har
så stort totalspinn som mulig, bare Pauliprinsippet
er oppfylt.

Eks:



Begrunnelse: Lavest totalenergi oppnås med å
minimere frastøtningen mellom elektronene. Oppnås med
så antisymmetrisk romlig (orbital) bølgefunksjon som
mulig. Da må spinn delen være så symmetrisk som mulig,
som oppnås med mest mulig parallelle spinn.

Utvalgsregler for strålingsoverganger

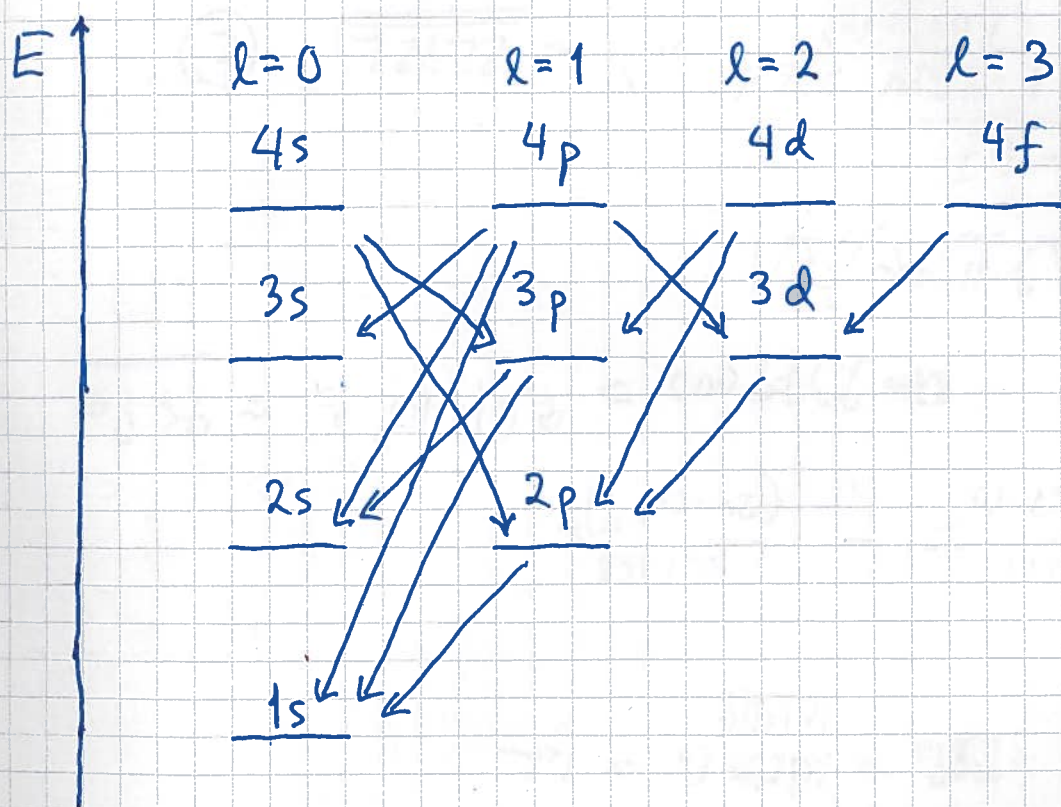
Fotonet er en partikkel med heltallig spinn lik 1.

Når et atom absorberer eller emitterer et foton, må systemets totale dreieimpuls være bevart. Tillatte "overganger"

oppfyller utvalgsreglene

$$\Delta l = \pm 1 ; \Delta m_l = 0, \pm 1$$

Nivåskjema for H-atomet:



Levetid for elektron i $2p$: ca 1 ns

—————"————" $2s$: ca 0.1 s ($\approx \infty$)

Balmer-serien: Fra $n > 2$ til 2

Lyman —"——: Fra $n > 1$ til 1

Paschen —"——: Fra $n > 3$ til 3

Fra atomer til molekyler og faste stoffer



H-atom: Elektronet i atomær orbital $1s$ (ψ_{100}) med spin opp ($\chi_{1/2}; \uparrow$) eller ned ($\chi_{-1/2}; \downarrow$)

H_2 -molekyl: Elektronene i molekylorbitaler, inntil to i en gitt orbital, ett $\uparrow$ og ett $\downarrow$.

Ikke mulig å regne ut eksakte molekylorbitaler, men rimelig å uttrykke dem som lineærkombinasjoner av atomære orbitaler i H-atomet.

Ψ = molekylorb. (MO) = enpartikkeltilstand i molekylet

ϕ = atomær orb. (AO) = ——— " ——— atomet

Pga symmetrien til H_2 -molekylet må vi lage symmetriske

$|\Psi|^2$ av ϕ_{1s} i de to H-atomene:

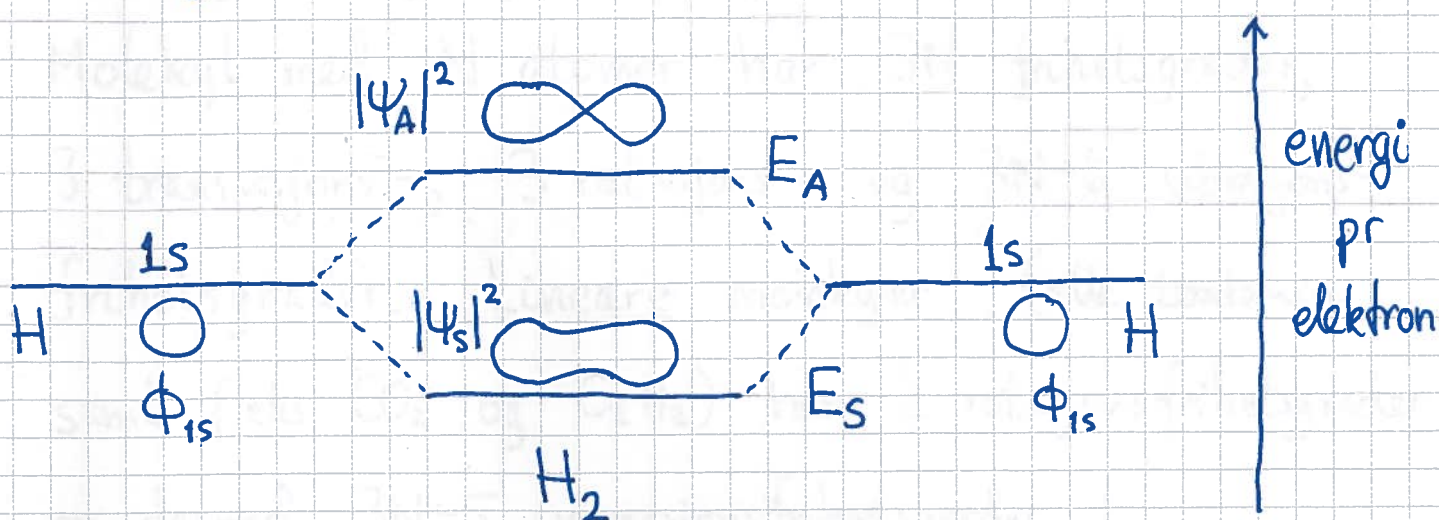
$$\Psi_S = \phi_{1s}^{(1)} + \phi_{1s}^{(2)} = \text{"bindende" MO}$$

$$\Psi_A = \phi_{1s}^{(1)} - \phi_{1s}^{(2)} = \text{"antibindende" MO}$$

Grunntilstanden i H_2 er da begge elektroner i den MO som har lavest energi, ett $\uparrow$ og ett $\downarrow$.
Beregninger gir $E_S < E_A$.

Energidiagram :

(86)



Fra "partikkel i boks" : Økende energi med økende antall nullpunkter i $\psi(x)$.

Tilsvarende for MO : Økende energi med økende antall "nodeplan" (dvs: der $\psi=0$).

Her har ψ_S ingen nodeplan, mens ψ_A har ett
 $\Rightarrow E_S < E_A$

Stabilt molekyl H_2 fordrer at

$$\Delta E = E(H_2) - 2E(H) < 0$$

Exp. er $\Delta E \approx -4.5 \text{ eV}$, som blir bindingsenergien til H_2 -molekylet.

Molekyler og spektroskopi

Molekyl med N atomer har $3N$ frihetsgrader, 3 translasjons-, 3 rotasjons- og $3N-6$ vibrasjonsfriehtsgrader. Lineære molekyler (alle ~~toatomige~~, samt f.eks. CO_2 og C_2H_2) har 2 rotasjonsfriehtsgrader og dermed $3N-5$ vibrasjonsfriehtsgrader.

Translasjon:

Kvantisert energi K_{trans} i f.eks. en liten potensialboks, men normalt et kontinuert spektrum for K_{trans} .

Rotasjon:

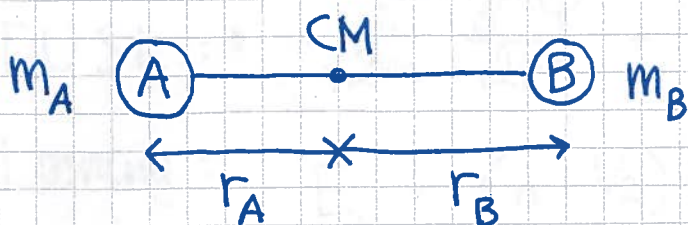
Kvantisert energi K_{rot} fordi dreieimpulsen er kvantisert:

$L = I\omega$; I = treghetsmoment, ω = vinkel fart

$$K_{\text{rot}} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} I (L/I)^2 = L^2 / 2I$$

Siden $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ (med $l=0,1,2,\dots$) er

$$K_{\text{rot}}^{(l)} = l(l+1)\hbar^2 / 2I$$



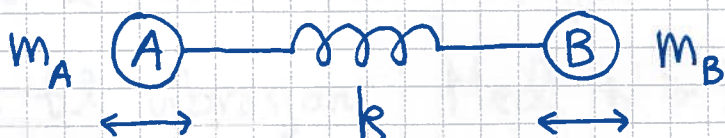
$$I = m_A r_A^2 + m_B r_B^2$$

Eks: CO; $K_{\text{rot}}^{(l)} = l(l+1) \cdot 0.24 \text{ meV}$
 $= 0, 0.48 \text{ meV}, 1.44 \text{ meV}, \dots$

Uttalgsregel ved absorpsjon/emisjon av foton: $\Delta l = \pm 1$

Vibrasjon:

Enklest å se på toatomig molekyl:



Tilnærmet en enkel harmonisk oscillator med potensial

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (k = m \omega^2)$$

der x = avviket fra likevekts-bindingslengden

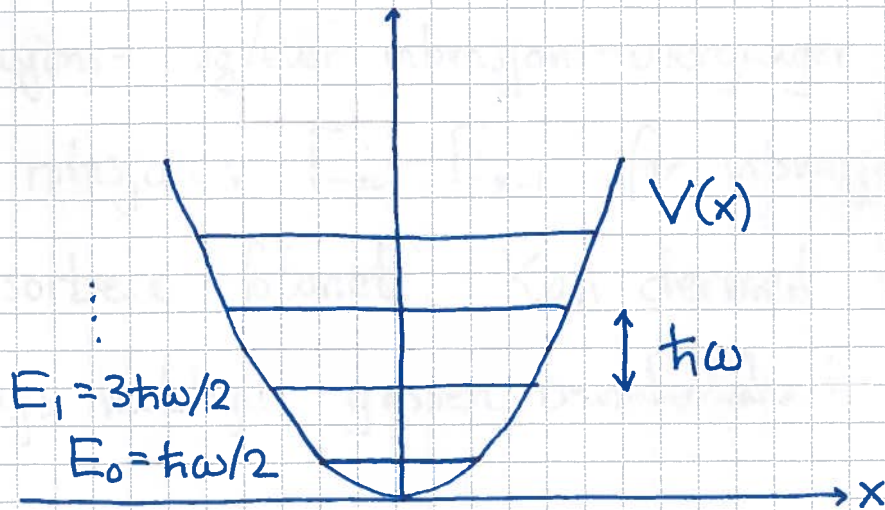
$$m = m_A \cdot m_B / (m_A + m_B) = \text{molekylets}$$

reduserte masse (kun relativ bevegelse
 avgjør verdien av x)

$$\text{TUSL: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (89)$$

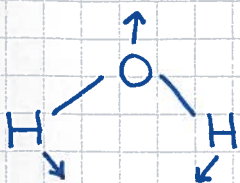
Løsning: $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$; $n = 0, 1, 2, \dots$

(se f.eks. PCH 3.5 for tilhørende bølgefunk. $\psi_n(x)$)



Med $N=2$ atomer har molekylet kun $3N-5 = 1$ frihetsgrad knyttet til vibrasjon. Med $N \geq 3$ atomer kan molekylet vibrere i $3N-6$ (evt $3N-5$) såkalte normale moder (da de ulike vibrasjonsbevegelserne på sett og vis er ortogonale).

Eks: H_2O ; $N=3 \Rightarrow 3N-6 = 9-6 = 3$ normale moder



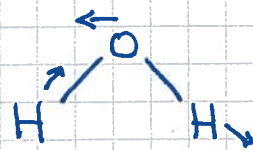
"bøy"

$$\frac{1}{\lambda} \approx 1600 \text{ cm}^{-1}$$



"symmetrisk strekk"

$$\approx 3700 \text{ cm}^{-1}$$



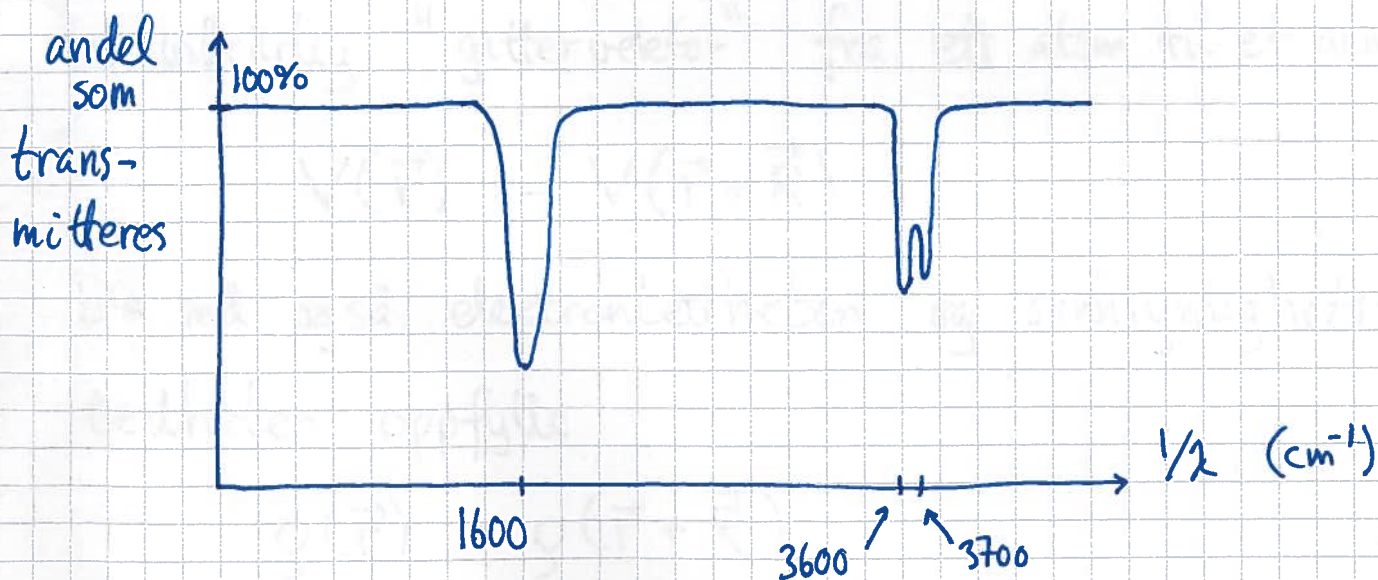
"asymmetrisk strekk"

$$\approx 3600 \text{ cm}^{-1}$$

Ultralgsregel ved absorpsjon/emisjon av foton: $\Delta n = \pm 1$ (90)

Spektroskopi: Send EM-bølger (fotoner) inn mot gass av molekyler. Hvis fotonenergien t.w "matcher" rotasjons- og/eller vibrasjons-overganger (dvs $E_l - E_{l-1}$ for rotasjon; $E_n - E_{n-1}$ for vibrasjon), vil gassen absorbere fotonet. Kan dermed finne ut hva slags molekyler gassen inneholder!

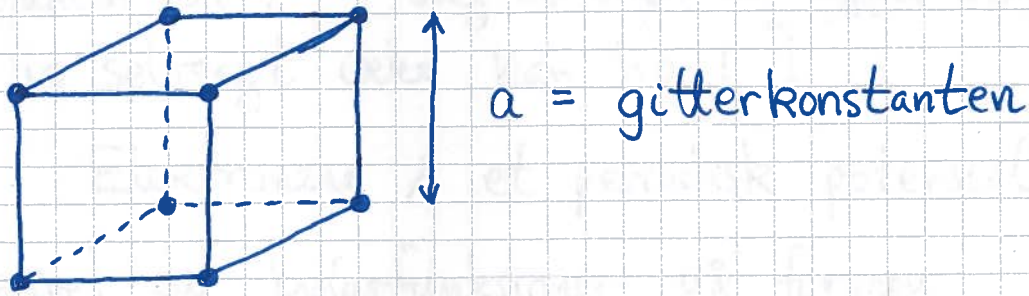
Eks: EM-bølger med "alle mulige" bølglengder inn mot vanndamp



Faste stoffer: Elektroner i periodisk potensial

Antar perfekte krystaller med atomene i faste posisjoner i et regulært gitter.

Eks: Enkelt kubisk gitter



I slike krystaller må potensialet være det samme i en posisjon $\vec{r}$ og en pos. $\vec{r} + \vec{R}$, der $\vec{R}$ er en vilkårlig "gittervektor" fra ett atom til et annet:

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$$

Da må også elektrontettheten og sannsynlighetstettheten oppfylle

$$g(\vec{r}) = g(\vec{r} + \vec{R}),$$

der $g(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|$; $\Psi(\vec{r}) =$ bølgefunksjon

Må da generelt ha bølgefunksjoner på formen

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\alpha(\vec{r})} \cdot u(\vec{r})$$

med reell $\alpha(\vec{r})$ og $u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R})$.

Dessuten må α være en dimensjonsløs, skalar og lineær funksjon av $\vec{r}$, generelt på formen

$$\alpha(\vec{r}) = \vec{k} \cdot \vec{r}$$

[Ikke-lineær $\alpha(\vec{r}) \Rightarrow$ valg av origo får fysisk betydning, noe vi selvsagt ikke kan ha!]

Dvs: Elektronene i et periodisk potensial beskrives av bølgefunksjoner på formen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

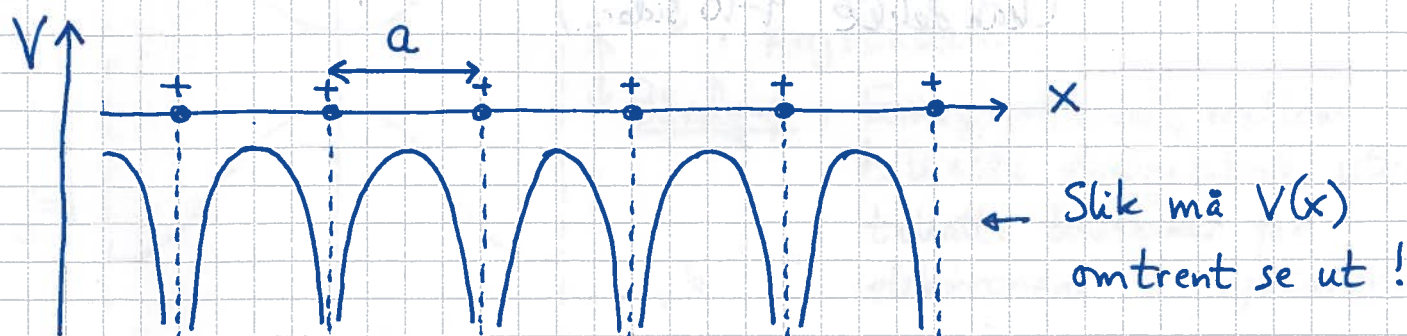
med
$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Dette er Blochs teorem; en grunnpillær i teorien for faste stoffer!

[Felix Bloch, NP 1952]

Foreløpig er $\vec{k}$ kun en "nødvendig parameter", med enhet $1/m$. I mange situasjoner viser det seg at $\vec{k}$ representerer elektronets impuls, dvs $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

Vi forenkler til 1D, og spør oss hva slags løsninger vi nå finner ved å løse TUSL.



N atomer, gitterkonstant a ; $N \rightarrow \infty$

$$V(x+a) = V(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_k(x) = E(k) \Psi_k(x)$$

$$\Psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

TUSL, for gitt k , gir energi-egenverdier

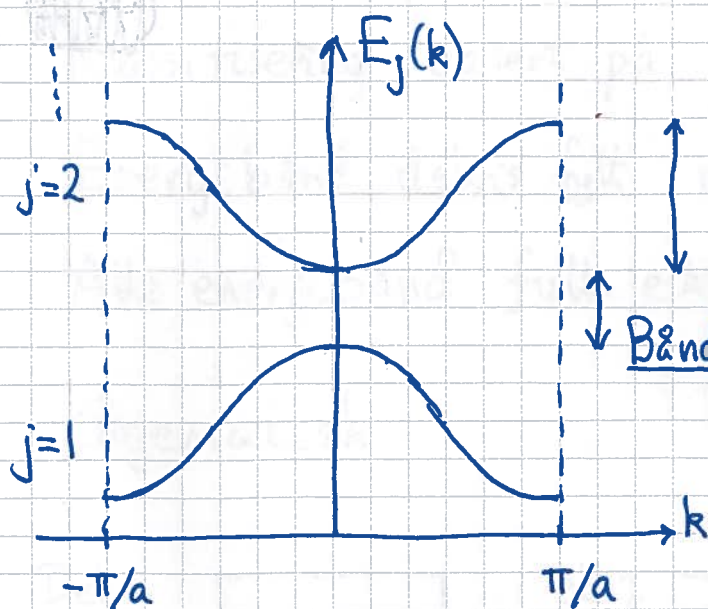
$E_1(k), E_2(k), E_3(k), \dots$ (som for partikkel i boks)

Endring av $k \Rightarrow$ endrede $E_j(k)$ ($j=1,2,3,\dots$)

Med N atomer er det N tillatte verdier av k mellom $-\pi/a$ og $+\pi/a$. Med stor N ($N \rightarrow \infty$) blir

hver $E_j(k)$ en kontinuerlig funksjon av k .

Kan se f.eks. slik ut:



Energibånd med tillatte energier for elektronene i krystallen.

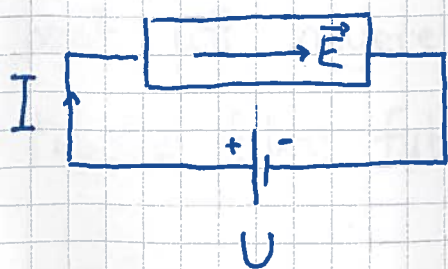
Båndgap: Energiintervall, mellom tillatte energibånd, uten tillatte tilstander for elektronene i krystallen.

Krystallens grunntilstand: Vi okkuperer tilstander, med to elektroner i hver (romlige) tilstand, i tråd med Pauliprinsippet, og fra lavest mulig energi og oppover.

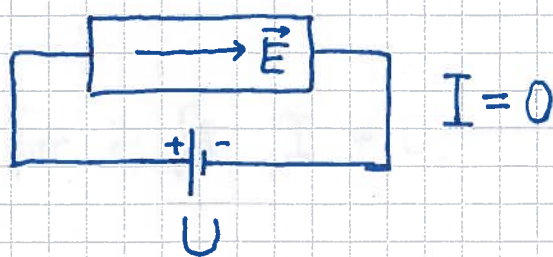
Metall, isolator eller halvleder?

Empirisk:

Metall hvis lite el. felt $\vec{E}$ gir strøm I .



metall

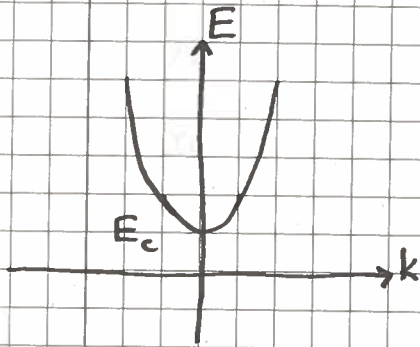


ikke-metall (isolator)

Effektiv masse

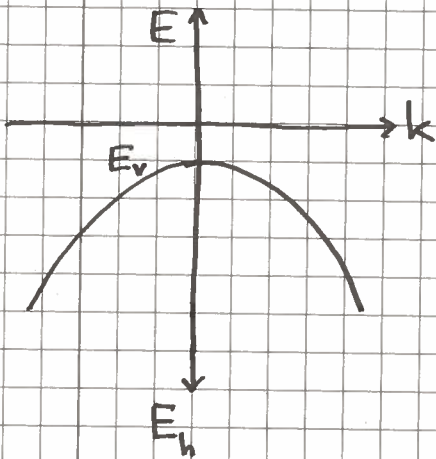
94A

- Nær båndkantene, dvs bunnen av ledningsbåndet og toppen av valensbåndet, er $E(k)$ med god tilnærming kvadratisk i k :



$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} = \text{elektronenergi i ledningsbåndet}$$

Elektronets effektive masse m_e^* gitt ved invers krumning: $m_e^* = \hbar^2 \left[\frac{d^2 E}{dk^2} \right]^{-1} > 0$



$$E(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} = \text{elektronenergi i valensbåndet; positiv oppover}$$

$$\Rightarrow E_h(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} = \text{hullenergi i valensbåndet; positiv nedover}$$

Hullets effektive masse m_h^* gitt ved

invers krumning:

$$m_h^* = \hbar^2 \left[\frac{d^2 E_h}{dk^2} \right]^{-1} > 0$$

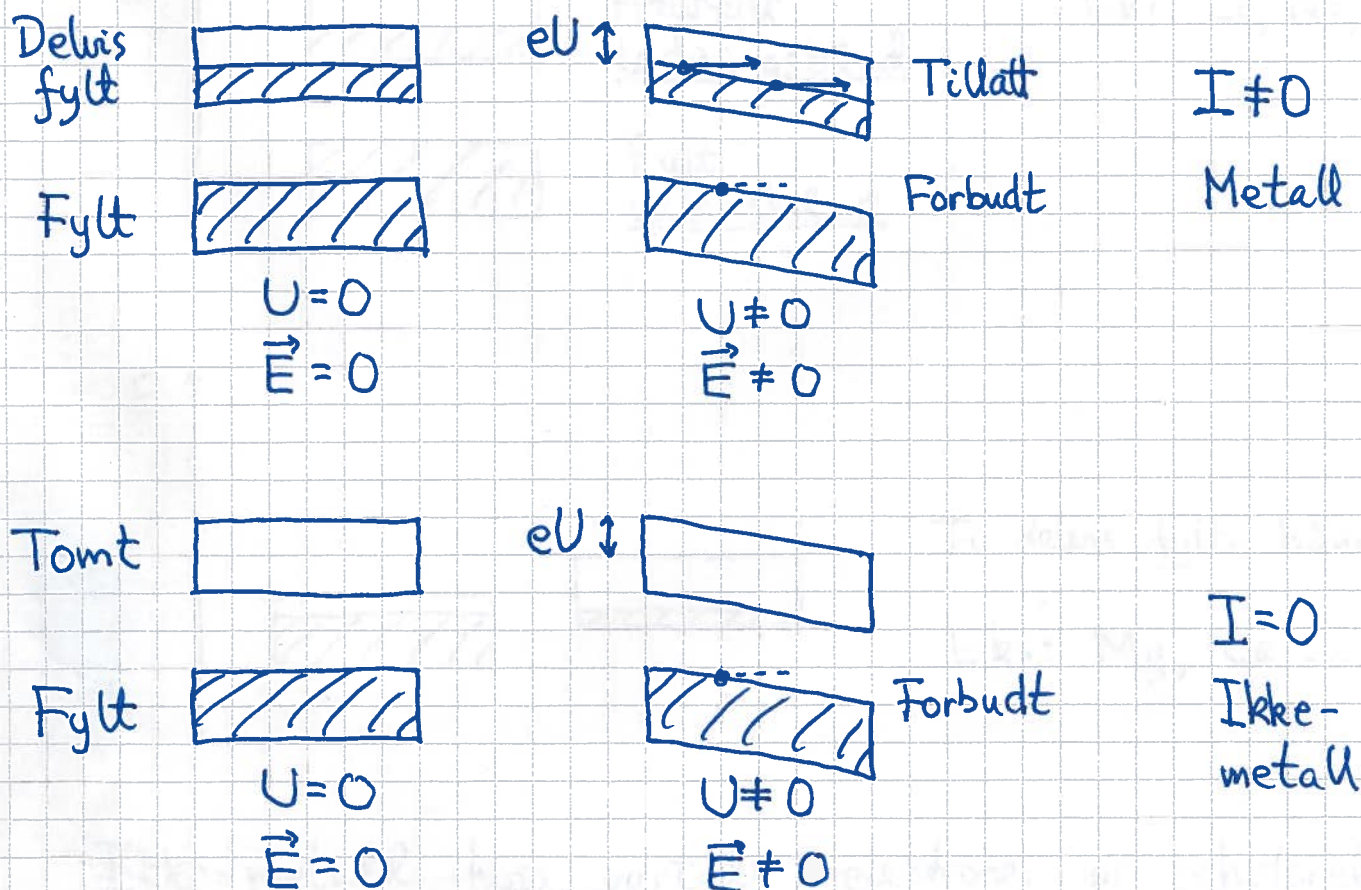
Partiklene (elektronene og hullene) beskrives av båndstruktur ($E(k)$ og $E_h(k)$) nær båndkantene som er "fri-partikkel-lignende", men de er ikke frie partikler: Det periodiske potensialet påvirker partiklene på en slik måte at de effektivt oppfører seg som om de har masse forskjellig fra $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg. Typisk er $m^* \sim 0.1 m_e$.

Klassifisering basert på båndstruktur:

Energibånd delvis fylt med elektroner: Metall

Alle energibånd fulle eller tomme: Ikke-metall

Skjematisk:

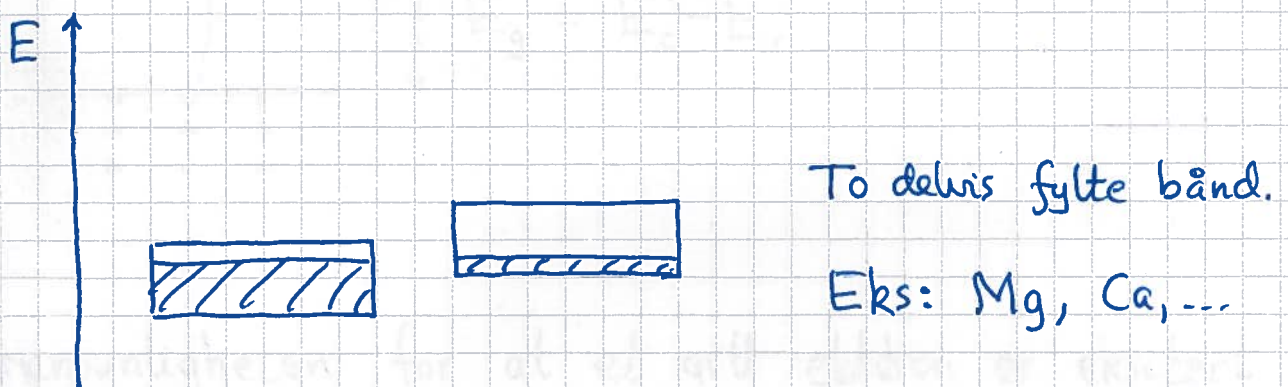


$\vec{E}$ kan bare gi elektroner økt kinetisk energi, og dermed strøm I , dersom det er ledige tilstander med litt høyere energi.

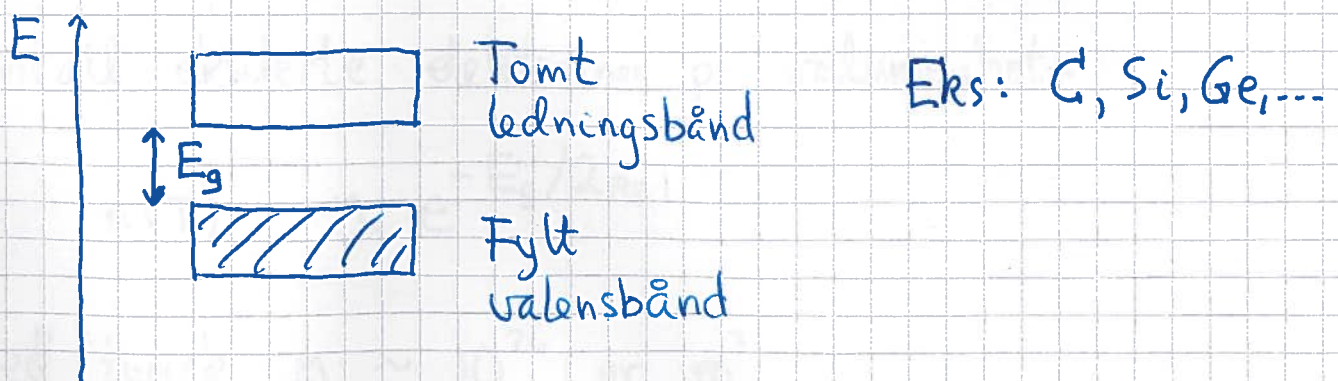
Må ha delvis fylt(e) bånd for å få $I \neq 0$.

Med N enhetsceller har vi $2N$ tilstander pr energibånd (faktor 2 pga spinn $\uparrow$ eller $\downarrow$).

$\Rightarrow$ Metall hvis oddetall elektroner pr enhetscelle (evt. overlappende energibånd):



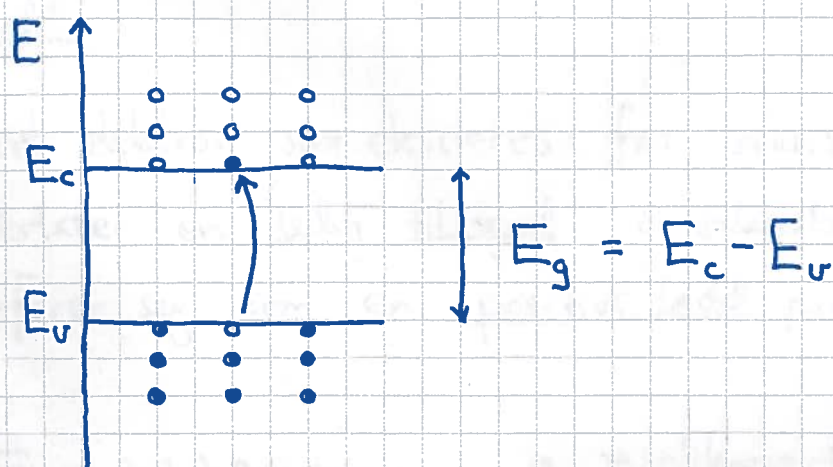
Ikke-metall hvis partall elektroner pr enhetscelle (uten overlappende bånd):



Størrelsen på båndgapet, E_g , avgjør om vi har isolator eller halvleder.

Halvledere $T = 0$: isolator $T = 300\text{ K}$: en andel av elektronene er termisk eksitert fra toppen av valensbåndet til ledige tilstander ved bunnen av ledningsbåndet

Skjematisk :



Sannsynligheten for at et gitt elektron er eksitert fra E_v (toppen av valensbåndet) til (bunnen av ledningsbåndet) E_c ved temperatur T :

$$e^{-E_g/2k_B T}$$

Antall eksiterte elektroner pr volumenhet:

$$n(T) = n_0 e^{-E_g/2k_B T}$$

med typisk $n_0 \sim 10^{26}$ pr m^3

Eks: Gruppe IV (evt. 14?), ved 300 K

C (diamant): $E_g = 5.47 \text{ eV} \Rightarrow n = 0 \Rightarrow \text{isolator}$

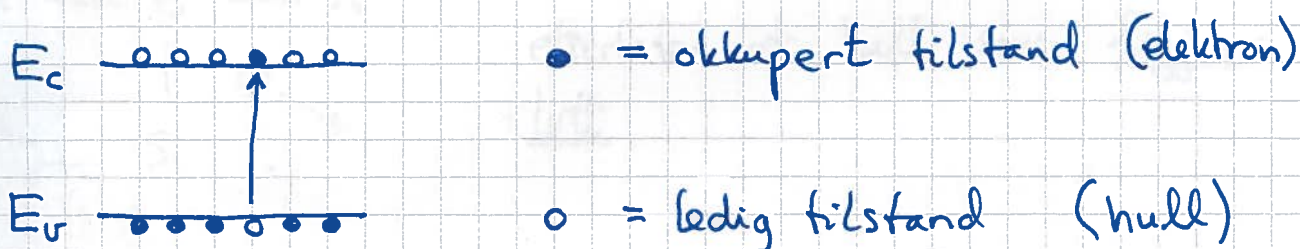
Si: $E_g = 1.12 \text{ eV} \Rightarrow n \approx 10^{16} \text{ m}^{-3} \Rightarrow \text{halvleder}$

Ge: $E_g = 0.67 \text{ eV} \Rightarrow n \approx 10^{20} \text{ m}^{-3} \Rightarrow \text{---''---}$

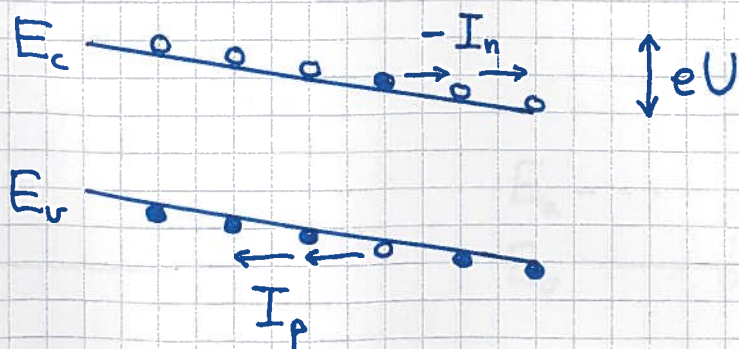
Belegnes halvleder dersom $E_g \lesssim 3 \text{ eV}$.

Hull

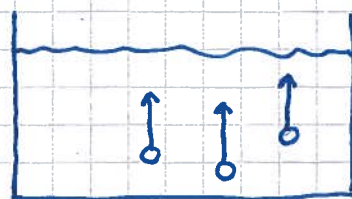
Hvert elektron som eksiteres fra valens- til ledningsbåndet etterlater en ledig tilstand i valensbåndet; denne oppfører seg som en positivt ladd partikkel; kalles et hull.



Påtrykt spenning U gir nå strøm av elektroner (I_n) og hull (I_p):



Analogi:
Gassbobler i vann

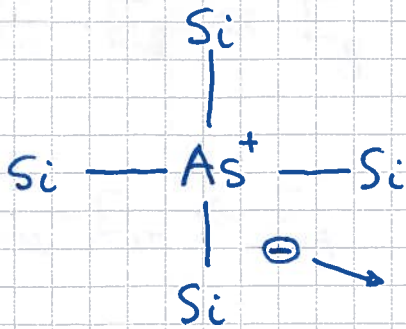


Gass opp $\hat{=}$
Vann ned

Total strøm: $I = I_n + I_p$

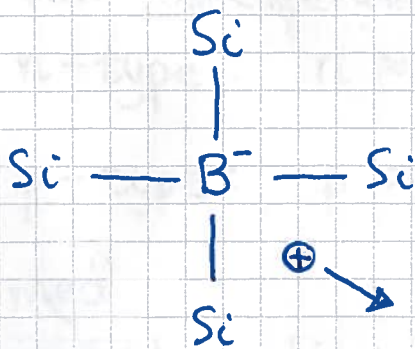
Doping av halvledere

n-type Si: Noen Si erstattes av As (evt P), som har 5 valenselektroner, mot 4 i Si.



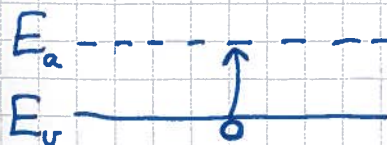
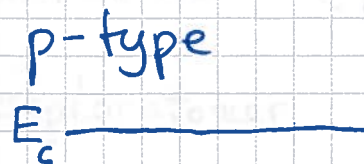
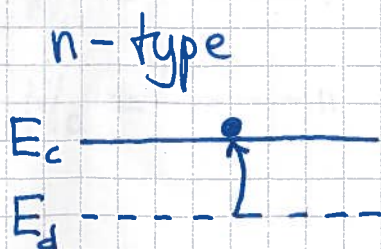
"Det femte" valenselektronet i As frigjøres lett og etterlater As^+

p-type Si: Noen Si erstattes av B (evt Al), som har 3 valenselektroner, mot 4 i Si.



B "plukker opp" ett elektron fra valensbåndet i Si ($\Rightarrow B^-$), etterlater et hull som frigjøres lett

Energidiagram:



$E_d = \text{donornivå} = \text{energi til 5. valenselektron i As}$ (100)

$E_a = \text{akseptornivå} = \text{energi til ledig tilstand i B}$

$E_c - E_d \ll E_g \Rightarrow$ Mye lettere å frigjøre elektron fra As enn å eksitere ett fra E_v til E_c

$E_a - E_v \ll E_g \Rightarrow$ Mye lettere å skape hull i valensbåndet ved å eksitere elektron fra E_v til E_a , enn å eksitere fra E_v til E_c

Ved romtemperatur:

n-type: $n \approx N_d \gg p \Rightarrow I \approx I_n$

p-type: $p \approx N_a \gg n \Rightarrow I \approx I_p$

med

$n =$ konsentrasjon av elektroner i ledningsbåndet

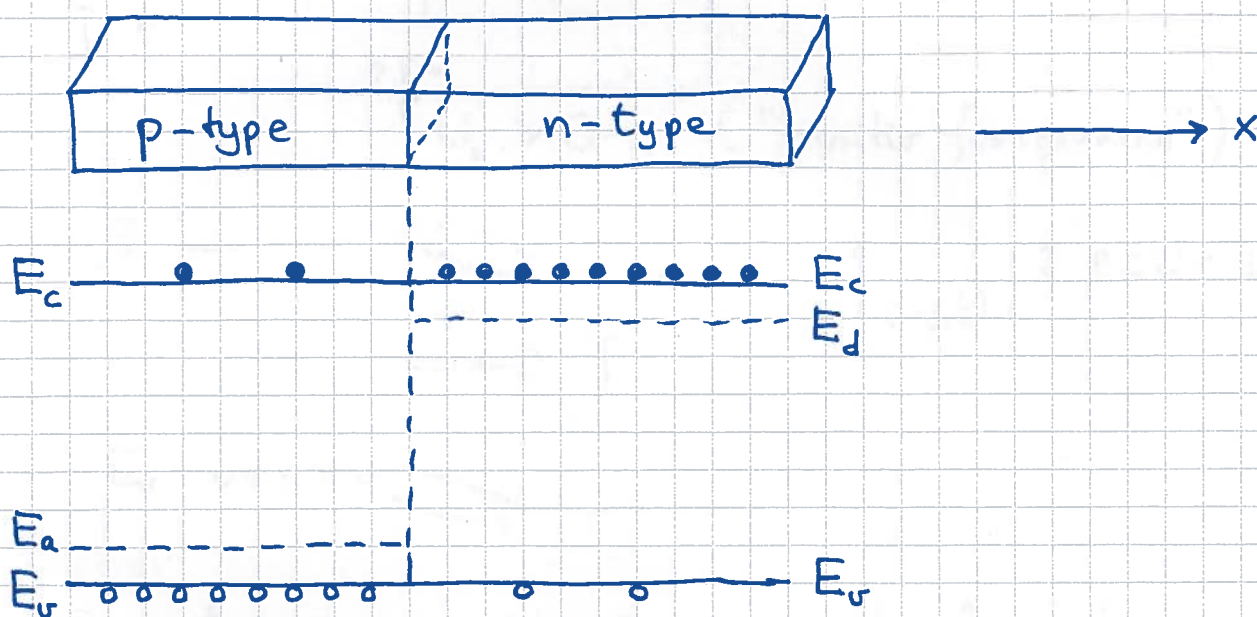
$p =$ —||— hull i valensbåndet

$N_d =$ —||— donoratomer (f.eks. As)

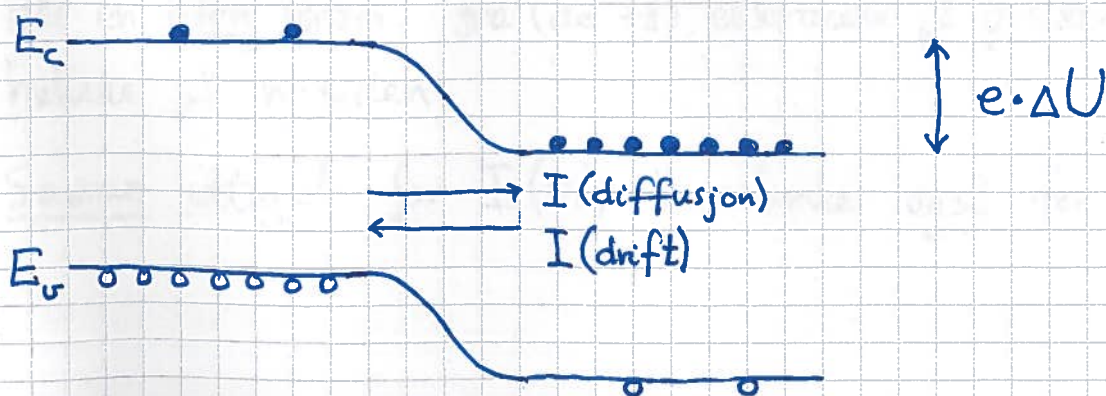
$N_a =$ —||— akseptoratomer (f.eks. B)

pn-overgangen (dioden!)

(101)

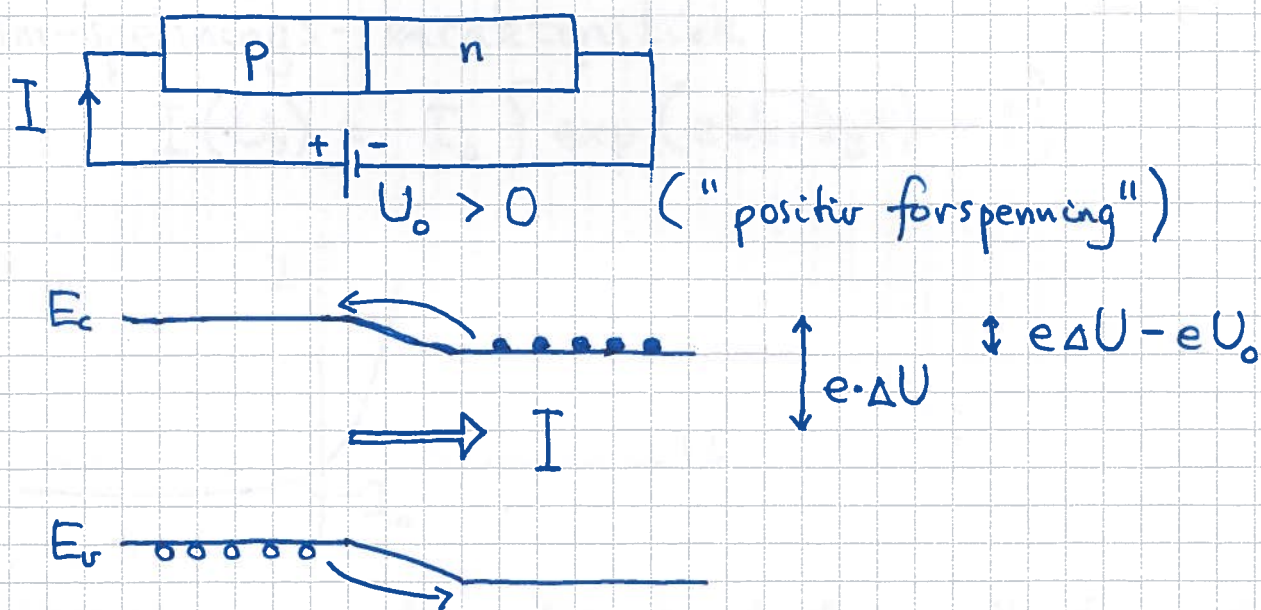


- ⇒ Får en diffusjonsstrøm av elektroner fra n til p og hull fra p til n.
- Gir negativt ladet p-side og positivt ladet n-side.
- Gir "innebygd" elektrisk felt $\vec{E}$ og potensial $U(x)$, med $\vec{E} = -\hat{x} dU/dx$; $\vec{E}$ fra n-siden mot p-siden
- Får en driftsstrøm pga $\vec{E}$
- Likevekt når $I(\text{diffusjon}) + I(\text{drift}) = 0$
- Energibånd i likevekt:



Vi kobler til en spenningskilde U_0 :

(102)



- $U_0 > 0$ reduserer energibarrieren som hindrer strømmen, fra $e \Delta U$ til $e \Delta U - e U_0$.

- Strømmen øker proporsjonalt med Boltzmann-faktoren $\exp\{-(-e U_0)/k_B T\} = \exp\{e U_0/k_B T\}$

- Likevekt, dvs $I=0$, hvis $U_0 = 0$.

- Dermed må $I(U_0)$ være på formen

$$I(U_0) = I_0 \{ \exp(e U_0 / k_B T) - 1 \}$$

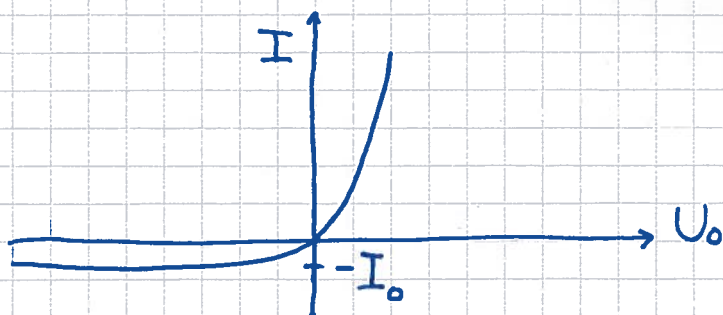
- Hvis $U_0 < 0$ ("negativ forspenning") øker energibarrieren med $e \cdot |U_0|$, dvs fra $e \Delta U$ til $e \Delta U + e |U_0|$

- Får en liten strøm, fra (de få) elektronene på p-siden og (de få) hullene på n-siden

- Samme uttrykk for $I(U_0)$ kan brukes også for $U_0 < 0$

Vi har et nytt kretselement - dioden - med strøm-spennings-karakteristikk

$$I(U_0) = I_0 \{ \exp(eU_0/k_B T) - 1 \}$$



Fungerer som en likeretter: Leder godt fra p til n, leder dårlig fra n til p.

Kretssymbol:



Selve grunnlaget for moderne elektronikk!

Mye mer om dette i FY6018 etter jul!

