

26.01.15

①

FY6019 Moderne fysikk, våren 2015

- Young & Freedman (YF) kap. 37 - 44
- P.C. Hemmer "Kvantemekanikk" (PCH) kap 1-5, 8-10, 14
- I. Øverbø, notater (ØS)
- J.A. Størneng, håndskrevne notater
- Artikler
- Oppgaver
- Verktøy: Matematikk, Programmering

Vurderingsordning: Eksamen 70%, Arbeider 30%

Relevant bakgrunn:

- Mekanikk (6013)
- Elektromagnetisme (6017)
- Bølger (6016, 6020)
- Termodynamikk (6014)
- Spesiell relativitetsteori (6015)
- Matematikk (funksjoner, vektorer, derivasjon, integrasjon, differensialligninger, komplekse tall, trigonometri, rekurrentlikninger, ...)

YF, tema:

37: Relativitetsteori. Dekket i FY6015 Astronomi.
Repeteres etter behov.

38, 39: "Lyspartikler" og "partikkelbølger". Innledning til kvantemekanikken. Fotoelektrisk effekt. Interferens med elektroner etc. [PCH 1; ØS 1]

40: Grunnleggende kvantemekanikk i en dimensjon. Schrödingerligningen [PCH 2, 3; ØS 2, 3]

41: Atomer [PCH 5, 9; ØS 5]

42: Molekyler. Faste stoffer. Anvendelser [PCH 10; ØS 6]

43: Kjernefysikk. Radioaktivitet. Stråling. Fisjon. Fusjon

44: Partikkelfysikk

~~~~~

Kompetansemål i VGS Fysikk 1 og 2, noen stikkord:

Bohrs atommodell, spektrallinjer, fisjon, fusjon, bruk av bevaringslover, standardmodellen, halvledere, doping, diode, transistor, fotoelektrisk effekt, Compton-spredning, partiklers bølgenatur, elementærpartikler, Heisenbergs uskarphetsrelasjon, sammenfiltrede fotoner, fysiske prinsipper bak røntgen, ultralyd og magnetisk resonans.

~~~~~


Innledning til kvantemekanikk

③

[YF 38, 39 ; PCH 1 ; ØS1] [NP : Nobel Prize]

Klassisk fysikk ca 1900 :

- Newtons lover [I. Newton, 1687]. Galileisk relativitet
- Termodynamikk. Statistisk mekanikk. [W. Thomson (Lord Kelvin), 1854 ; L. Boltzmann, 1875 ;]
- Lys er bølger. Maxwells ligninger. [J. C. Maxwell, 1865 ; H. R. Hertz, 1887]
- Materie er partikler. Atomer (gresk: udelelig). Elektronet, med negativ ladning, i jevnt fordelt positiv ladningsfordeling. "Rosinbollemodell". [J. J. Thomson, 1897, NP 1906]

Problemer med klassisk fysikk (før og etter 1900) :

- Lijnespektre: Ulike stoffer absorberer og emitterer elektromagnetisk (EM) stråling med bestemte bølgelengder. Eksempler:

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

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

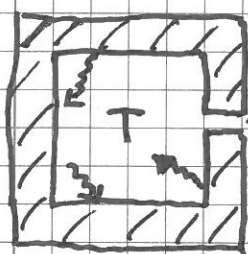
H, Balmer-serien, $\lambda = 410, 434, 486$ og 656 nm
i synlig del av spekteret [J. Balmer, 1885]
Teori/Modell: N. Bohr, 1913, NP 1922 (mer senere)

- Lysets hastighet (i vakuum) er den samme i alle inertialsystemer, uansett deres relative bevegelse.
Dvs: Galileisk relativitet holder ikke for lys.

Exp: Michelson [NP 1907] & Morley, 1887

Teori: A. Einstein, 1905 (Spesiell Rel. teori (SR))

- Stråling fra svart legeme:



Hulrom med
liten åpning

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

$\Rightarrow I(\nu, T) \cdot \Delta\nu =$ utstrålt effekt pr
flateenhet mellom ν og $\nu + \Delta\nu$

EM stråling inn mot legeme kan absorberes, reflekteres
eller transmitteres, med andeler a , r og t

$$\Rightarrow a + r + t = 1$$

Svart legeme: $a = 1$ ($r = t = 0$)

Termisk likevekt: Absorbert energi = Emittert energi

$\Rightarrow a(\nu) = e(\nu) = 1$ for svart legeme i likevekt

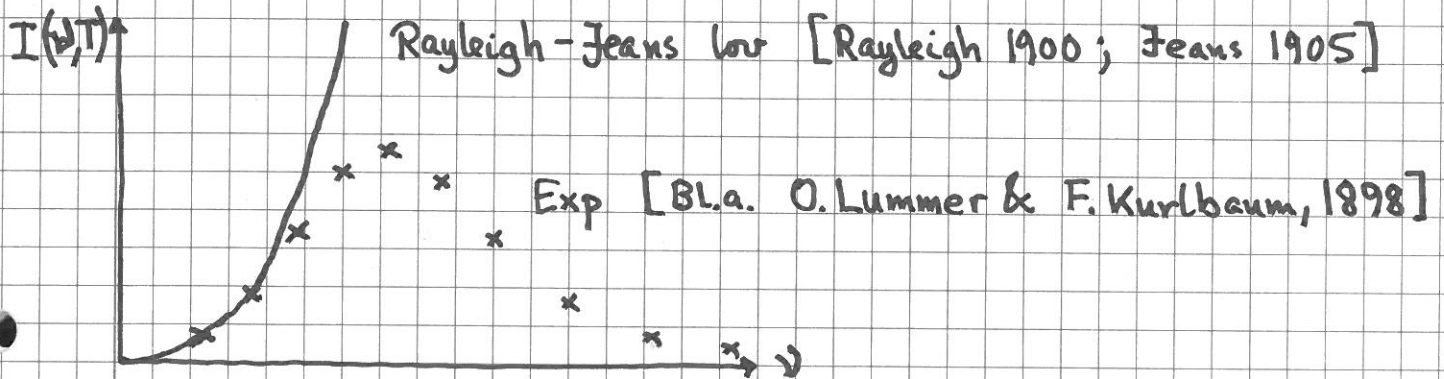
$e =$ legemets emissivitet

27.01.15

(5)

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

[Stående EM bølger i hulrommet, "svingemoder",
midlere energi $k_B T$ pr svingemode ved temperatur T ,
i følge det klassiske ekvipartisjonsprinsippet.]



$I(\nu, T) \sim \nu^2$ OK for små ν (lange bølgelengder λ),
men gir total energistøm $j(T) = \int_0^\infty I(\nu, T) d\nu \rightarrow \infty$!
("ultrafiolett katastrofen"; $I \rightarrow \infty$ når $\lambda \rightarrow 0$.)

Max Planck, 1900, NP1918 ("i desperasjon"):

Kvantisert strålingsenergi ved frekvens ν :

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

Plancks
kvantehypotese

Gir $I(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$; stemmer med
målingene når $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34}$ Js.

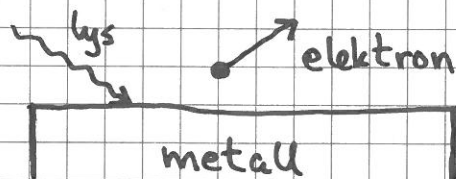
Merk at Plancks $I(\nu, T)$ gir det klassiske resultatet
for lave frekvenser (evt høye T), dvs $h\nu \ll k_B T$.

[Vis dette!]

(6)

Fotoelektrisk effekt:

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

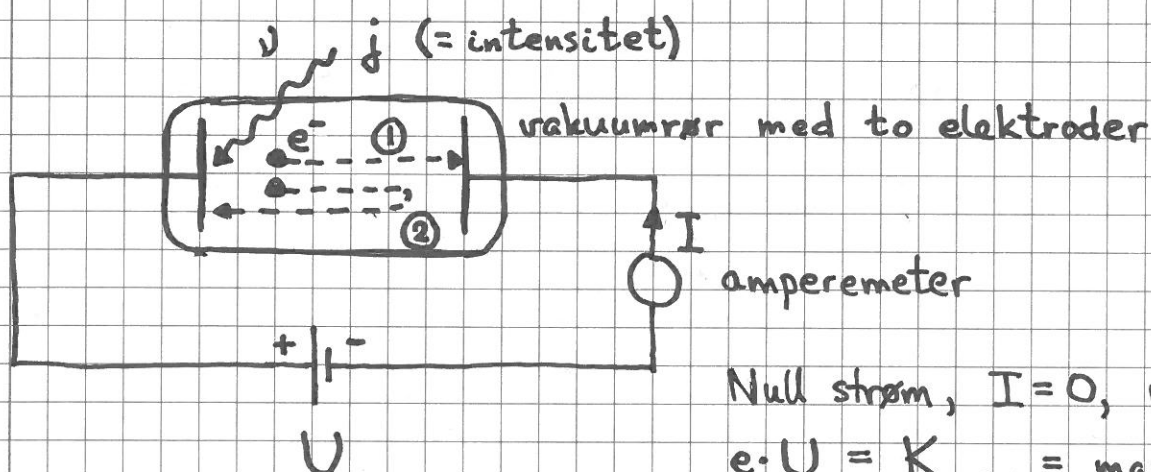


Exp:

H. Hertz, 1887

P. Lenard, 1900

R. Millikan, 1914 (NP 1923)



Null strøm, $I = 0$, når
 $e \cdot U = K_{\max} = \text{max kinetisk energi for løsrevne elektroner.}$
 ($U = \text{terskelspenning}$)

Med klassisk teori:

Lysets intensitet j (energi pr tids- og flateenhet) er uavhengig av frekvensen ν . (YF 32.4)

⇒ Forventer fotoel. effekt uavh. av ν , og I uavh. av ν .

Elektronene er bundet til metallet; det kreves en minste-energi W , frigjøringsarbeidet, for å løsrive elektroner.

⇒ Forventer en viss tid for å få $I > 0$ hvis j er tilstrekkelig liten.

Energi absorbert av elektroden øker med økende j .

⇒ Forventer økt $K_{\max}$, og dermed økt terskelspenning U ,

dersom j øker. Med j uavhengig av ν forventes U å være uavhengig av ν . (7)

Klassisk teori er helt feil.

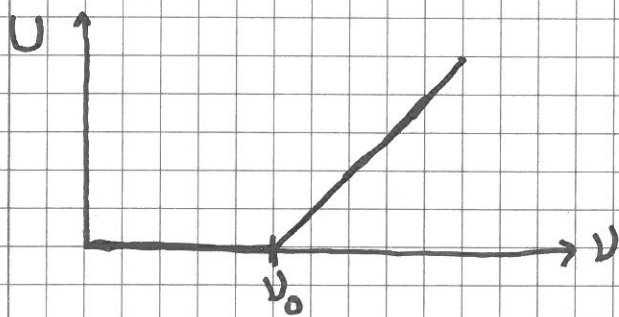
Ekperimentelt:

Strøm I avhenger av frekvensen ν . Monokromatisk lys med $\nu < \nu_0$ (= terskel-frekvensen) gir $I = 0$, uavh. av j .

Med $\nu > \nu_0$ blir $I > 0$ umiddelbart.

Terskelspenningen U avhenger av ν , men ikke av j .

$U = 0$ hvis $\nu < \nu_0$. U øker lineært med ν hvis $\nu > \nu_0$:



(Milliken, 1914, NP1923)

A. Einstein, 1905, NP1921:

Energien i lyset kommer i diskrete porsjoner, prop. med frekvensen: $E = h\nu$, med samme (universelle) konstant $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34}$ Js, som introdusert av Planck i 1900.

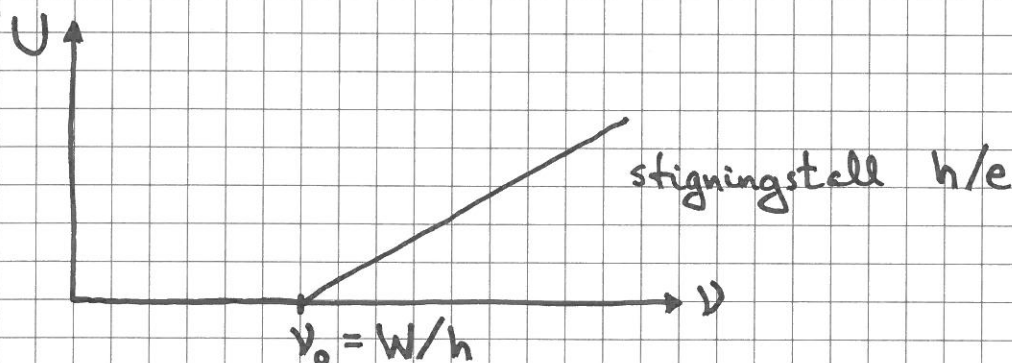
Et elektron i metallet kan bare absorbere denne bestemte energien $h\nu$. (eller la være!) Løsrivelse fra metallet krever $h\nu \geq W$, og energibevarelse gir $K_{\max} = h\nu - W$.

$$K_{\max} = eU \text{ gir } eU = h\nu - W, \text{ dvs:}$$

(8)

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

Fotoelektrisk effekt.



Millikan, 1909 (oljedråpeeksperimentet): $e \approx 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 $\Rightarrow U(\nu)$ gir eksp. verdi for Plancks konstant h

Einstein, 1917: Lyskvant (foton) med energi $E = h\nu$
 har impuls (= bevegelsesmengde) $p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$.

Følger fra spesiell relativitetsteori (SR):

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \Rightarrow E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$$

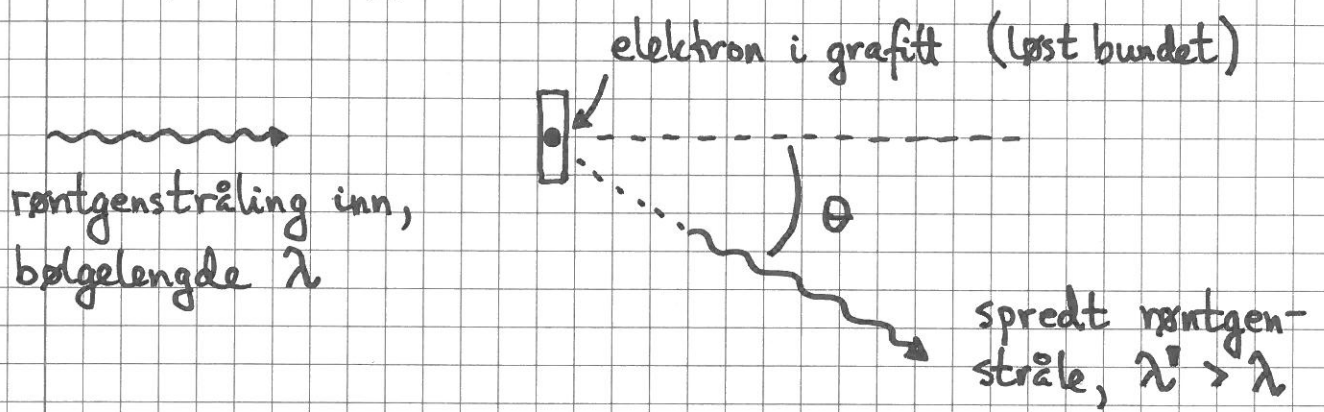
($v = pc^2/E$)

Med $m=0$ for foton: $E = pc$.

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

Med $m=0$ og $p \neq 0$ ser vi at $\gamma \rightarrow \infty$ for
 et foton, dvs $v = c$. (Må også gjelde evt.
 andre masseløse partikler.)

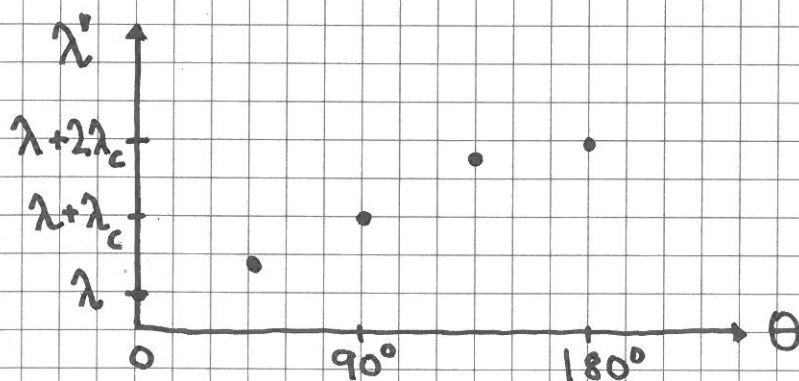
Compton - effekten :



Med klassisk teori (Maxwell) :

Oscillerende elektrisk felt $\vec{E}(t)$ i innkommende EM bølge, med frekvens $\nu = c/\lambda$, påvirker elektronet med oscillerende kraft $\vec{F}(t) = -e\vec{E}(t)$. Elektronet settes i svingninger med samme frekvens ν . Ifølge Maxwell vil en slik oscillerende ladning sende ut EM bølger med samme frekvens ν , dvs med samme bølgelengde som innkommende bølge: $\lambda' = \lambda$

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



med $\lambda_c \approx 0.024 \text{ \AA}$ [$1 \text{ \AA} = 1 \text{ \AAngstrom} = 10^{-10} \text{ m}$]

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

Vi prøver!

(10)

Fra s. 8 (evt FY6015):

Rel. impuls: $\vec{p} = \gamma m \vec{v} = \frac{m \vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ ($\approx m \vec{v}$ hvis $v \ll c$)

Foton: $p = E/c = h/\lambda$

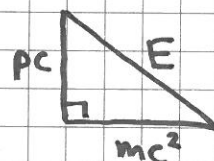
Rel. energi: $E = \gamma mc^2 = K + E_0$, med

hvileenergi $E_0 = mc^2$, dvs kin. energi $K = (\gamma - 1)mc^2$
($K \approx \frac{1}{2}mv^2$ hvis $v \ll c$)

Nyttig relasjon (for én partikkel):

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

"Pythagoras":

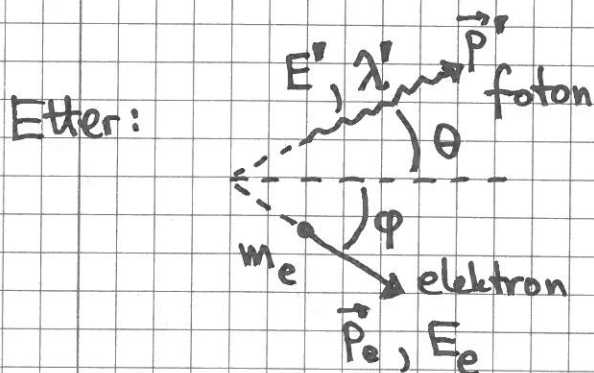


Compton - eksperimentet:



Impuls før: $E/c = h/\lambda$

Energi ---: $E + m_e c^2$



Impuls etter: $\vec{p}' + \vec{p}_e$

Energi ---:

$$E' + E_e = hc/\lambda' + \sqrt{(p_e c)^2 + (m_e c^2)^2}$$

Impulsbevarelse vertikalt: $0 = p' \sin \theta - p_e \sin \varphi$ (*)

----- " ----- horisontalt: $E/c = p' \cos \theta + p_e \cos \varphi$ (**)

Fra (*): $\sin \varphi = (p'/p_e) \sin \theta = (E'/c p_e) \sin \theta$

$$\Rightarrow \cos \varphi = \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} = \sqrt{1 - (E' \sin \theta / c p_e)^2} \quad (***)$$

Setter (***) samt $p' = E'/c$ inn i (**):

(11)

$$E/c = (E'/c) \cos \theta + p_e \sqrt{1 - (E' \sin \theta / p_e c)^2}$$

$$\Rightarrow E = E' \cos \theta + p_e c \sqrt{1 - (E' \sin \theta / p_e c)^2}$$

Får bort $\sqrt{\quad}$ ved å flytte over og kvadrere:

$$(E - E' \cos \theta)^2 = (p_e c)^2 - (E' \sin \theta)^2$$

$$\Rightarrow E^2 - 2EE' \cos \theta + \underbrace{(E' \cos \theta)^2 + (E' \sin \theta)^2}_{= E'^2} = (p_e c)^2$$

• Energibevarelse:

$$\begin{aligned} E + m_e c^2 &= E' + E_e = E' + \sqrt{(p_e c)^2 + (m_e c^2)^2} \\ &= E' + \sqrt{E^2 - 2EE' \cos \theta + E'^2 + m_e^2 c^4} \end{aligned}$$

Flytter over E' og kvadrerer:

$$\underbrace{(E + m_e c^2 - E')^2}_{= E^2 + m_e^2 c^4 + E'^2 + 2(E m_e c^2 - EE' - m_e c^2 E')} = E^2 - 2EE' \cos \theta + E'^2 + m_e^2 c^4$$

$$\Rightarrow E^2 + m_e^2 c^4 + E'^2 + 2(E m_e c^2 - EE' - m_e c^2 E') = E^2 - 2EE' \cos \theta + E'^2 + m_e^2 c^4$$

$$\Rightarrow E m_e c^2 - EE' - m_e c^2 E' + EE' \cos \theta = 0$$

$$\Rightarrow E m_e c^2 = E' (E + m_e c^2 - E \cos \theta)$$

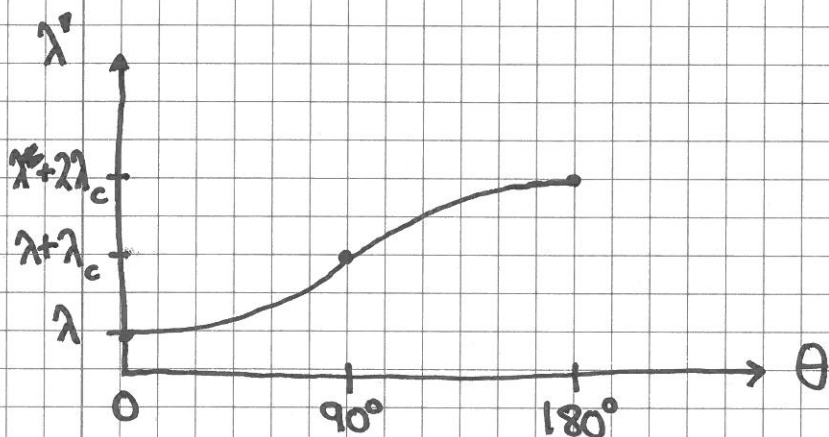
$$\Rightarrow E' = \frac{E m_e c^2}{E(1 - \cos \theta) + m_e c^2} = \frac{1}{(1 - \cos \theta)/m_e c^2 + 1/E}$$

$$\Rightarrow \frac{\lambda'}{hc} = \frac{\lambda}{hc} + \frac{1}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)$$

$$\Rightarrow \boxed{\lambda' = \lambda + \lambda_c (1 - \cos \theta)}$$

med Compton-bølgelængden for elektronet:

$$\begin{aligned} \lambda_c &= h/m_e c \approx 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} / 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m/s} \\ &\approx 2.4 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 0.024 \text{ \AA} \end{aligned}$$



I tråd med eksperimentet!

Et overbevisende resultat, i favør
af fotonbegrepet.

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

- Interferens med partikler:

Spredning (Diffraksjon) av elektroner mot Ni-krystall.

[Davisson & Germer, 1921, 1927;
G.P. Thomson, 1928; Davisson & Thomson, NP 1937]

Dobbeltspalte-eksperiment med elektroner.

[C. Jönsson, 1961;

Tomomura et al, 1989 (1 elektron om gangen!)]

Diffraksjon med C_{60} -molekyler (!)

[A. Zeilinger et al, 2003]

Forklaring? Må ha bølger for å observere interferens og diffraksjon!

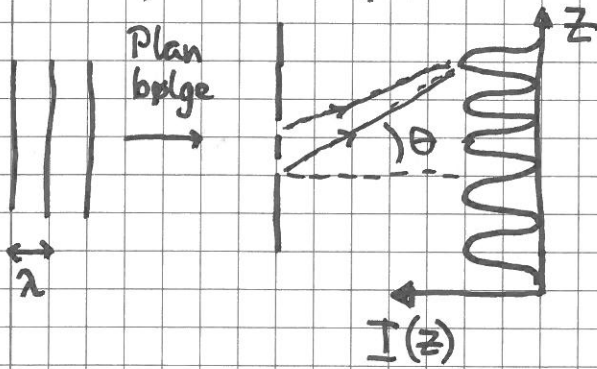
Louis de Broglie, 1923, NP 1929:

Hvis lys har både bølge- og partikkelegenskaper, er det bare rett og rimelig at partikler har både partikkel- og bølgeegenskaper!

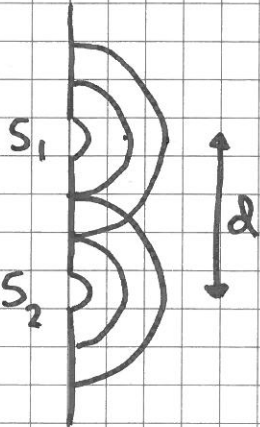
For lys: $E = h\nu = pc \Rightarrow p = h\nu/c = h/\lambda$

$\Rightarrow$ For partikler: $\lambda = h/p$; $\nu = E/h$ de Broglies hypotese

Dobbeltspalte-eksperiment:

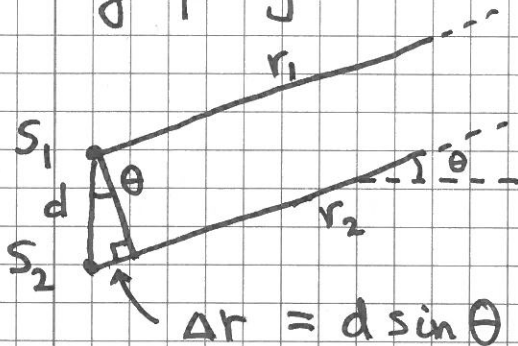


d = avstand mellom de to (smale) spaltene



Sylinderbølger i fase kommer ut av de to spaltene
(Huygens' prinsipp)

Veilengdeforskjell:



(Nesten!) Parallelle stråler fra de to spaltene i retning gitt ved θ .

Konstruktiv interferens og maks. intensitet $I(\theta)$ hvis

$$d \sin \theta = n \lambda$$

Destruktiv interferens og min. int. $I(\theta)$ hvis

$$d \sin \theta = (n + 1/2) \lambda$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots)$$

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

● El. strøm mot "2-spatterveggen": $1.6 \cdot 10^{-16} \text{ A}$

Hastighet på elektronene: $v \approx c/2$

Total veilengde: ca 1.5 m

- (a) Hvor mange elektroner treffer skjermen pr sekund?
- (b) Hvor lang tid bruker elektronene på veien fra kilden til detektoren/skjermen?
- (c) Hva er midlere tid mellom to påfølgende elektroner?

Løsning:

(a) $1.6 \cdot 10^{-16} \text{ A} = 1.6 \cdot 10^{-16} \text{ C/s} = \underline{\underline{1000 \text{ e/s}}}$

(b) Reisetid: $1.5 \text{ m} / 0.5 \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m/s} \approx \underline{\underline{10^{-8} \text{ s}}}$

(c) Midlere tid mellom to elek: $(1/1000) \text{ s} = \underline{\underline{10^{-3} \text{ s}}}$
som er mye mer enn reisetiden

⇒ Elektronene reiser alene!

⇒ De interfererer med seg selv!

Bohr - modellen : (1913)

Bakgrunn:

- Balmer-serien for H (i synlig område):

$$1/\lambda = R_{\infty} (1/2^2 - 1/n^2) ; n=3,4,5,6$$

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

- Rutherfords atommodell (1911):

Positivt ladet og liten atomkjerne [dvs ikke jevnt fordelt, slik Thomson trodde] med negativt ladde elektroner omkring.

- Plancks kvantiseringspostulat for stråling:
Energi emitteres og absorberes i enheter av $h\nu = hc/\lambda$.

Bohrs postulater / ideer:

- 1: Stasjonære tilstander, med bestemte energier.

Klassisk tenking innebærer at elektronet må tape energi i form av EM stråling, siden det er akselerert i $\vec{E}$ -feltet fra kjernen.

Bohr antok at utstråling var forhindret, og dermed energien bevart.

Hvorfor " R_∞ "?

Jo, R_∞ gir energinivåene i et 1-elektron-atom med ∞ tung kjerne, slik at redusert masse for 2-partikkelsystemet blir

$$m_{\text{red}} = \frac{m_e \cdot m_{\text{kjerne}}}{m_e + m_{\text{kjerne}}} \xrightarrow{m_{\text{kjerne}} = \infty} m_e$$

Dvs:

$$R_\infty = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c}$$

Med endelig masse i kjernen har vi

$$m_e \rightarrow m_{\text{red}} = m_e \cdot \left(1 + m_e/m_{\text{kjerne}}\right)^{-1}$$

som betyr at R_∞ må erstattes av

$$R = R_\infty \cdot \left(1 + m_e/m_{\text{kjerne}}\right)^{-1} < R_\infty$$

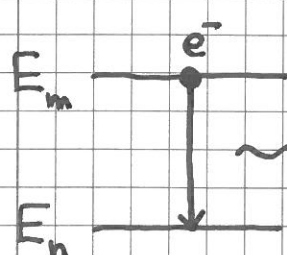
$$\text{Hydrogen: } m_e/m_{\text{kjerne}} = 9.11 \cdot 10^{-31} / 1.67 \cdot 10^{-27} \approx 5.4 \cdot 10^{-4}$$

$$\Rightarrow R_H = R_\infty \cdot 1.00054^{-1} \approx 0.99946 R_\infty$$

$\Rightarrow$ enda bedre samsvar med eksp. spektrallinjer!

2: Kvantestprang.

Balmer-serien kunne forklares med Plancks hypotese, kombinert med overganger mellom diskrete, stasjonære energitilstander:



$$\text{Balmer: } \lambda = B \cdot \frac{m^2}{m^2 - 2^2}; \quad B \approx 3.645 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

$$\text{Rydberg (1888): } \frac{1}{\lambda} = \frac{4}{B} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

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

$$[R_H = R_\infty (1 + m_e/m_p)^{-1} = 0.99946 R_\infty] \quad (m > n = 1, 2, 3, \dots)$$

Dvs: Diskrete energinivåer i H:

$$E_n = -hc R_\infty / n^2 \quad (n=1, 2, \dots)$$

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

$$\approx \underline{\underline{-13.6 \text{ eV} / n^2}}$$

3: Elektroner i klassisk bestemte sirkelbaner rundt kjernen:

Newtons 2. lov, $F = m_e a$, med $F = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$ og $a = \frac{v^2}{r}$ gir:

$$\text{Hastighet: } v(r) = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}} \sim r^{-1/2}$$

$$\text{Dreieimpuls: } (\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times m_e \vec{v})$$

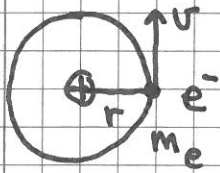
$$L = m_e v r = \sqrt{\frac{m_e e^2 r}{4\pi\epsilon_0}} \sim r^{1/2}$$

$$\text{Kin. energi: } K = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \sim r^{-1}$$

$$\text{Total energi: } E = K + V = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \sim r^{-1}$$

Men: Dette gir ikke kvantisering! Bohr trengte en uavhengig, kvantitativ antagelse vedrørende kvantisering...

4: Elektronets dreieimpuls er kvantisert:



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

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

der $\hbar = h/2\pi \approx 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

("Den reduserte Plancks konstant")

Fra s.17 følger: $m_e v r = m_e \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}} r = \sqrt{\frac{m_e e^2 r}{4\pi\epsilon_0}}$

Dermed: $\sqrt{\frac{m_e e^2 r_n}{4\pi\epsilon_0}} = n \hbar$

$$\Rightarrow r_n = n^2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

som gir energinivåene:

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

eller:

$$E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^2 \cdot m_e c^2 \cdot \frac{1}{n^2} ; n = 1, 2, 3, \dots$$

Her er:

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

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

$$a_0 (=r_1) \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \text{ \AA} \quad (\text{Bohr-radien})$$

Dette gir at Rydberg-konstanten er $R_\infty = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \approx 10^7 \text{ m}^{-1}$,
som stemmer godt med Balmers eksperimenter!

Suksess: Hydrogenspektret forklart ved kun å benytte samme konstant h , som Planck og Einstein "oppdaget" i forbindelse med lys.

- Men.....:
- Selv om dreieimpulsen L er kvantisert (og proporsjonal med h), er $L=0$ i grunntilstanden for hydrogen (og ikke h , som Bohr antok).
 - Bohrs modell fungerte dårlig på andre atomer enn hydrogen.
 - Modellen med elektronet som en partikkel i klassisk bestemt bane $\vec{r}(t)$ rundt kjernen måtte forkastes.

Det viste seg nødvendig å ta de Broglies hypotese om partiklenes bølgeegenskaper på alvor:

$$\lambda = h/p, \quad \nu = E/h$$

Dette gir f.eks. Bohrs kvantiseringsantagelse (4) hvis vi antar "stående elektronbølger" i Bohrs sirkulære baner:

$$2\pi r_n = n\lambda \quad (\text{omkrets} = \text{helt antall bølgelengder})$$

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

[....som fortsatt er feil, pga antagelsen om klassiske, sirkulære baner]

29.01.19

(20)

Schrödingerligningen

[YF 40; PCH 1-3; ØS 1-3]

Vi vet at klassiske mekaniske bølger (f.eks. transversale bølger på streng og longitudinale lydbølger) og EM bølger (lys) beskrives av en (lineær) bølgeligning:

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



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

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

Bølge med veldefinert λ og ν .

Erwin Schrödinger (1925):

"Hva slags bølgeligning kan ha de Broglies partikkelbølger som løsninger?"

Ser på enkleste eksempel:

En partikkel med veldefinert hastighet i x-retning,

dvs $\vec{v} = v \hat{x}$. Impuls: $\vec{p} = m\vec{v} = mv \hat{x}$.

Energi: $E = K = \frac{1}{2}mv^2 = p^2/2m$ ($V=0$; (velger) null potensial)

Partikkelens bølgeegenskaper:

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} \Rightarrow k = p \left(\frac{h}{2\pi} \right)^{-1} = p/h$$

$$\nu = \frac{E}{h} \Rightarrow \frac{\omega}{2\pi} = \frac{E}{h} \Rightarrow \omega = E \cdot \frac{2\pi}{h} = E/h$$

$\Rightarrow$ Vi prøver bølgeløsningen $\Phi(x,t) = \cos\left(\frac{p}{h}x - \frac{E}{h}t\right)$.

Ser da at

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = -\frac{p}{h} \sin\left(\frac{p}{h}x - \frac{E}{h}t\right)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{h^2} \cos\left(\frac{p}{h}x - \frac{E}{h}t\right)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \cancel{\sin} + \frac{E}{h} \sin\left(\frac{p}{h}x - \frac{E}{h}t\right)$$

Forsøk på å kombinere dette til en ligning på formen

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

går ikke. [Heller ikke med $\Phi(x,t) = \sin\left(\frac{p}{h}x - \frac{E}{h}t\right)$.]

Men kombinasjonen (Eulers formel)

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

burde gå bedre (siden derivasjon av exp-funksjonen gir samme funksjon tilbake).

Vi prøver bølgefunksjonen

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

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

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

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

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

Her har vi $E = K$ (fri partikkel med $V=0$),

$$\text{dvs } E = \frac{p^2}{2m}.$$

Da kan vi (selvsagt) også skrive

$$E \Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi,$$

og dermed

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}} \quad (SL) \text{ (fri partikkel)}$$

som er Schrödingerligningen for en fri partikkel som kan bevege seg i en dimensjon (x-retningen).

Merk:

- SL er den enkteste diff. lign. som oppfylles av de Broglie plane bølger. Og den fungerer!
- Er det mulig med reelle løsninger Ψ av SL?
Nei: Reell Ψ gir reell høyreside og imaginær venstreside av ligningen; ikke mulig!
- Faktoren $i = \sqrt{-1}$ kom inn pga at $E = p^2/2m$, slik at vi måtte derivere to ganger mhp x og en gang mhp t . Dermed ble $\cos(\dots)$ eller $\sin(\dots)$ alene umulige løsninger.

Tolkning av bølgefunksjonen:

For fri partikkel må vi ha kompleks bølgefunksjon Ψ .

• Alle fysiske målbare størrelser er reelle.

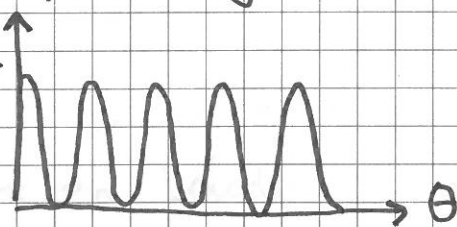
$\Rightarrow$ Vi kan ikke tilskrive Ψ noen direkte fysisk betydning.

Men 2-spalteforsøkene med lys (evt. vannbølger) antyder hvordan $|\Psi|^2$ kan tolkes:

Totalt elektrisk felt i et punkt på skjermen (der interferensmønsteret observeres) er summen av bidragene $\vec{E}_1$ fra spalte 1 og $\vec{E}_2$ fra spalte 2:

$\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$. Intensiteten er prop. med $|\vec{E}|^2$, dvs $I_{12} \sim |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$. Når vi får konstruktiv interferens er $\vec{E}_2 \approx \vec{E}_1$, og vi får $I_{12} \sim |\vec{E}_1 + \vec{E}_1|^2 = |2\vec{E}_1|^2 = 4E_1^2$. Destruktiv interferens fås når $\vec{E}_2 \approx -\vec{E}_1$, som gir $I_{12} \approx 0$.

Samtidig vet vi at lyset består av masseløse partikler (fotoner). Hvis ett og ett foton sendes mot dobbelt-spalten, får vi tilsynelatende tilfeldige treff i ulike punkter på skjermen. Men når svært mange fotoner har truffet skjermen, får vi et interferensmønster:



Med andre ord: $I_{12}(\theta)$ gir oss i bunn og grunn sannsynlighetsfordelingen for hvor enkeltstående fotoner vil treffe skjermen.

Formodentlig inspirert av dette foreslo Max Born i 1926 at

$$|\Psi(x,t)|^2 dx$$

er sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x+dx$ ved tidspunktet t .

Dermed blir $|\Psi(x,t)|^2$ sannsynlighets tettheten

- (= sannsynligheten pr lengdeenhet, i en dimensjon).

Et eller annet sted må partikkelen være, dermed:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (\text{for alle tider } t)$$

Bølgepakker:

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

og dermed

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

dvs den er ikke "kvadratisk integrerbar", og kan ikke brukes til å beskrive en lokalisert partikkel.

- Siden $|\Psi(x,t)|^2 = 1$ (uavhengig av x) for en plan bølge med veldefinert impuls p , har partikkelen like stor sannsynlighet for å være hvor som helst. Det er et eksempel på Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

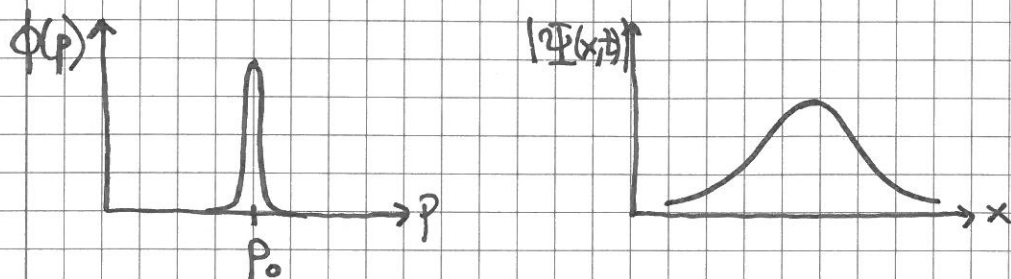
Vi kan lokalisere partikkelen til et avgrenset område i rommet ved å legge sammen plane bølger med

- ulike impulser:

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

Dette er en bølgepakke, der "vektorfunksjonen" $\phi(p)$ angir andelen av ulike p -verdier i den totale bølgefunksjonen $\Psi(x,t)$.

Skarp vektorfunksjon $\phi(p)$ gir bred $\Psi(x,t)$ (ert $|\Psi(x,t)|$):



og omvendt; slik at vi uansett må ha

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad \left(\begin{array}{l} \text{Heisenbergs} \\ \text{uskarphetsrelasjon} \end{array} \right)$$

[Vi kommer tilbake til konkrete eksempler senere.]

Operatorer. Egenfunksjoner. Egenverdier.

Størrelser som $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial}{\partial t}$, $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ osv. kalles (matematiske) operatorer: De må operere på noe, en funksjon, for å "gi et resultat".

Dersom operatoren $\frac{\partial}{\partial x}$, etter å ha virket/operert på en funksjon $f(x)$, gir ~~en~~ samme funksjon ganget med en konstant A , sier vi at $f(x)$ er en egenfunksjon til operatoren $\frac{\partial}{\partial x}$, og konstanten A kaller vi egenverdien.

Altså:

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

$\nwarrow$ operator $\uparrow$ egenfunksjon $\nearrow$ egenverdi

Standard notasjon for en vilkårlig operator:

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

"hatt" over A betyr
at det er en operator

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

Eksempel:

Er $\cos\left(\frac{px}{\hbar}\right)$ en egenfunksjon til operatoren $\frac{\partial}{\partial x}$?

Hva med $e^{ipx/\hbar}$?

Løsning:

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

ikke samme funksjon som
 $\frac{\partial}{\partial x}$ virket på, så $\cos\left(\frac{px}{\hbar}\right)$
er ikke en egenfunksjon til
operatoren $\frac{\partial}{\partial x}$

$$\text{Men: } \frac{\partial}{\partial x} e^{ipx/\hbar} = \frac{ip}{\hbar} \underbrace{e^{ipx/\hbar}}$$

Samme funk. som $\frac{\partial}{\partial x}$ virket på
 $\Rightarrow e^{ipx/\hbar}$ er egenfunk. til $\frac{\partial}{\partial x}$,
med egenverdi $ip/\hbar$

Hvis vi har $\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar}$, som "beskriver" (28)

en fri partikkel med veldefinert impuls p (i x -retning), ser vi at $\Psi(x,t)$ er egenfunksjon til operatoren $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$:

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

Med andre ord:

Planbølgen $\Psi(x,t)$ er egenfunksjon til $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, med egenverdi p , dvs partikkelens impuls!

Derfor kaller vi $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ for en impulsoperator, og skriver

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

Egenverdligningen (*) ovenfor kan da skrives slik:

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

For en slik fri partikkel har vi $E = E(p) = \frac{p^2}{2m}$.

Lar vi operatoren $\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ virke på Ψ , får vi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(px-Et)/\hbar} = \frac{p^2}{2m} e^{i(px-Et)/\hbar} = E e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Derfor kaller vi operatoren $\frac{1}{2m} (\hat{p})(\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

for en energioperator, siden egenverdien er nettopp E .

En energioperator betegnes gjerne som $\hat{H}$ og kalles da Hamilton-operatoren.

Altså: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ for fri partikkel i null potensial

Hvis $V = V_0 = \text{konstant} \neq 0$ er energien [fortsett 1D!]

$$E = K + V = \frac{p^2}{2m} + V_0$$

Plan bølge,

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

er fortsatt en egenfunksjon til Hamiltonoperatoren

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

med egenverdi

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0.$$

Som ventet gir et konstant bidrag til potensialet ingen "ny fysikk", vi har fortsatt en fri partikkel.

SL blir nå:

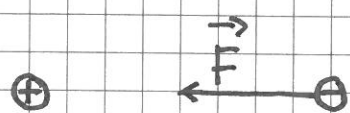
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right) \Psi = \hat{H} \Psi$$

"Oppskriften" for å finne $\hat{H}$ er altså:

- Uttrykk den klassiske energien, $K + V$, ved (posisjons-) koordinater og impulser.
- Erstatt p med $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$.

Hvz med partikkel påvirket av kraft?

• Eks: Elektronet i H-atomet



$$F = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$\Rightarrow$ Potensial (Pot. energi) $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Problem: Veldefinert energi E betyr variabel

• impuls: $E = K + V(r) = \frac{p^2}{2m} + V(r)$

$\Rightarrow p = \sqrt{2m(E - V(r))} = p(r)$

Dvs: Har ikke lenger veldefinert bølglengde,

$\lambda = \lambda(r) = h/p(r) \dots$

• Schrödinger satset likevel på samme SL (som med konstant $V = V_0$):

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

[Her antas 1D-problem; generalisering til 3D med $V(x) \rightarrow V(\vec{r})$ og $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \equiv \nabla^2$; mer om det senere!]

Og det viser seg å fungere! For H, og andre atomer!

- Stasjonære tilstander og den
 • tidsuavhengige Schrödingerligningen (TUSL):

Før fri partikkel:

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

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

- Drs: Sannsynlighetsfordelingen endres ikke med tiden.

Mer generelt: Hvis $\hat{H}$ ikke avhenger av t ,
 kan vi separere SL ved å sette

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot T(t).$$

• Vi har da

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

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

Deler med $\Psi = \psi \cdot T$:

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

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

og

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

TUSL i en dimensjon

$$\text{Total-løsning: } \Psi(x,t) = (\text{konst}) \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

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

dvs: sanns. fordelingen uavh. av t hvis

$\hat{H}$, og dermed pot. V , ikke avh. av t

$\Rightarrow$ "Stasjonære tilstander" !

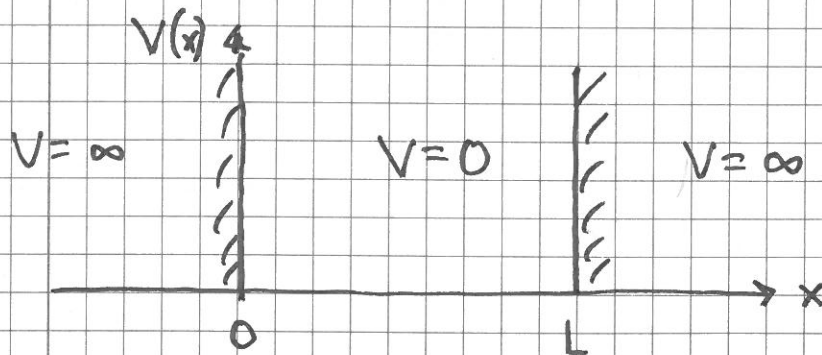
Partikkel i boks (1D)

33

- Verdens enkteste eksempel
- — " — viktigste — " — !

System: En partikkel, masse m , som beveger seg mellom to ugjennomtrengelige vegger ved $x=0$ og $x=L$:

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



$$E = K + V = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

⇒ Energi-operator (Hamilton-operator) :

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

Oppgave / Mål : Finn (alle!) stasjonære løsninger av SL, dvs alle lgsn. på formen $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$

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

(34)

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

For $x < 0$ og $x > L$: $V(x) = \infty \Rightarrow \psi(x)$ må være null,
 dvs null sannsynlighet for å finne partikkelen der

For $0 < x < L$: $V(x) = 0$

$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}}_{\psi''} = E \psi$

$\Rightarrow \psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$

Introduer $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$; dvs $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$\Rightarrow \psi'' = -k^2 \psi$

Generell løsning:

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

Vi krever kontinuerlig $\psi(x) \Rightarrow \psi(0) = \psi(L) = 0$

$\Rightarrow 0 = \psi(0) = B \Rightarrow B = 0$

$0 = \psi(L) = A \sin kL \Rightarrow \sin kL = 0$

$\Rightarrow kL = n\pi ; n = 1, 2, 3, \dots$

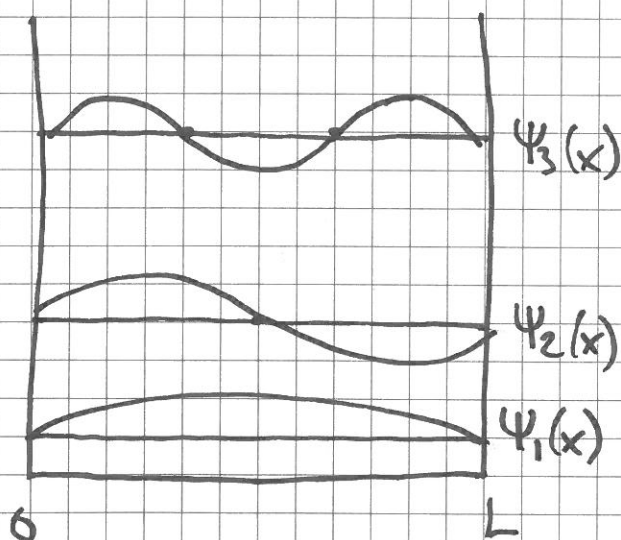
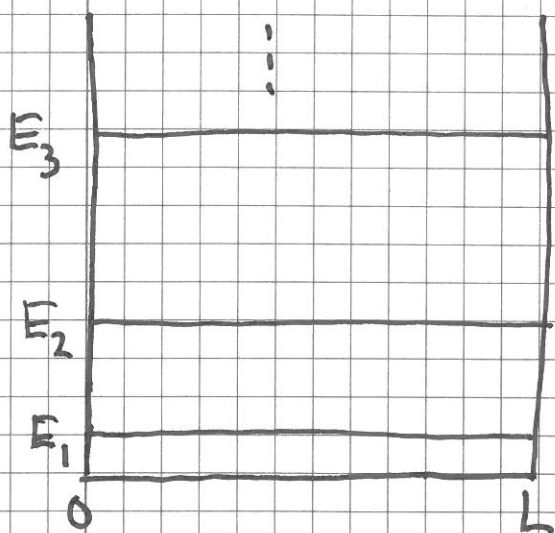
$$\Rightarrow k = k_n = n \cdot \frac{\pi}{L}$$

Dvs, $\Psi(x)$ er sinus-funksjon med et helt antall halve bølgelengder mellom $x=0$ og $x=L$:

$$\Psi_n(x) = A \sin k_n x = A \sin \frac{n\pi x}{L}$$

Energi-eigenverdier, som er kvantisert:

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



Grunnnivå: $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

Ekstende nivå: $E_2, E_3, \dots$

Normering:

• Må ha $\int_0^L |\Psi_n(x)|^2 dx = 1$ (for alle n)

Grunntilfel:

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx = 1$$

$$\sin^2 \frac{\pi x}{L} = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{L} \right)$$

$$\int_0^L \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{L} \right) dx = \frac{1}{2} L - \underbrace{\int_0^L \frac{1}{4\pi} \sin \frac{2\pi x}{L} dx}_{\frac{1}{4\pi} (\sin 2\pi - \sin 0) = 0} = \frac{1}{2} L$$

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

$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\Rightarrow \underline{\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}}$$

[Kan og velge $A = e^{i\beta} \sqrt{\frac{2}{L}}$, som of gir $|A|^2 = \frac{2}{L}$.

Velger $\beta=0$; uten betydning!]

Også $\Psi_2, \Psi_3 \dots$ gir $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

$$\Rightarrow \underline{\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} e^{-iE_n t/\hbar}}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

$n = 1, 2, \dots$

Når vi nå har løst TUSL for 1D partikkel i boks, dvs funnet normerte egenfunkt. $\Psi_n(x)$ og tilhørende energiegenv. E_n , kan vi se på sentrale størrelser og begreper som: forventningsverdier, ortogonalitet, superposisjon (ikke-stasjonære tilstander), grensebetingelser, sannsynlighetsstrøm (og bevaring av sanns.), usikkerhet (og Heisenbergs uskarphetsrelasjon) og sammenhengen mellom klassisk mekanikk og kvantemekanikk (Ehrenfests teorem).

Og ikke minst: De såkalte postulatene, som utgjør det empiriske grunnlaget for kvantemekanikk som teori.

Forventningsverdier

Forv.verdien $\langle x \rangle$ til en fysisk, målbar størrelse x (f.eks. posisjonen til en partikkel) er lik middelverdien av mange målinger av x på identiske systemer (evt. på samme system, som er identisk preparert et stort antall ganger).

Eks: Terningkast. Hva er forv.verdien av antall øyne $\langle j \rangle$?

Løsn: $p(j) = \text{sanns. for } j \text{ øyne} = 1/6 \quad (j=1,2,\dots,6)$

$$\langle j \rangle = \sum_{j=1}^6 j \cdot p(j) = \frac{1+2+3+4+5+6}{6} = 3.5$$

Dermed, hvis $|\Psi_n(x)|^2 dx$ er sanns. for å finne partikkelen mellom x og $x+dx$ (når vi vet at den er i tilstanden $\Psi_n(x)$), blir forv.verdien til partikkelens posisjon

$$\langle x \rangle_n = \int x |\Psi_n(x)|^2 dx,$$

der integralet går over alle mulige posisjoner for partikkelen.

(Vi kan integrere fra $-\infty$ til $+\infty$, siden $\Psi_n(x) = 0$ der partikkelen ikke kan befinne seg.)

Eks: Hva er $\langle x \rangle_n$ for partikkel i boks ($0 < x < L$)?

Løsn: $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$

$$\Rightarrow \langle x \rangle_n = \int_0^L x \cdot \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx$$

Av symmetrigrunner er det "opplagt" at $\langle x \rangle_n = \frac{L}{2}$.

(Sanns.tettheten $|\Psi_n(x)|^2$ symmetrisk om $x = L/2$, dvs like stor sanns. for å finne part. i pos. $L/2 \pm x$.)

Regnes evt. ut med identiteten $\sin^2 \alpha = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\alpha)$, og bruk av delvis integrasjon.

[Nok å kunne produktregel for derivasjon for å utlede "oppskrift" for delvis integrasjon:

$$d(u \cdot v) = u \cdot dv + du \cdot v \Rightarrow \int u dv = uv - \int v du$$

$$\Rightarrow \int u \frac{dv}{dx} dx = uv - \int v \frac{du}{dx} dx]$$

[Kommer straks til hvordan f.eks $\langle p \rangle_n$ skal beregnes!]

Ortogonalitet

- To "vanlige" vektorer $\vec{V}_1$ og $\vec{V}_2$ er ortogonale hvis $\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_2 = 0$. Og en vektor har lengde (norm) lik 1 hvis $\vec{V}_i \cdot \vec{V}_i = V_i^2 = 1$.

Dvs: V_i har såkalt ortonormerte vektorer hvis

$$\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij}$$

- [Kronecker-delta: $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{hvis } i=j \\ 0 & \text{--- } i \neq j \end{cases}$]

Tilsvarende med egenfunksjoner $\Psi_n(x)$:

Dersom

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

utgjør $\{\Psi_n\}$ [= $\{\Psi_1, \Psi_2, \dots\}$] et ortonormert funksjonssett.

Eks: Bruk identiteten $\sin \alpha \sin \beta = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$ til å vise at egenfunksjonene $\Psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin \frac{n\pi x}{L}$ for part. i boks er ortogonale. [Vi vet fra før at de er normerte, se s. 36.]

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

Integrasjon gir $\sin \frac{(n \pm k)\pi x}{L}$, som er null i både øvre og nedre grense. Dermed er $\langle \Psi_n, \Psi_k \rangle = \delta_{nk}$ for partikkel i boks.

Superposisjon og ikke-stasjonære løsninger av SL

SL er en linear (ingen ledd prop. med Ψ^2, Ψ^3 ; kun Ψ^1) og homogen (alle ledd $\sim \Psi$; ingen ledd uavh. av Ψ) ligning. Hvis da $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ hver for seg er løsning av SL, er også en vilkårlig lineærkombinasjon av disse en løsning:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = \hat{H} \Psi_1, \quad i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \hat{H} \Psi_2, \quad \dots$$

$\Downarrow$

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = \hat{H} \bar{\Psi} \quad \text{med} \quad \bar{\Psi} = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots = \sum_{j=1}^{(\infty)} c_j \Psi_j$$

Dette er (et eksempel på) superposisjonsprinsippet (SPP).
(Kjent fra mange deler av fysikken!)

Stasjonære løsn. av SL : $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$

$$\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2 \text{ uavh. av } t \Rightarrow \langle x \rangle, \langle x^2 \rangle \text{ osv uavh. av } t$$

Funksjonen $\Psi(x,t) = \sum_{j=1}^N c_j \bar{\Psi}_j(x,t) = \sum_{j=1}^N c_j \psi_j(x) e^{-iE_j t/\hbar}$

gir ikke tidsuavhengig $|\Psi(x,t)|^2$, og kalles derfor en ikke-stasjonær tilstand. Da blir $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle$ osv også tidsavhengige ("dynamiske") størrelser.

Normering av ikke-stasjonære tilstander:

Anta $\Psi(x,t) = \sum_j c_j \Psi_j(x,t) = \sum_j c_j \psi_j(x) e^{-iE_j t/\hbar}$, der $\{\psi_j\}$ utgjør et ortonormert sett. Da er $\sum_j |c_j|^2 = 1$.

$$\text{Bevis: } 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ c_1^* \psi_1^*(x) e^{iE_1 t/\hbar} + \dots \right\} \cdot \left\{ c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \dots \right\} dx$$

$$= |c_1|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x)|^2 dx}_{=1} + |c_2|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_2(x)|^2 dx}_{=1} + \dots$$

$$+ c_1^* c_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx}_{=0} + \dots$$

$$= |c_1|^2 + |c_2|^2 + \dots = \sum_j |c_j|^2 \quad (\text{qed})$$

En måling av energien vil da, med sannsynlighet $|c_j|^2$, gi resultatet E_j . (Vi kommer tilbake til dette straks.)

Postulatene

Newtons lover er det empiriske grunnlaget for klassisk mekanikk.

Tilsvarende er følgende postulater grunnlaget for kvantemekanikk:

Postulat A: Til en observerbar størrelse i klassisk mekanikk,

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

svarer i kvantemek. en lineær operator

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

der

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

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

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

Eks: 1D boks, en partikkel

$$N=1$$

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

La oss ta for oss de mest sentrale størrelsene.

Fysisk størrelse

$$x, y, z$$

$$p_x, p_y, p_z$$

$$\vec{p}$$

$$K$$

$$V$$

$$E = K + V$$

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

$$L_x = y p_z - z p_y$$

$$L_y = z p_x - x p_z$$

$$L_z = x p_y - y p_x$$

Kvantemekanisk operator

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

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

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

$$\hat{K} = \hat{\vec{p}}^2 / 2m = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

$$\hat{V} = V$$

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

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

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

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

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

Postulat B: Et systems tilstand er fullstendig beskrevet ved en bølgefunksjon $\Psi = \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$ som oppfyller ligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (5L)$$

der $\hat{H}$ er systemets Hamiltonfunksjon, som regel lik systemets energifunksjon, dvs

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = K(\hat{p}_j) + V(\hat{q}_j) = K(\hat{p}_j) + V(q_j)$$

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

Postulat C: Forventningsverdien til F er

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

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

Et stort antall målinger av F på systemer preparert i tilstanden Ψ vil gi en middelværdi som nærmer seg (den teoretiske) $\langle F \rangle$.

Eks: 1D boks, $n=1$ (grunntilst.):

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

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

Postulat D: De eneste mulige verdier som en måling av F kan gi er en av egenverdiene f_j (slik at $\hat{F}\Psi_j = f_j\Psi_j$). Etter måling av F , som gav resultatet f_j , harer systemet i egentilstanden Ψ_j .

Eks: 1D boks. Anta $\Psi(x, t_0) = c_1\Psi_1(x, t_0) + c_2\Psi_2(x, t_0) + c_3\Psi_3(x, t_0)$

En energimåling ved $t_1 > t_0$ vil da gi ett av resultatene

E_1, E_2 eller E_3 , med sanns. hhv. $|c_1|^2, |c_2|^2$ og $|c_3|^2$.

(der $\sum_{j=1}^3 |c_j|^2 = 1$). Hvis målingen ved t_1 gav f.eks. E_2 , så er $\Psi(x, t > t_1) = \Psi_2(x, t)$.

Med andre ord: Målingen påvirker systemet!

Grensebetingelser

Krav om entydig sannsynlighetstetthet $|\Psi(x,t)|^2$ for alle x og t betyr at $\Psi(x)$ må være kontinuerlig overalt.

Omskriving av TUSL gir:

$$\frac{\Psi''(x)}{\Psi(x)} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]$$

Vi ser nå at dersom $V(x)$ gjør et "sprang" fra en endelig til en uendelig verdi, så ~~blir~~ $\Psi''(x)$ ~~ubestemt~~ ~~blir~~ ~~ubestemt~~.

Da ~~kan~~ $\Psi'(x)$ ~~bli~~ diskontinuerlig mens $\Psi(x)$ ~~kan~~ har en "knekk" i dette punktet. Men:

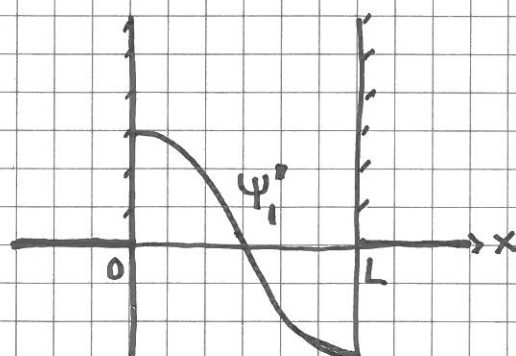
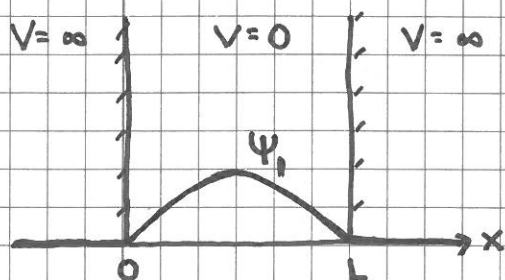
Hvis $|V(x)| < \infty$, er både Ψ og Ψ' kontinuerlige funksjoner.

Eks: 1D boks har ∞ sprang for $V(x)$ i $x=0$ og $x=L$.

La oss se på

$$\Psi_1(x) = \begin{cases} 0 & ; x < 0 \text{ og } x > L \\ \frac{1}{\sqrt{2/L}} \sin \frac{\pi x}{L} & ; 0 < x < L \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Psi_1'(x) = \begin{cases} 0 & ; \text{---} \text{---} \text{---} \\ (\pi/L) \frac{1}{\sqrt{2/L}} \cos \frac{\pi x}{L} & ; \end{cases}$$

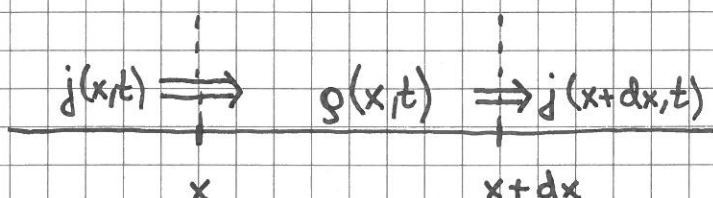


Sannsynlighetsstrøm og -bevarelse

• $g(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \text{sannsynlighetstetthet} ; [g] = \frac{1}{m}$

Normering: $\int_{-\infty}^{\infty} g(x,t) dx = 1$; må gjelde for alle tider t

En eventuell endring i $g(x,t)$ må skyldes en netto strøm, inn eller ut, av sannsynlighet ved x :



$j(x,t) = \text{sannsynlighetsstrøm ved posisjon } x \text{ ved tid } t$

$$[j] = \left[\frac{\text{sanns.}}{\text{tid}} \right] = \frac{1}{s}$$

$\Rightarrow j(x,t) - j(x+dx,t) = \text{netto økning i sannsynlighet pr tidsenhet, ved tid } t, \text{ på intervallet } (x, x+dx)$

Samtidig har vi

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial [g(x,t) \cdot dx]}{\partial t} = \frac{\partial g(x,t)}{\partial t} \cdot dx$$

= økning i sanns. pr tidsenhet, ved tid t , på $(x, x+dx)$

Dermed:

$$\frac{\partial g(x,t)}{\partial t} \cdot dx = j(x,t) - j(x+dx,t)$$

• $\Rightarrow \frac{\partial g(x,t)}{\partial t} = - \frac{j(x+dx,t) - j(x,t)}{dx} = - \frac{\partial j(x,t)}{\partial x}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0}$$

Kontinuitetsligning i 1D
for sannsynlighet. Uttrykker
bevaring av sannsynlighet.

Kommentarer:

- I tre dimensjoner er $g(\vec{r}, t)$ sanns. pr volumenhet, med $[g] = 1/m^3$. Da kan sannsynlighet strømme inn og ut av et volumelement i alle tre retninger, og sanns.strømmen blir en vektor $\vec{j}(\vec{r}, t)$ som da er en sanns.strømtektet, dvs sanns.strøm pr flateenhet, med $[j] = \frac{1}{s \cdot m^2}$.

Kont.lign. generaliseres da til

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0,$$

der $\nabla \cdot \vec{j} (= \text{div } \vec{j}) = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$

$$\vec{j} = \hat{x} j_x + \hat{y} j_y + \hat{z} j_z$$

- Vi har tilsvarende kont.lign. for ladning i elektrodynamikk, for masse i hydrodynamikk osv.

Det gjenstår å vise at SL faktisk gir sanns.bevarelse, dvs at vi får en lign. på formen (i 1D) $\partial g / \partial t + \partial j / \partial x = 0$, med $g = |\Psi|^2$, fra SL. Da vil vi samtidig få bestemt j .

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \Psi^* \Psi \right\} = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\text{SL: } i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \Psi$$

$$\Downarrow$$

$$\left[i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right]^* = \left[\hat{H} \Psi \right]^*$$

$$\Downarrow$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H}^* \Psi^* \Rightarrow \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \Psi^*$$

Setter inn for $\partial \Psi / \partial t$ og $\partial \Psi^* / \partial t$ i $\partial g / \partial t$ (leddene med $V(x)$ kansellerer):

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \Psi'' - \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^*)'' \Psi$$

Ønsker nå å få høyre side på formen $-\frac{\partial}{\partial x} \{ \dots \}$.

$$\begin{aligned} \text{Har generelt: } [f g' - f' g]' &= f' g' + f g'' - f'' g - f' g' \\ &= f g'' - f'' g \end{aligned}$$

Så med $f = \Psi^*$ og $g = \Psi$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \Psi^* \Psi' - (\Psi^*)' \Psi \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \Psi' + \left[\frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \Psi' \right]^* \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left\{ 2 \operatorname{Re} \left[\frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \Psi' \right] \right\} \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \operatorname{Re} \left[\Psi^* \left(\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \right] \right\} \end{aligned}$$

Med andre ord: SL gir bevart sannsynlighet,

• med sannsynlighetsstrøm

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

Merk at $\frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{m} \hat{p}$ er en hastighetsoperator, og i kombinasjon med $\Psi^* \Psi$, som representerer en tetthet, bør vi få som resultat en strøm, j .

[Som i klassisk fysikk, $j = \rho \cdot v$]

Eks: Stasjonær tilstand $\Psi_n(x,t)$ i 1D boks. $j_n = ?$

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

Derivasjon av denne mhp x endrer ikke på den tids-avhengige delen, og da $\Psi_n^*(x,t) \sim \exp(+iE_n t/\hbar)$, ser vi at det vi skal ta realdelen (Re) av blir rent imaginært. Følgelig blir $j_n = 0$.

Som ventet: Disse stasjonære løsningene er som stående bølger, uten noen netto transport av noe som helst i noen retning.

[Prøv til sammenligning fri partikkel, $\Psi = e^{ikx} e^{-iEt/\hbar}$!]

Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

- Vanlig mål for usikkerhet i en fysisk størrelse x :

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

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

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

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

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

"Forenkling" (Omskiving):

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

$\Rightarrow$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

RMSD

Forventningsverdier i QM:

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

Tilsvarende for impuls:

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} ; \langle p^n \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \Psi dx$$

Det kan vises at

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$$

Heisenbergs uskarphetsrelasjon

[Se PCH 4.5 for bevis. Litt "kronglete"; bevises ikke her.]

Mer generelt kan det vises at

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

Her har vi på høyre side abs.verdien ($|\dots|$) av
forv.verdien ($\langle \dots \rangle$) av den såkalte kommutatoren
mellom de to QM operatorene $\hat{x}$ og $\hat{p}$:

$$[\hat{x}, \hat{p}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$$

Denne kan vi regne ut ved å la $[\hat{x}, \hat{p}]$ virke på en
tilstand $\Psi(x)$:

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

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

$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} |\langle i \hbar \rangle| = \frac{1}{2} \hbar$$

Helt generelt har vi altså:

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

Heisenbergs uskarphetsrelasjon for to fysiske størrelser A og B , med QM operatorer $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Merk at hvis A og B har operatorer som

kommuterer, dvs $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, så er

$\Delta A \cdot \Delta B \geq 0$. Dvs, både A og B kan måles helt nøyaktig, samtidig!

Eks: $\Delta x \cdot \Delta p_y = 0$, $\Delta x \cdot \Delta y = 0, \dots$

"Minimum uncertainty wave packet":

Det kan vises at en gaussisk tilstand,

$$\Psi(x, 0) = C \cdot e^{-\alpha(x - \langle x \rangle)^2} e^{i\langle p \rangle x / \hbar},$$

(ved tidspunktet $t=0$) har såkalt minimal usikkerhet, dvs $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{1}{2} \hbar$.

[Vi viser dette sammen i øving 2!]

[Og vi bør vel også kunne klare å beregne $\Delta x \cdot \Delta p$ for partikkel i boks...]

Tidsutvikling av forventningsverdier

I all slags fysikk er vi ofte interessert i å finne ut hvordan ulike fysiske størrelser endrer seg med tiden.

Vi skal se at QM forventningsverdier "styres" av ligninger på samme form som tilsvarende klassiske bevegelsesligninger.

Fra SL følger det at

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

(så lenge $\hat{A}$ ikke avhenger eksplisitt av tiden t).

Dermed: Hvis $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ ($\hat{A}$ kommuterer med $\hat{H}$), er $\langle A \rangle = \text{konstant}$, dvs $\hat{A}$ er en bevegelseskonstant.

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

Løsn: Her er $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, slik at

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

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

Sammenhengen mellom klassisk mekanikk og QM:

Ehrenfests teorem

Klassiske bevegelseslign. i 1D:

$$\frac{dx}{dt} = p/m ; \quad \frac{dp}{dt} = -\partial V / \partial x \quad (F = -\frac{\partial V}{\partial x})$$

Forventer noe lignende for $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$ i QM!

La oss se!

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x, t)$$

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

$$\begin{aligned} [\hat{p}^2, x] &= \hat{p}^2 x - x \hat{p}^2 = \hat{p} (\hat{p} x) - (x \hat{p}) \hat{p} \\ &= \hat{p} (\hat{p} x) - \underbrace{(\hat{p} x) \hat{p} + (\hat{p} x) \hat{p}}_{=0} - (x \hat{p}) \hat{p} \\ &= \hat{p} \underbrace{(\hat{p} x - x \hat{p})}_{=-i\hbar} + \underbrace{(\hat{p} x - x \hat{p}) \hat{p}}_{=-i\hbar} \\ &= -2i\hbar \hat{p} \end{aligned}$$

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

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [V, \hat{p}] \rangle \quad (\text{da } [\hat{p}^2/2m, \hat{p}] = 0) \quad (56)$$

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

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

Oppsummert:

$$1D : \quad \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle$$

$$3D : \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \langle -\nabla V \rangle$$

Ehrenfests
teorem

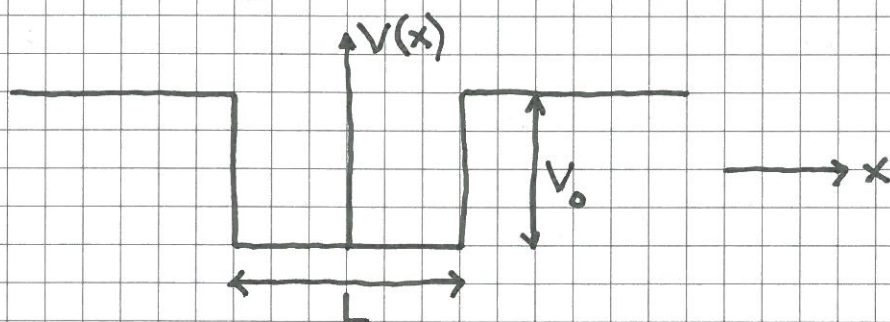
Med andre ord: Bevegelseslign. for QM foru.verdier
av posisjon og impuls har samme form som de
tilsvarende klassiske bevegelsesligningene.

Flere konkrete potensialer i 1D og 3D

- Vi har nå et slags grunnlag på plass: Vi har analysert "partikkel i boks" ("∞ dyp potensialbrønn") i 1D, og brukt dette enkle eksemplet til å belyse diverse grunnleggende, generelle postulater og resultater: Foru.verdier, ortogonalitet, superposisjon, grensebetingelser, sannsynlighetsstrøm etc.

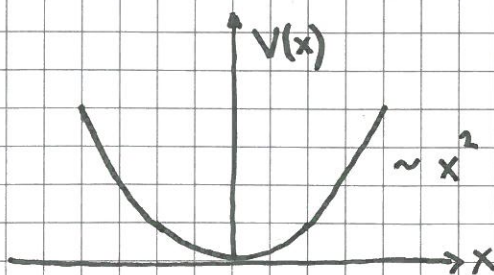
Neste oppgave blir å se på noen flere viktige eksempler:

- Endelig potensialbrønn (1D)



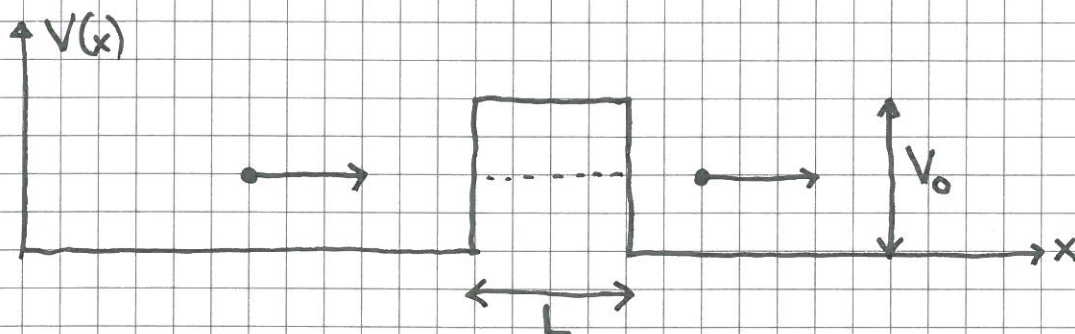
Relevans: Halvledere. Laserteknologi.

- Harmonisk oscillator (1D)



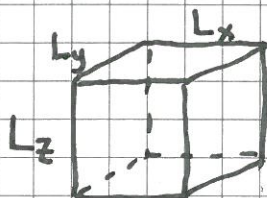
Relevans: Vibrasjoner i molekyler og faste stoffer

- Tunneleffekt (1D)



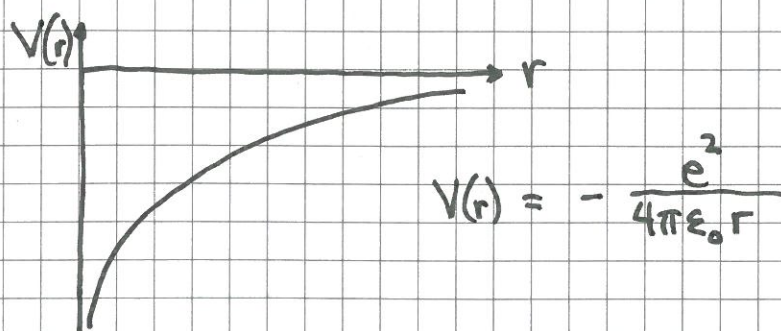
Relevans: Feltemisjon. STM. Radioaktivitet.
Fusjon. Spredningeksperimenter.

- Partikkel i boks (3D)



Relevans: Ideelle gasser. Faststoff-fysikk. Nanoteknologi

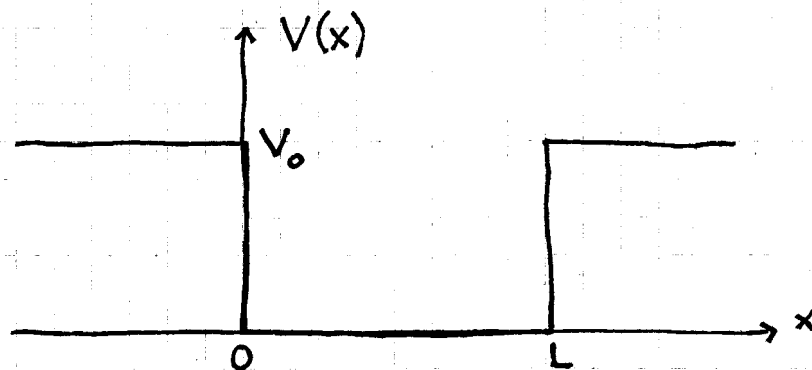
- Coulombpotensialet



Relevans: H-atomet. Andre atomer. Molekyler. Faste stoffer
(Krystaller)

Endelig potensialbrønn

(PCH 3.3, YF 40.3)



$$V(x) = 0 \quad (0 < x < L)$$

$$V(x) = V_0 \quad (\text{ellers})$$

[L] $\hat{=}$ 22 i PCH

TUSL: $\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) \quad (0 < x < L)$

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

$$E < V_0$$

Løsninger på flg. form:

$$\psi(x) = C \sin kx + D \cos kx; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (0 < x < L)$$

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

$$x > L: e^{\kappa x} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \infty \Rightarrow \psi(x) = B e^{-\kappa x}$$

$$x < 0: e^{-\kappa x} \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \infty \Rightarrow \psi(x) = A e^{\kappa x}$$

5 ukjente: A, B, C, D og energien E.

Fastlegges med 5 ligninger:

- ψ kontinuerlig i $x = 0$

- ψ' " " " "

- ψ " " " $x = L$

- ψ' " " " "

- Normering: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

[Se PCH 3.3 for detaljene!]

$\Rightarrow$ Symmetriske bølgefunk. ~~med energi bestemt av~~ med energi bestemt av $\tan(kL/2) = \alpha/k$, dvs

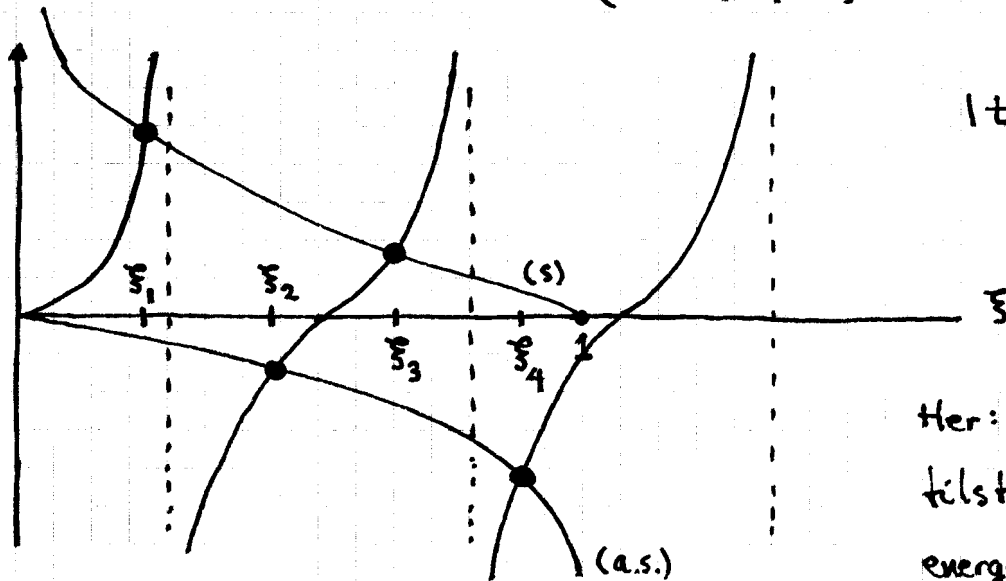
$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mE} \cdot L}{2\hbar}\right) = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

og: Antisymmetriske bølgef. med energi bestemt av $\tan(kL/2) = -k/\alpha$,

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mE} \cdot L}{2\hbar}\right) = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$$

Grafisk løsning: Sett $\xi = \sqrt{E/V_0}$ ("dim.løs energistørrelse")

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



$|\tan \varphi| \rightarrow \infty$ når
 $\varphi = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$

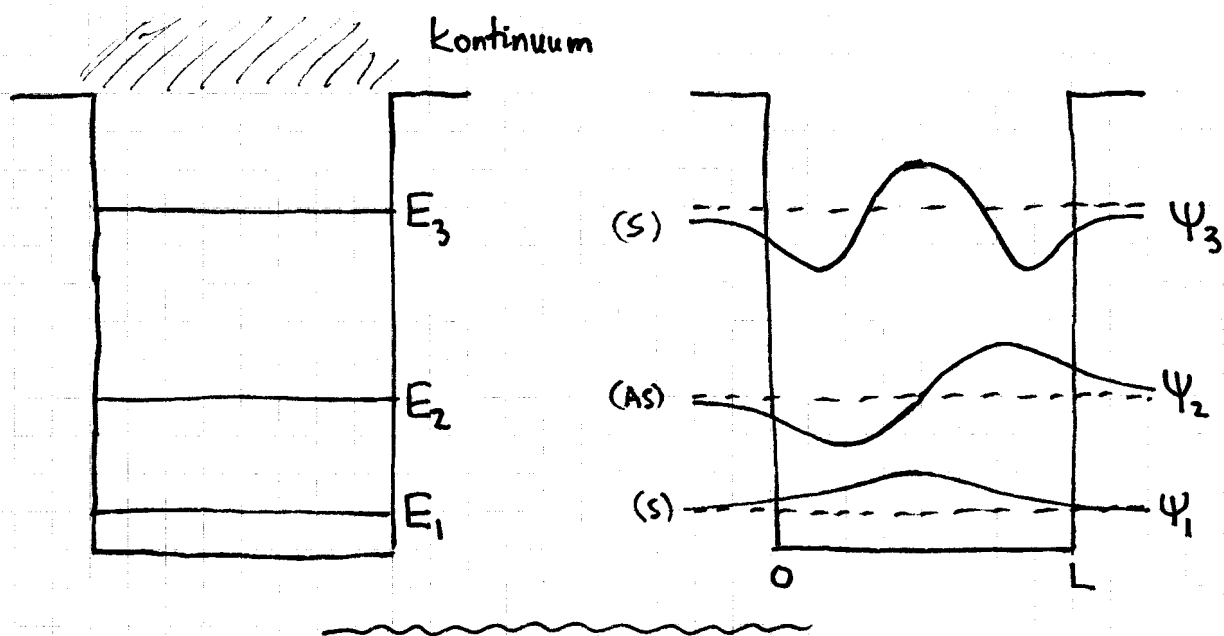
Her: 4 bundne tilstander, med energi $E_n = V_0 \cdot \xi_n^2$

- Relevant intervall: $0 < \xi < 1$
- Alltid minst 1 løsning, som er symmetrisk
- Kun 1 symm. løsn. hvis $1 \cdot \sqrt{2mV_0} L / 2\hbar < \pi/2$,
dvs $V_0 L^2 < \pi^2 \hbar^2 / 2m$
- Økende antall løsninger for dypere og bredere brønn.
- $|\psi|^2 > 0$ også utenfor brønnen, dvs en viss sanns. for å finne partikkelen i det "klassisk forbudte" området!

$$\boxed{E > V_0} \quad \ddot{\psi}(x) = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi(x) = -K^2 \psi(x) \quad \text{utenfor} \quad (61)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx \quad -4-$$

Dvs: Ikke lokaliserte/bundne tilstander. Kan "matches" med $C \sin kx + D \cos kx$ (dvs ψ og ψ' kont. i 0 og L) for alle verdier av $E > V_0$, dvs kontinuerlig energispektrum for $E > V_0$.



Eks: Anta at $V_0 = 300 \text{ meV}$, $L = 100 \text{ \AA}$ og $E_1 = 30 \text{ meV}$.

- Bestem partikkelens masse. [Elektroner kan ha effektiv masse $m^* \neq 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ i krystaller!]
- Finn energien til de ~~øvrige~~ bundne tilstandene ($E_2, E_3, \dots$)
- Finn bølgelengden til utsendt lys for alle mulige elektronoverganger mellom kvanlebrønnens bundne tilstander.

Harmonisk oscillator i 1D

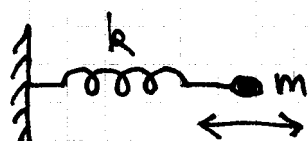
(PCH 3.5, YF 40.5)

(62)

Den "gjenopprettende" ("restoring") kraft er prop. med utsvinget fra likevekt, dvs $F(x) = -kx$ (Hookes lov!), er systemet en harmonisk oscillator, med potensial

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

Klassisk beskrivelse:

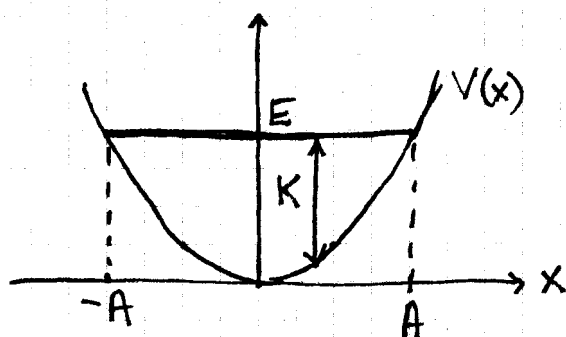


N2:

$$m\ddot{x} + kx = 0 \Rightarrow x(t) = A \cos \omega t$$

med vinkel-frekvens $\omega = \sqrt{k/m}$

$$\Rightarrow V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 ; \quad E = K + V = \frac{1}{2} k A^2$$



$|x| < A$ (klassisk)

QM beskrivelse:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi$$

Løsning (se PCH 3.5 for detaljene):

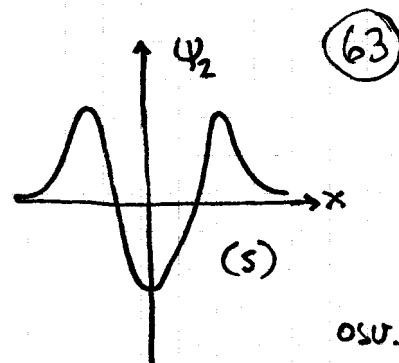
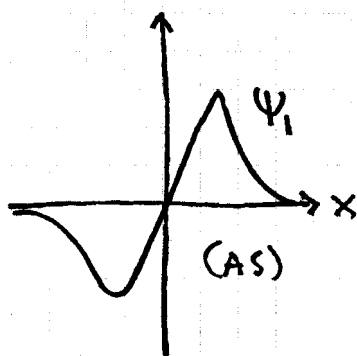
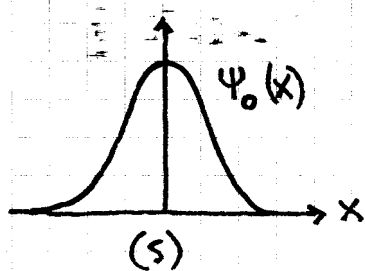
$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

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

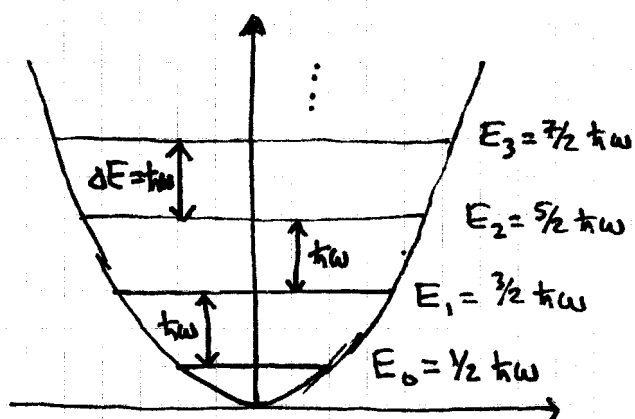
$$\text{der } H_0(z) = 1, \quad H_1(z) = 2z, \quad H_2(z) = 4z^2 - 2,$$

$$H_3(z) = 8z^3 - 12z, \quad H_4(z) = 16z^4 - 48z^2 + 12, \dots \quad [H_n(z) \sim z^n]$$

[Hermite-polynomene]

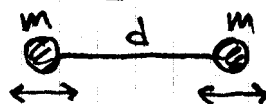


osv.

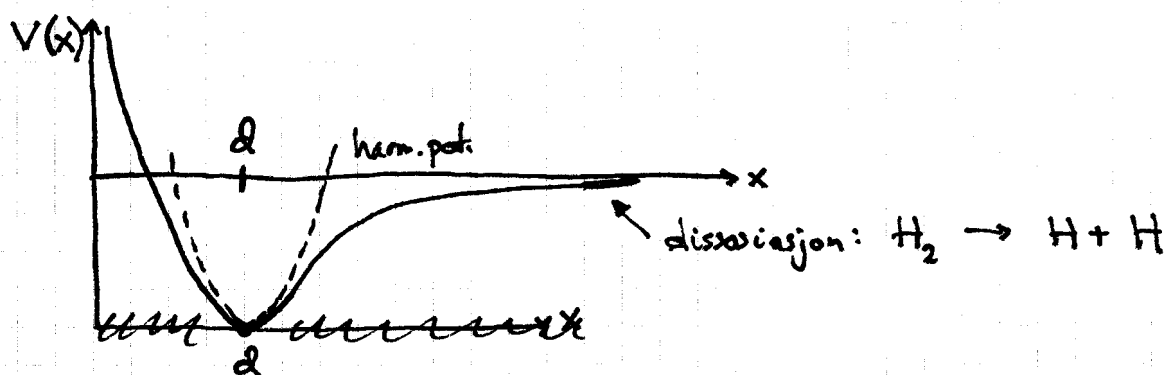


Mange potensialer er tilnærmet harmoniske.

Eks: To-atomig molekyl



d = bindingslengde
(i likevekt)



Nær $x=d$: $V(x) \approx \frac{1}{2} \tilde{m} \omega^2 (x-d)^2$ $[\tilde{m} = \text{reduisert masse}]$
 $(= m/2 \text{ i } H_2)$

⇒ Vibrasjoner i molekylet med energi $E_n \approx (n + 1/2) \hbar \omega$

Oppg: Effektiv fjærkonstant for små vibrasjoner i H_2 er $k = 520 \text{ N/m}$.

Bruk dette til å finne avstanden $\Delta E = \hbar \omega$ mellom

vibrasjonsnivåene i H_2 . Omtrent hvilken temperatur må til for å eksistere H_2 fra 0. til 1. vibr. nivå?

Tunneleffekt

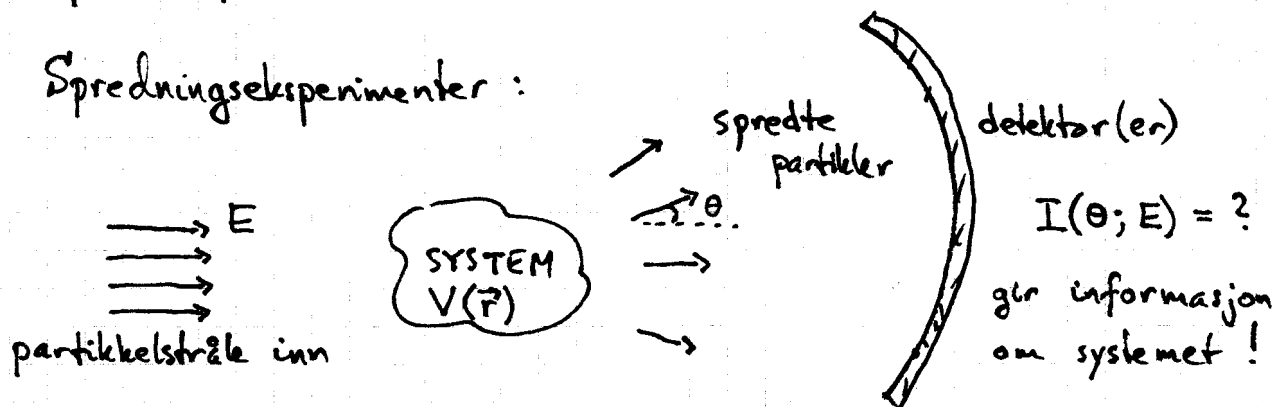
(PCH 3.6, YF 40.4)

(64)

Tilnæ:

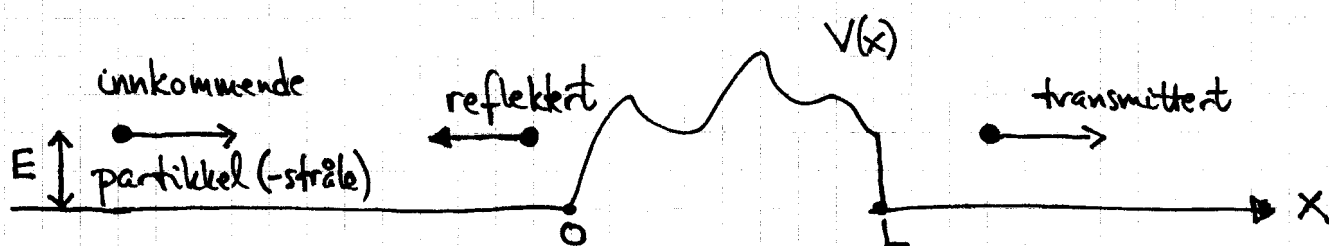
Bundne tilstander i brynn, herm. osc. osv; ^{spesielt} relevant for spektroskopi.

Spredningeksperiment:



Eks: Nøytroner, Elektroner, Røntgen, ...

I én dimensjon: Bare 2 muligheter!



$$\left. \begin{array}{l} R = \text{snur. for refl.} \\ T = \text{---} \text{---} \text{---} \text{transm.} \end{array} \right\} \Rightarrow \boxed{R + T = 1}$$

Som stasjonært problem (dvs. bestemt energi E):

$$x < 0: \psi_i(x) = e^{ikx}, \quad \psi_r(x) = r e^{-ikx}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \psi_i(x) + \psi_r(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}$$

$$x > L: \psi(x) = \psi_t(x) = t e^{ikx}$$

$0 < x < L$: $\psi(x)$ avhengig av $V(x)$;
enkleste tilfelle: $V(x) = V_0 = \text{konst.}$

Fra før: (s. 47-50)

(65)

$$j = \text{Re} \left\{ \Psi^* \frac{\hbar}{im} \Psi' \right\} = \text{sann. strøm (ethelen)}$$

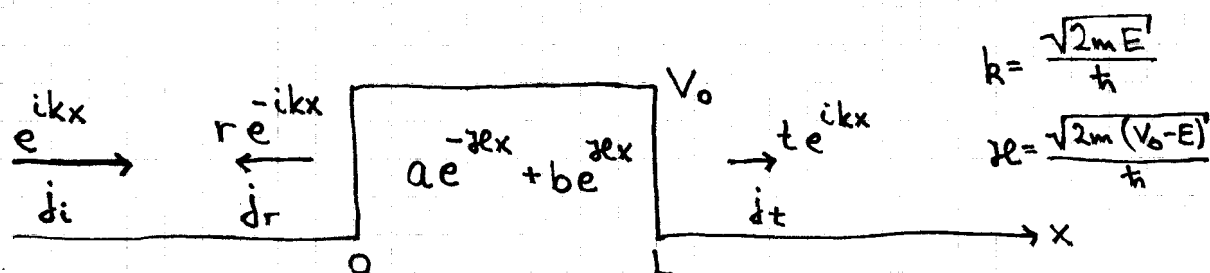
$$\Rightarrow j_i = \text{Re} \left\{ e^{-ikx} \frac{\hbar}{im} ik e^{ikx} \right\} = \frac{\hbar k}{m}$$

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

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

$$\Rightarrow R = |j_r / j_i| = |r|^2$$

$$T = |j_t / j_i| = |t|^2$$



De 4 ukjente a, b, r, t fastlegges via 4 grensebetingelser:
 Ψ og Ψ' kontinuerlig i $x=0$ og $x=L$

$$\Rightarrow T = |t|^2 = \frac{(2k\kappa)^2}{(2k\kappa)^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa L} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \kappa L}$$

($R = 1 - T$)

Med høy og/eller bred barriere, dvs $\kappa L \gg 1$, er

$$\sinh \kappa L = \frac{1}{2} (e^{\kappa L} - e^{-\kappa L}) \approx \frac{1}{2} e^{\kappa L} \gg 1$$

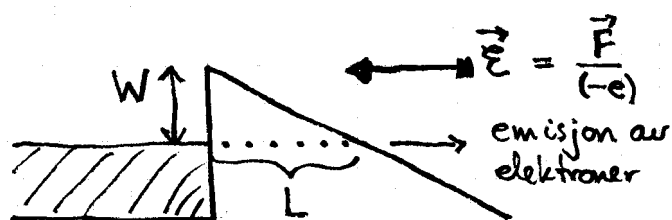
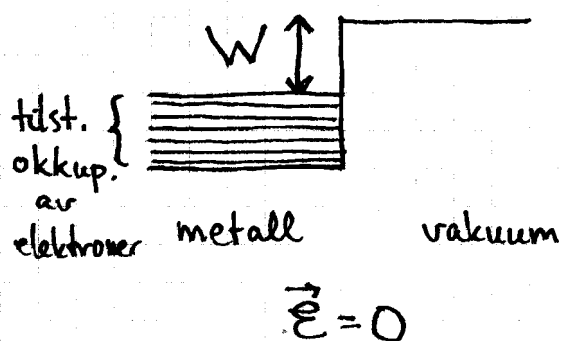
$$\Rightarrow T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa L} \ll 1,$$

men $T > 0$: Alltid en niss sanns. for å tunnelere gjennom barrieren! En ren QM effekt!

Anvendelser - av QM tunnelering:

(66)

1. Feltemisjon: Frigjøring av elektroner fra metall med elektrisk felt $\vec{E} = E \hat{x}$



$$\vec{E} = E \hat{x} = -\frac{F}{e} \hat{x} = \frac{1}{e} \frac{dV}{dx}$$

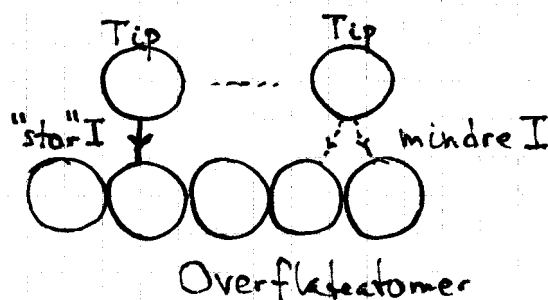
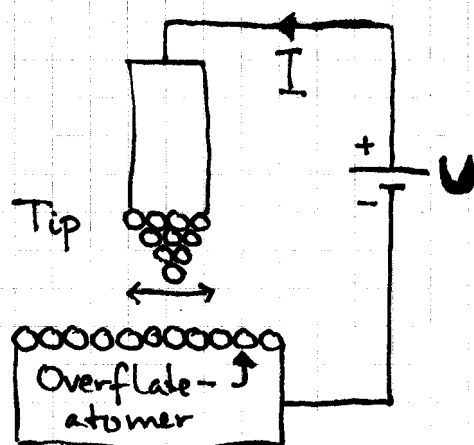
$$\Rightarrow V(x) = W - eEx$$

$\Rightarrow$ Tunnelering av elektroner gjennom "triangular" barriere med "effektiv bredde" $L = W/eE$.

Transm. sanns. $T \sim \exp(-2\kappa L) \Rightarrow -\ln T \sim +L \sim \frac{1}{E}$ (som obs. i exp.)

(Ofte uønsket effekt: elektrisk overslag i høyspent system etc.)

2. Scanning Tunneling Microscopy (STM)



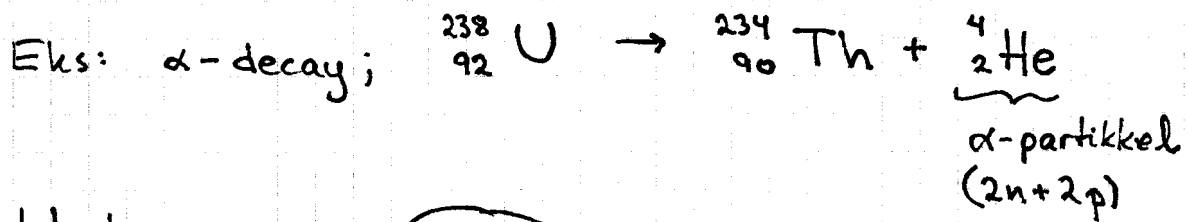
Tunnelingsstrøm I svært sensitiv for endringer i $L = \text{avstand tip - overflate}$

$\Rightarrow$ Avbildning på atomært nivå!
[Youtube: A boy and his atom]

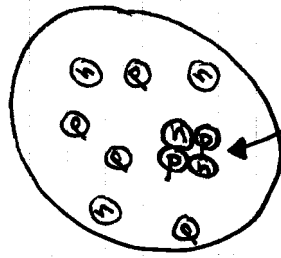
G. Binnig, H. Rohrer,
IBM Zürich; Nobelpris 1986

3. Kjernerreaksjoner

(67)

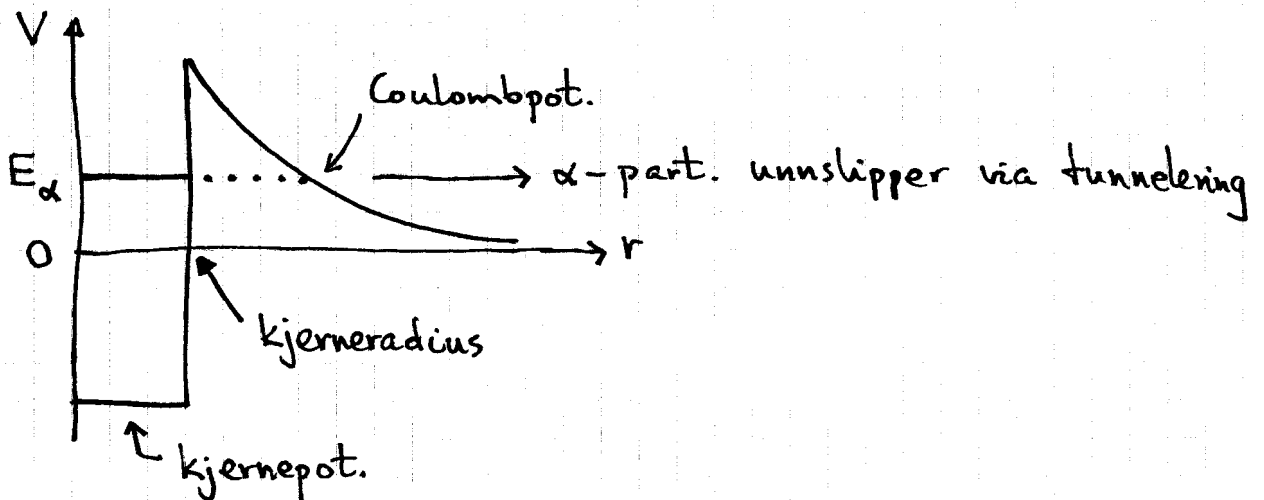


U-kjerne:

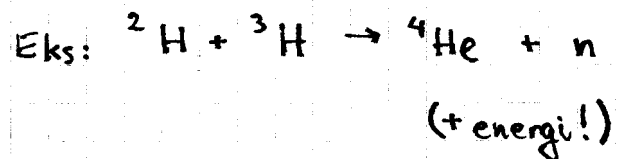
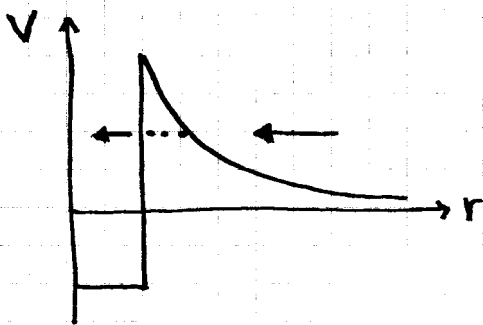


α -partikkel dannet i kjernen føler sterkt tiltrekkende kjernekrefter og sterkt frastøtende Coulombkrefter

Totalt potensial:



Omvendt prosess: Fusjon



Partikkel i 3D boks (PCH 5.2, YF 41.2) (68)

Fra s.30: $V(x) \rightarrow V(x,y,z) = V(\vec{r})$ og

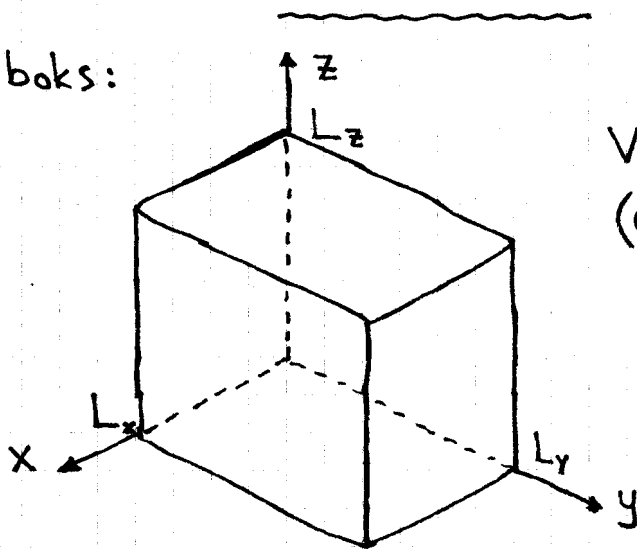
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \nabla^2 \quad \text{når } 1D \rightarrow 3D$$

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

$$\text{TUSL: } \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

$$\text{Normering: } \iiint_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,y,z)|^2 dx dy dz = 1$$

3D boks:



$V = 0$ inni boksen
($0 < x < L_x$; $0 < y < L_y$;
 $0 < z < L_z$) og
 $V = \infty$ utenfor boksen

Løsningene separerer: $\Psi(x,y,z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$

$$\Rightarrow \Psi(x,y,z) = C \cdot \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \cdot \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

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

der $n_j = 1, 2, 3, \dots$ ($j = x, y, z$)

[Dvs: Den forventede generalisering av 1D boks!]

Merk: 3D $\Rightarrow$ 3 kvangetall (her: n_x, n_y, n_z)

Degenerasjon:

Hvis to eller flere tilstander ~~har~~ samme energi, er disse tilstandene degenerert. (N tilst. med lik energi $\Rightarrow$ degenerasjonsgrad N)

Får degenerasjon i f.eks. kubisk 3D boks:

$$L_x = L_y = L_z = L \Rightarrow E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Grunntilstand: $E_{111} = 3 \cdot \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right)$; ikke degenerert

1. eksiterte nivå: $E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6 \cdot \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right)$; deg.grad=3

2. — " —: $E_{221} = E_{212} = E_{122} = 9 \cdot \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right)$; — " —

osv.

Tilstandstetthet ^{YF 42,5} (PCH 5.2.2)

(Density Of States; DOS)

Med stor boks (f.eks. makroskopisk!) blir det svært mange tilstander som ligger svært tett.

$\Rightarrow$ Ikke lenger hensiktsmessig å telte alle tilstandene!

Mer hensiktsmessig å snakke om tettheten av tilstander!

[Analogi: Teller ikke enkeltatomer i makroskopisk objekt; snakker heller om masse tettheten.]

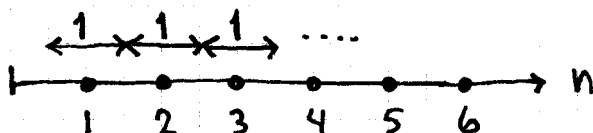
$$N(E) = \overset{\text{"antall"}}{\#} \text{ tilst. med energi mindre enn } E$$

$$\Rightarrow \Delta N = N(E + \Delta E) - N(E) = \# \text{ tilst. med energi i } (E, E + \Delta E)$$

$$\Rightarrow g(E) = \frac{\Delta N}{\Delta E} \approx \frac{dN}{dE} = \# \text{ tilst. pr energienhet} \\ = \text{tilstandstettheten (DOS)}$$

1D boks:

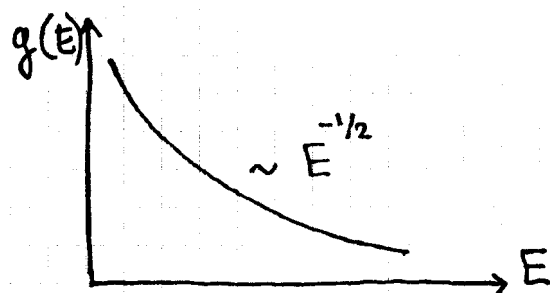
1 tilst. pr lengdeenhet langs n-aksen:



$$\Rightarrow N \text{ tilst. med energi mindre enn } E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} N^2 \quad (\text{s. 35})$$

$$\Rightarrow N(E) = \sqrt{2m} \frac{L}{\hbar \pi} \sqrt{E}$$

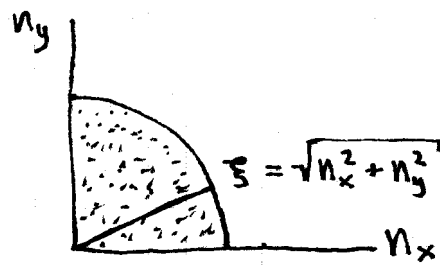
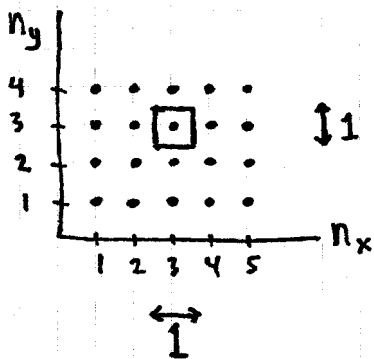
$$\Rightarrow g(E) = dN/dE = \frac{1}{2} \sqrt{2m} \frac{L}{\hbar \pi} E^{-1/2}$$



[Ser lett at $g(E)$ avtar med økende E på s. 35]

2D boks: $(E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2))$ for kvadratisk boks (71)

1 tilst. pr flateenhet i $n_x n_y$ -rommet:

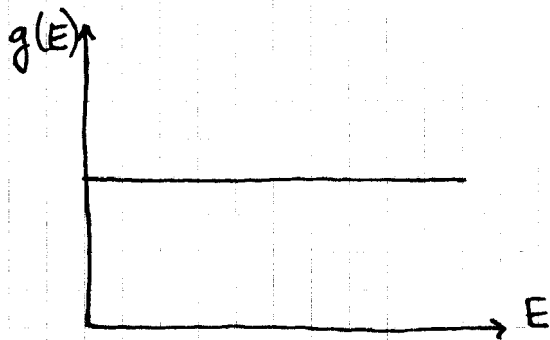


$\frac{1}{4} \cdot \pi \xi^2 = \# \text{ tilst. i kvartsrinkel med radius } \xi$

$\Rightarrow N = \frac{1}{4} \pi \xi^2$ tilst. med energi mindre enn $E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \xi^2$

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

$\Rightarrow g(E) = dN/dE = \frac{mL^2}{2\hbar^2 \pi} = \text{konstant}$



[Todimensjonale systemer kan lages; typisk i/nær grenseflaten mellom ulike halvledermaterialer]

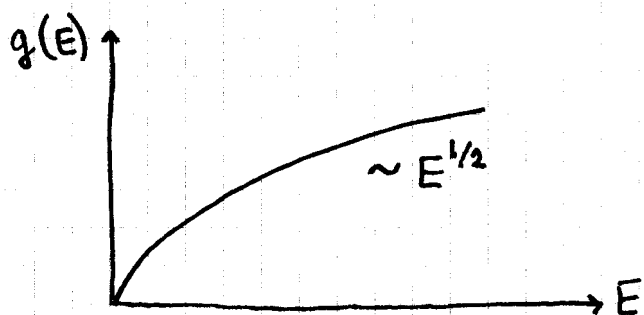
1 tilst. pr volumenhet i $N_x N_y N_z$ - rommet

$\Rightarrow N = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi \xi^3$ tilst. i oktant av kule med radius ξ ,

ders med energi mindre enn $E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \xi^2$

$$\Rightarrow N(E) = \frac{\pi}{6} \cdot \left(\frac{2mL^2}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2} \cdot E^{3/2}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow g(E) &= \frac{dN}{dE} = \frac{\pi}{6} \cdot (2m)^{3/2} \cdot \frac{L^3}{\hbar^3 \pi^3} \cdot \frac{3}{2} E^{1/2} \\ &= \frac{(2m)^{3/2} L^3}{4 \hbar^3 \pi^2} \cdot E^{1/2} \end{aligned}$$



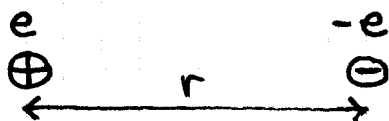
- $g(E)$ sentral størrelse i problemer med mange partikler, f.eks. faste stoffers fysikk
- $g(E) \sim E^{\frac{D}{2}-1}$ i D dimensjoner
- $g(E) \sim L^D$ i D dimensjoner, ders $g(E)$ er prop. med systemets størrelse

Coulombpotensialet

(PCH 5.6, 5.7; YF 41.3)

73

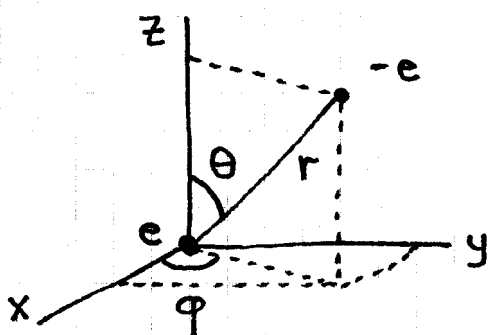
H-atomet:



$$V(x, y, z) = V(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}) = V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

det er kulesymmetrisk potensial

⇒ hensigtsmæssig med kulekoordinater (r, θ, φ) :



$$z = r \cos \theta$$

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

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

Som for 3D boks kan TUSL separeres:

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

Giv separate ligninger for R , Θ og Φ :

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

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

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi = 0$$

Krav til løsninger: $\lim_{r \rightarrow \infty} R(r) = 0$; $|\Theta(\theta)| < \infty$ for alle θ ;

$|\Phi(\varphi)| < \infty$ for alle φ ; $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$

$$\Rightarrow R(r) \sim e^{-\alpha r} \cdot (\text{polynom i } r) \quad (\alpha > 0)$$

$$\Theta(\theta) \sim \text{polynom i } \sin\theta \text{ eller } \cos\theta$$

$$\Phi(\varphi) \sim e^{im_l \varphi} \quad [\text{som vi ser!}]$$

$$E_n = - \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{me^4}{2n^2 \hbar^2} = - \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots = \text{hovedkvantetallet}$$

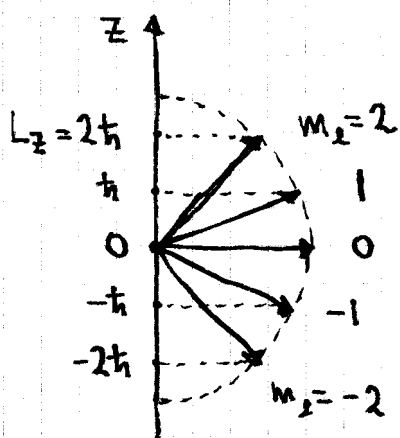
$$L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar = \text{dreieimpulsen}$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 = \text{kvantetall for dreieimpulsen}$$

$$L_z = m_l \hbar = \text{dreieimpulsens komponent i en gitt retning, valgt langs z-aksen}$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l = \text{magnetisk kvantetall}$$

$$\text{Eks: } l = 2, \text{ dvs } L = \sqrt{2 \cdot 3} \hbar = \sqrt{6} \hbar$$



Vi kan kjenne L og (f.eks. komponenten) L_z presist samtidig, men da kan vi ikke kjenne L_x eller L_y !

Notasjon:-

n	1	2	3	4	
skall	K	L	M	N	

$\langle r \rangle$ øker med n ; $\langle r^{-1} \rangle^{-1} \sim n^2$

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

("sharp", "principal", "diffuse", "fundamental", deretter alfabetisk)

Exs: $\psi_{100} (= \psi_{n \ell m_\ell}) = 1s$ (K-skallet)

$$\psi_{200} = 2s$$
$$\left. \begin{array}{l} \psi_{200} = 2s \\ \psi_{21-1}, \psi_{210}, \psi_{211} = 2p \end{array} \right\} \text{(L-shell)}$$

OSU.

Degenerasjonsgrad:

For gitt n : n mulige verdier for l ($0, 1, 2, \dots, n-1$)

For gitt $l: 2l+1$ ————— " ————— m_l

⇒ Antall ulike tilstander Ψ_{n,m_z} for gitt energi E_n :

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \cdot \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$$

$$n=1: g_1=1; \quad n=2: g_2=1+3=4; \quad n=3: g_3=1+3+5=9 \text{ or}$$

[Hva med spinn?! Senere!]

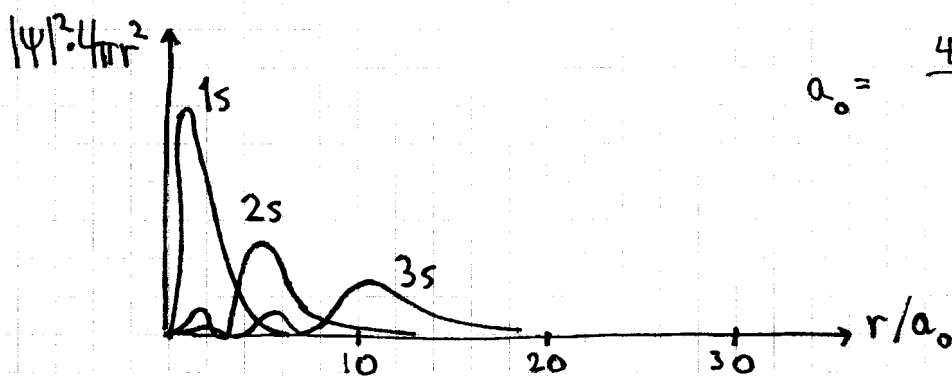
Sannsynlighetsfordeling:

(76)

$dP = |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 dV =$ sanns. for å finne elektronet
i lite volum dV omkring "stedet" (r, θ, ϕ)

Enklest å visualisere radialfordelingen ved å
velge $dV = 4\pi r^2 dr =$ tynt kuleskall med radius r
og tykkelse dr

$\Rightarrow dP = |\Psi|^2 4\pi r^2 dr =$ sanns. for å finne
elektronet i $(r, r+dr)$



$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 0.529 \text{ \AA}$$

= Bohr-radius

Eks: Finn $\langle r \rangle$ for $\Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$

Løsn: $\langle r \rangle = \int_0^\infty r |\Psi_{1s}|^2 dV = \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r e^{-2r/a_0} 4\pi r^2 dr$

Løses med delvis integrasjon 3 ganger

$$\Rightarrow \langle r \rangle = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \cdot \frac{3}{8} a_0^4 = \underline{\underline{\frac{3}{2} a_0}} \quad (\approx 0.8 \text{ \AA})$$

Hydrogenlignende systemer: (PCH 5.9, YF 41.3)

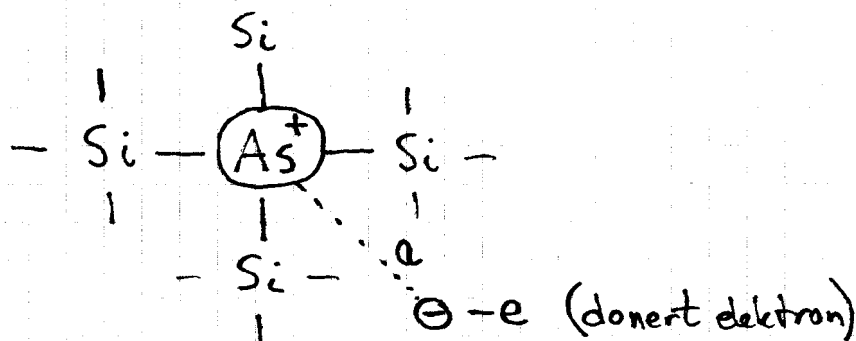
(77)

- Ioner med 1 elektron: He^+ ($Z=2$), Li^{2+} ($Z=3$), ...

Tilsvarende energispektrum, med $e^2 \rightarrow Ze^2$ i $V(r)$

$$\Rightarrow E_n = - \frac{m (Ze^2)^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot 2n^2 \hbar^2} = -13.6 \text{ eV} \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

- Donoratomer i halvledere:



$$\epsilon_0 \rightarrow \epsilon = \epsilon_r \epsilon_0 \sim 10 \epsilon_0 \quad (\epsilon_r = \text{relativ permittivitet for materialet})$$

$$m \rightarrow m^* \sim 0.1 m \quad (m^* = \text{elektronets effektive masse i materialet})$$

$$\Rightarrow a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} \rightarrow a = \frac{4\pi\epsilon \hbar^2}{m^* e^2} \sim 100 a_0$$

(a = effektiv Bohr-radius for det svakt bundne elektronet; $E_1 \sim -13.6 \text{ eV} \cdot \frac{(m^*/m)}{(\epsilon/\epsilon_0)^2} \approx -15 \text{ meV}$)

- Eksitoner: Elektron-Hull-par i halvledere

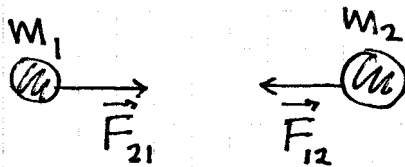
$$\text{Eks: GaAs: } m_e^* \approx 0.067 m, \quad m_h^* \approx 0.5 m, \quad \epsilon_r \approx 13.2$$

$$\Rightarrow \text{redusert masse } \tilde{m} \approx 0.059 m$$

$$\Rightarrow E_n \approx - \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \cdot \left(\frac{1}{\epsilon_r}\right)^2 \cdot \frac{\tilde{m}}{m} \approx - \frac{4.9 \text{ meV}}{n^2}$$

$$\text{og } a \approx 120 \text{ \AA}$$

Redusert masse:



$$N2: \vec{F}_{21} = m_1 \vec{a}_1, \quad \vec{F}_{12} = m_2 \vec{a}_2$$

$$N3: \vec{F}_{12} = -\vec{F}_{21} \Rightarrow m_2 \vec{a}_2 = -m_1 \vec{a}_1 \Rightarrow \vec{a}_2 = -\frac{m_1}{m_2} \vec{a}_1$$

$$\begin{aligned} \text{Relativ akselerasjon: } \vec{a}_{\text{rel}} &= \vec{a}_1 - \vec{a}_2 = \vec{a}_1 \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right) \\ &= \underbrace{m_1 \vec{a}_1}_{\vec{F}_{21}} \cdot \underbrace{\frac{m_2 + m_1}{m_1 m_2}}_{\frac{1}{\tilde{m}}} \end{aligned}$$

Dvs: Bevegelsen til m_1 relativt m_2 blir som ~~en~~ bevegelsen til en partikkel med reduert masse

$$\tilde{m} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \left(\frac{1}{\tilde{m}} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)$$

som utsettes for den innbyrdes kraften $\vec{F}_{21}$ fra m_2 på m_1

$$\text{Eks: Elektron i H: } \tilde{m} = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p} \approx \underline{0.9995 m_e}$$

$$\text{--- " --- deuterium: } \tilde{m} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p + m_n}} \approx \underline{0.9997 m_e}$$

$$\text{--- " --- tritium: } \tilde{m} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{2m_n + m_p}} \approx \underline{0.9998 m_e}$$

Elektron i eksiton i GaAs (s.77):

$$\tilde{m} = \frac{0.067 \cdot 0.5}{0.067 + 0.5} m_e = \underline{0.059 m_e}$$

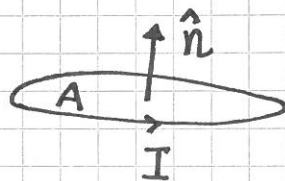
Effekter av magnetfelt

(PCH 8, 14
YF 41.4, 27.7)

(79)

Magnetiske dipoler og magnetisk moment

Magn. dipol = strømsløyfe :

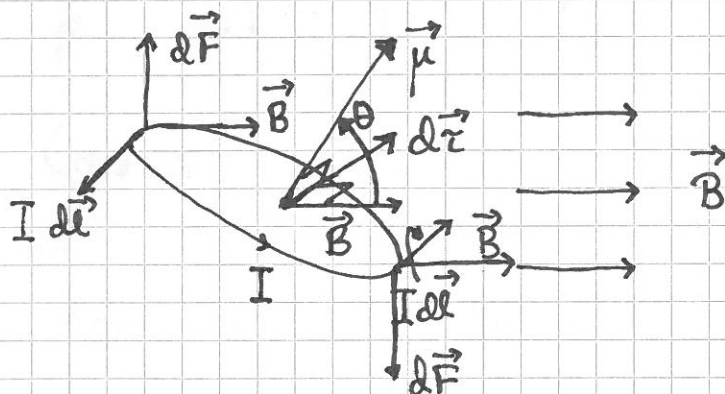


Magn. moment : $\vec{\mu} = I\vec{A} = IA\hat{n}$

A = areal omsluttet av strøm I

$\hat{n}$ = enhetsvektor $\perp$ omsluttet areal

Magn. dipol $\vec{\mu}$ i magnetfelt $\vec{B}$: $\left\{ \begin{array}{l} \vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B} \\ \Rightarrow d\vec{F} = I d\vec{l} \times \vec{B} \end{array} \right\}$

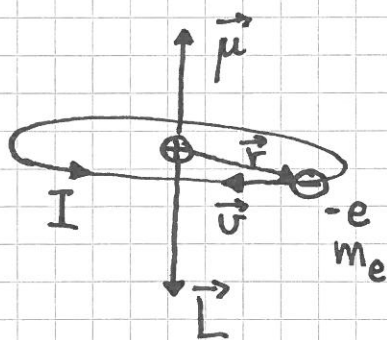


Dreiemoment på $\vec{\mu}$: $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = -\vec{B} \times \vec{\mu}$
 $= -\mu B \sin \theta$

$\Rightarrow$ Tendens til innretting av $\vec{\mu}$ langs $\vec{B}$;
minst pot.energi når $\vec{\mu} \parallel \vec{B}$, størst med $\vec{\mu} \parallel -\vec{B}$:

$$\boxed{V(\theta) = -\int \tau(\alpha) d\alpha = -\mu B \cos \theta = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}}$$

Atom (a la Bohr):



$$I = \frac{q}{T} = \frac{-e}{(2\pi r/v)}$$

$$= -\frac{ev}{2\pi r}$$

(T = omloppstid)

Dreieimpuls:

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

Magn. moment:

$$\mu = I A = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{evr}{2} = \frac{e}{2m_e} L$$

(Negativt ladet partikkel $\Rightarrow \vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$)

Bohr: $L = n\hbar$ ($n=1,2,3,\dots$) (Feil...!)

$$\Rightarrow \mu = \frac{e\hbar}{2m_e} \cdot n \quad (\text{i Bohrs modell})$$

Bohr magneton: $\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$

($[B] = \text{T (tesla)} \Rightarrow [\mu] = \text{J/T}$)

Schrödinger (Korrekt, ikke-rel.):

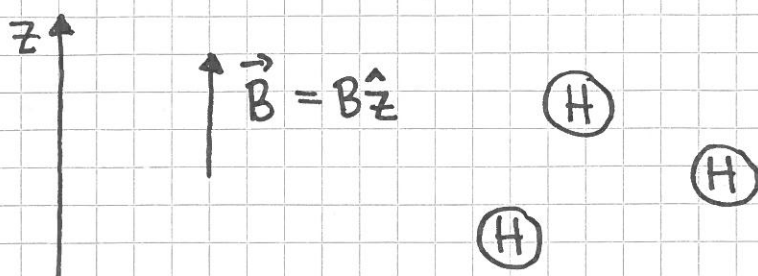
$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad (l=0,1,2,\dots,n-1)$$

$$L_z = m_l \hbar \quad (m_l=0,\pm 1,\pm 2,\dots,\pm l)$$

Zeeman-effekten (YF 41.4)

(81)

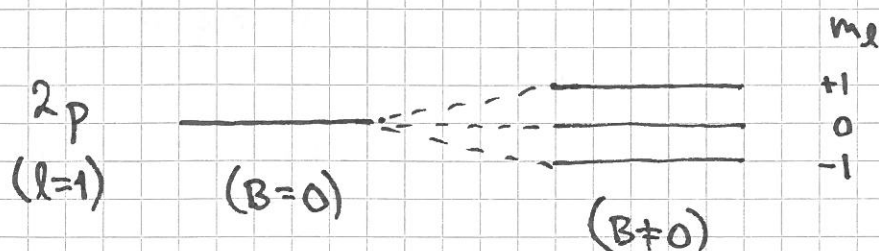
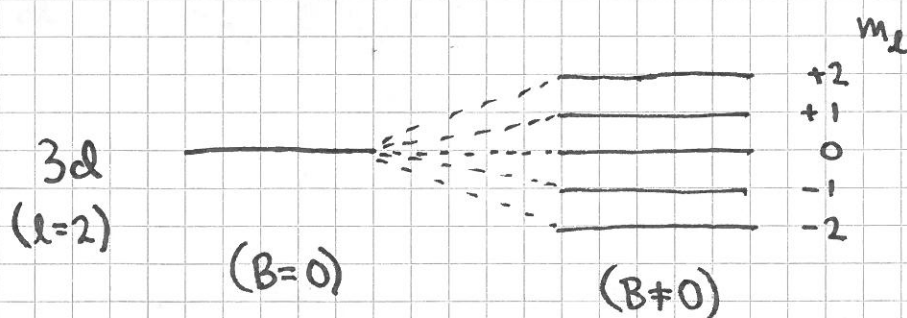
= oppsplitting av atomære energinivåer i $\vec{B}$ -felt



$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \Rightarrow \mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m_e}$$

$$\Rightarrow V = m_l \frac{e\hbar}{2m_e} B = m_l \mu_B B \quad (m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l)$$



Dvs: Oppsplitting i $2l+1$ nivåer med $\Delta E \approx \mu_B B$

Utvalgsregler for overgang mellom energinivåer, med emisjon eller absorpsjon av foton:

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

Tillatte overganger

Eks: 9 mulige overganger mellom 3d og 2p, men bare 3 ulike ^{foton-}energier:

$$\Delta E = E_{3d} - E_{2p} + \begin{cases} \mu_B B \\ 0 \\ -\mu_B B \end{cases}$$

$$\mu_B = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$$

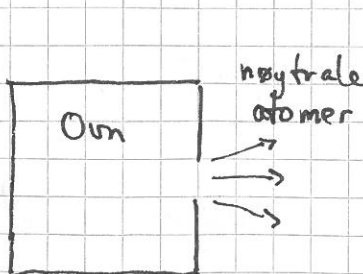
$$\Rightarrow \mu_B B \sim 10^{-23} \text{ J} \text{ hvis } B \sim 1 \text{ T (som er ganske sterkt)}$$

$$\sim \underline{6 \cdot 10^{-5} \text{ eV}}$$

$$\lll E_{3d} - E_{2p} = 13.6 \text{ eV} \left\{ \frac{1}{3^2} - \frac{1}{2^2} \right\} \sim \underline{2 \text{ eV}}$$

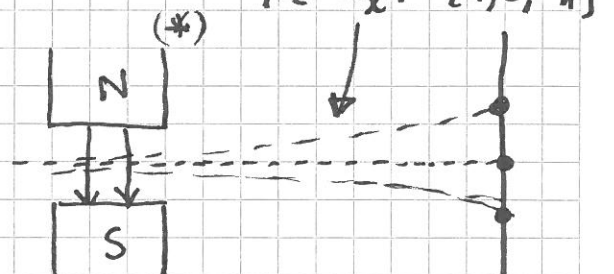
Spinn (YF 41.5)

Stern-Gerlach - eksp: (1922)



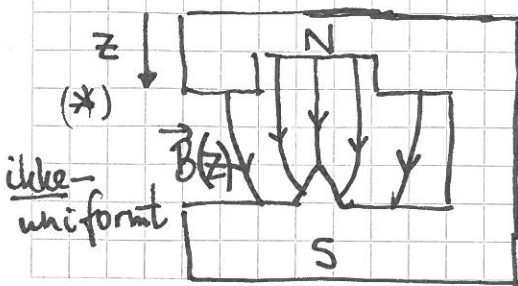
smal spalte

$F_{\text{f.eks.}}$
 $l=1$



Forventet hvis $\mu_z = m_l \hbar = \{ \hbar, 0, -\hbar \}$

Dis: Forventer alle antall I_{max}



$$\Rightarrow \text{Netto kraft p\aa atomene pga } \vec{B}(z):$$

$$\vec{F} = -\nabla V = -\nabla (-\mu_z B_z(z))$$

Hvis (bane-)dreieimpuls er "det hele",
forventes $2l+1$ ulike $I_{\max}$ på skjermen.

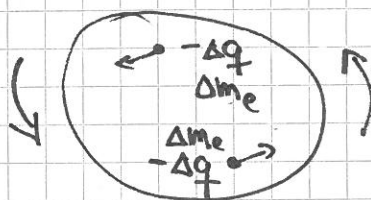
Exp: Noen ganger et like antall $I_{\max}$!? Og noen ganger 2 !

Tyder på halvtallig kvantetall j ~~for~~ $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots)$

"total dreieimpuls", slik at antallet mulige verdier
for m_j , $2j+1$, blir et partall !

Goudsmidt & Uhlenbeck (1925):

Elektroner oppfører seg som spinnende kuler med ladning
 $\Rightarrow$ indre dreieimpuls $\propto$ tilhørende magnetisk moment!



$\Rightarrow$ indre dreieimpuls $\vec{S}$

og magn. moment
$$\vec{\mu}_s = g_s \frac{(-e) \hbar}{2m_e} \vec{S}$$

$\uparrow$
gyromagnetisk
faktor

Dirac-ligningen (relativistisk) gir $g_s = 2$.

Mer presis teori (og eksp!): $g_s \approx 2 \cdot 1.00115965$
(QED)

[2006: $g_s^{\text{exp}} \approx 2.00231930436170 \approx g_s^{\text{teori}}$]

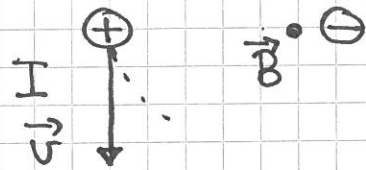
To stk $I_{\max}$ i Stern-Gerlach $\Rightarrow S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$!!!

Dvs: $\boxed{S_z = m_s \hbar ; m_s = \pm \frac{1}{2}}$ Og $S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)} \hbar = \sqrt{3/4} \hbar$
[Analogi med L_z og $L = |L|$!]

Spinn - bane - kobling:



Sett fra $\ominus$ sitt ståsted:



$\Rightarrow \ominus$ "ser" $\oplus$ i beregelse $\Rightarrow$ strømsløkke!

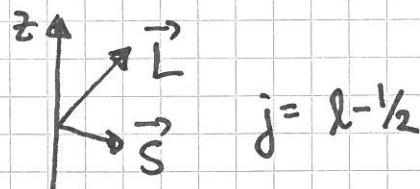
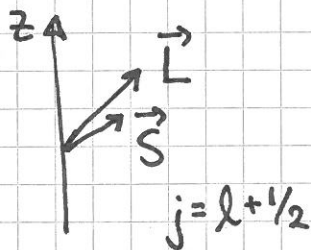
$\Rightarrow$ magnetfelt $\vec{B}$ der $\ominus$ befinner seg; $|\vec{B}|$ prop. med $|\vec{L}|$

$\Rightarrow V \sim \vec{S} \cdot \vec{L}$ ($V \sim -\vec{S} \cdot \vec{B} \sim \vec{S} \cdot \vec{L}$) ($\vec{B} \sim \vec{L}$)

Total dreieimpuls:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} ; J = |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)} \hbar$$

$$j = |l \pm 1/2|$$



Eks: $l=1 \Rightarrow j = \frac{1}{2}$ eller $\frac{3}{2}$

Notasjon $^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$

2: # spinn-orienteringer

P: flkr. $l=1$ (p)

$1/2, 3/2$: j

Generelt: $^{2S+1}L_J$

[H: $S=1/2$
Andre atomer: $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$]

Pauliprinsippet (W. Pauli, 1925)

To elektroner kan ikke okkupere en gitt QM tilstand,
 der gitt n, l, m_l og m_s

$$[n \geq 1; 0 \leq l \leq n-1; |m_l| \leq l; m_s = \pm 1/2]$$

$\Rightarrow$ Inntil 2 elektroner i K-skallet

$$(\psi_{100} \cdot \chi_{1/2} \text{ og } \psi_{100} \chi_{-1/2})$$

$\uparrow$ spinbølgefunk.

Inntil 8 el. i L-skallet

$$(\psi_{200} \chi_{1/2}, \psi_{200} \chi_{-1/2}, \psi_{211} \chi_{1/2}, \psi_{211} \chi_{-1/2}, \\ \psi_{210} \chi_{1/2}, \psi_{210} \chi_{-1/2}, \psi_{21-1} \chi_{1/2}, \psi_{21-1} \chi_{-1/2})$$

osv.

$\Rightarrow$ Det periodiske system

H : $1s$

He : $1s^2$

Li : $1s^2 2s$

Be : $1s^2 2s^2$

B : $1s^2 2s^2 2p$

C : $1s^2 2s^2 2p^2$

- He, Ne, Ar, ... : Fylt $1s$, $2s$ og $2p$, $3s$ og $3p$, ...

Liten tendens til å argi/oppta/dele elektroner.

"Edelgasser"; svært lite reaktive.

- Li, Na, K, ... : Ett svakt bundet elektron i ytterste skall, som lett argis (til f.eks. F, Cl, Br, ...)

- F, Cl, Br, ... : Mangler ett elektron i ytterste skall;
"sterkt ønsket"; høy elektronegativitet.

- $E_{3d} \gtrless E_{4s} \Rightarrow$ "uklart bilde" fra $Z=19$ og oppover

- 21-30, 39-48, ... : overgangsmetaller med delvis fylte $3d$ og $4s$ "subshells"

Molekyler og kondenserte medier (YF42)

(87)

Kjemisk binding mellom atomer A og B, dvs



krever negativ reaksjonsenergi, dvs

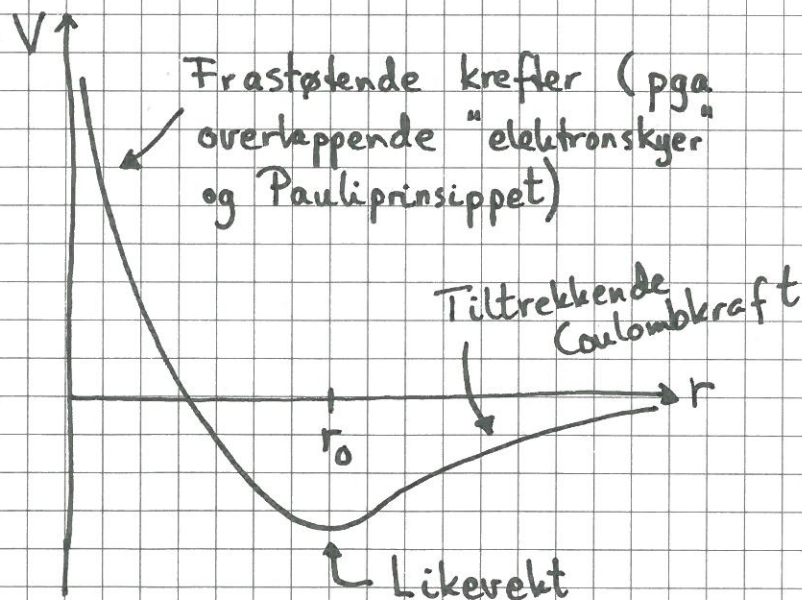
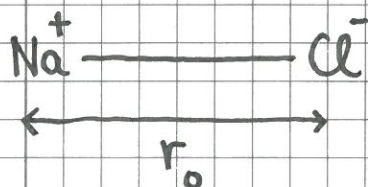
$$\Delta E = E(AB) - [E(A) + E(B)] < 0.$$

Kaller $|\Delta E|$ for bindingsenergien.

Klassifiserer bindingstyper ut fra styrke og elektrondeling.

Ionebinding

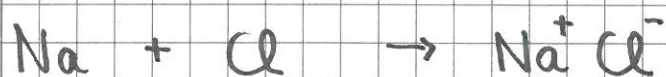
Vanlig i salter, f.eks NaCl, LiF.



Energiregnskap:

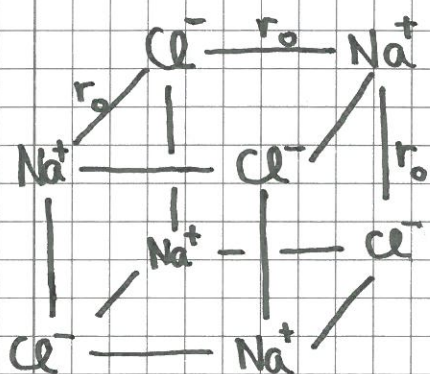


$\Rightarrow$ Bindingsenergi for reaksjonen

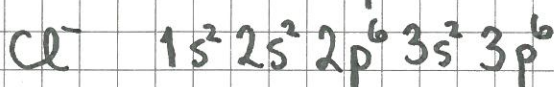


$$\text{blir } |\Delta E| = |1.5 \text{ eV} - 5.7 \text{ eV}| = \underline{4.2 \text{ eV}}$$

• Krystallstruktur for NaCl: Flatesentrert kubisk (fcc)



Elektronkonfigurasjon:



Dvs: Fylt L-skall i Na^+ og
fylt M-skall i Cl^-

$\Rightarrow$ Hver Na^+ har 6
nærmeste nabo Cl^- ,
og omvendt

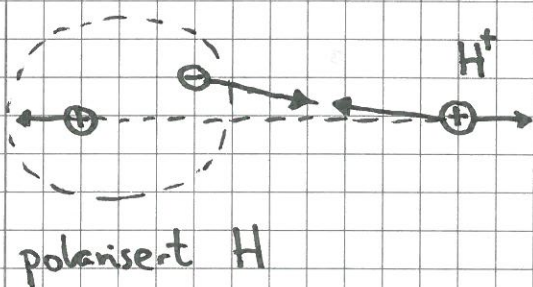
Kovalent binding

(89)

"Deling av elektroner" (ett eller flere elektronpar)



Kvalitativt energiregnskap:

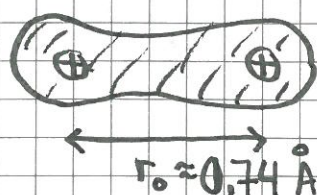


Netto tiltrekning

$$\Rightarrow \Delta E_1 < 0$$



De to elektronene i H_2 i romlig symmetrisk tilstand, med "betydelig" $|\Psi|^2$ mellom de to kjernene:

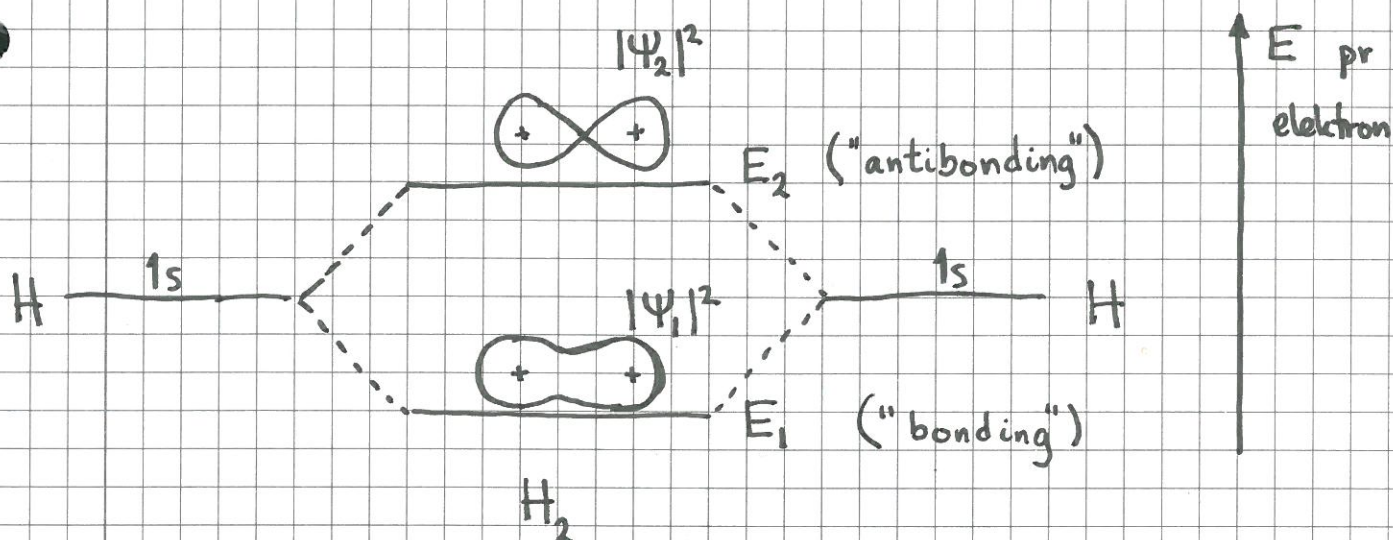


[Ert: $H:H$]

Elektroner er fermioner (halvtallig spinn), og total bølgefunksjon for 2 eller flere fermioner er antisymmetrisk.

$\Rightarrow$ Romlig symmetrisk krever antisymm. spinn, dvs ett opp og ett ned!

Energidiagram:



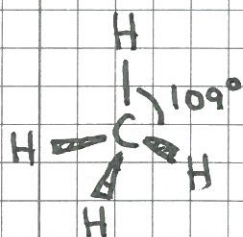
Ψ_1 : såkalt "bindende molekylorbital"; plass til begge de to elektronene, $\uparrow$ og $\downarrow$; lavere energi enn den såkalt "antibindende molekylorbitalen" Ψ_2

[Øving 5: 1-dim. dobbeltbrønn som modell for 2-atomig molekyl]

Molekylorbitaler: En-partikkel-tilstander i molekyler, "konstruert" som lineærkombinasjoner av atomære orbitaler.

$$\begin{array}{c} \Psi \\ \uparrow \\ \text{MO} \end{array} = \sum_j c_j \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{koeffisienter} \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{AO} \end{array} \phi_j$$

Eks:

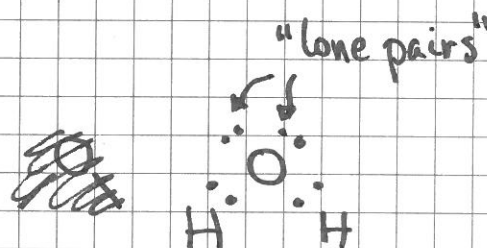
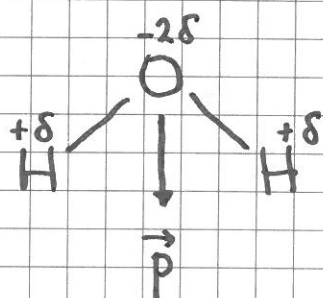
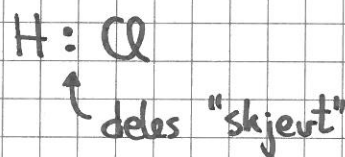
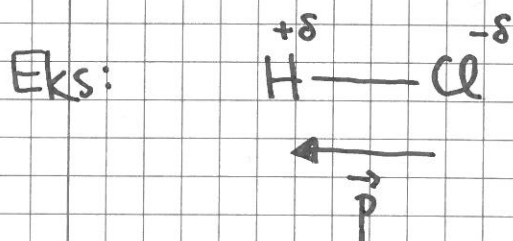


$$\Psi_{\text{CH}_4} = c_1 \phi_{1s}^{\text{H}} + c_2 \phi_{2s}^{\text{C}} + c_3 \phi_{2p_x}^{\text{C}} + \dots$$

Kan nå lage retningsavhengige MO som beskriver molekylets geometri (dvs bindingslengder og -vinkler); jf såkalt sp^3 -hybridisering i kjemi!

Polar kovalent binding

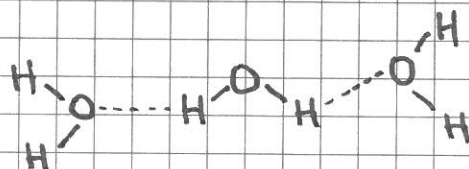
- Molekyler med permanent elektrisk dipolmoment $\vec{p}$, pga atomenes ulike "ønsker" om ekstra elektron(er).



Merk at enkeltatomenes presise ladning og radius ikke er veldefinerte størrelser. Det er ingen entydig oppskrift for å fordele sannsynlighetskettheten $|\psi|^2$ ~~velles~~ på de enkelte atomene, og heller ingen entydig størrelse på hvert atom!

Svake bindinger mellom nøytrale atomer og molekyler

- van der Waals - krefter er svak tiltrekning pga fluktuerende elektriske dipoler; styrke: $|\Delta E| \approx 0.1 \text{ eV}$
- hydrogenbinding er svak binding via H-atom;
i f.eks. vann:



Molekylære spektra

- Molekyl med N atomer kan bevege seg via
 - translasjon (dvs som helhet, gjennom rommet) (^{tyngdepunkt-}bevegelsen!)
 - rotasjon (omkring tyngdepunktet)
 - vibrasjon (av enkeltatomene, omkring sine likevektsposisjoner, uten at tyngdepunktet beveger seg)

Hvert atom beskrives av 3 uavhengige koordinater (i 3D), og vi sier at det har 3 (bevegelses-) frihetsgrader.

⇒ Molekyl med N atomer har $3N$ frihetsgrader.

Translasjon (som stivt legeme, langs x, y, z): 3 frihetsgrader

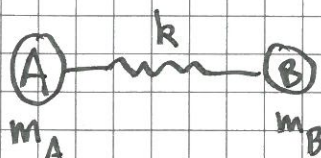
Rotasjon (som stivt legeme, omkring x, y, z): — " —

⇒ $3N - 6$ vibrasjonsfrihetsgrader

[Unntak: Lineære molekyler, f.eks. O_2 , CO_2 , C_2H_2 osv., har kun 2 rotasjonsfrihetsgrader, og dermed $3N - 5$ vibrasjonsfrihetsgrader; se ~~side 93~~ side 94]
 CO_2

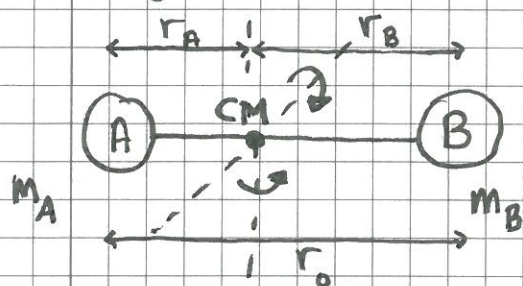
Translasjon er (som regel!) ikke kvantisert, med mindre "boksen" har svært lite volum.

Fra før (s. 62-63):



$$E_n^{vib} = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega ; \quad n = 0, 1, 2, \dots ; \quad \omega = \sqrt{k / \tilde{m}} ;$$

$$\tilde{m}^{-1} = m_A^{-1} + m_B^{-1} \quad (\text{red. masse})$$

Rotasjon ("Stiv rotator")

CM = tyngdepunktet
(center-of-mass)

$$L = I\omega \quad (L = \text{dreieimpuls}; I = \text{treghetsmoment}; \omega = \text{vinkel-fart})$$

$$K^{\text{rot}} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} I \left(\frac{L}{I} \right)^2 = \frac{L^2}{2I} = E^{\text{rot}} \quad (V^{\text{rot}} = 0)$$

TUSL

(s.74)

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

(dvs: dreieimpulsen er kvantisert også her!)

$$\Rightarrow \text{Kvantisert rotasjonsenergi: } E_l^{\text{rot}} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Treghetsmomentet (beregnes med klassisk mekanikk; se YF 9.4-9.6):

$$I = m_A r_A^2 + m_B r_B^2 = \dots = \tilde{m} r_0^2$$

(mhp CM)

$$(r_0 = r_A + r_B; \quad \tilde{m} = m_A m_B / (m_A + m_B))$$

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

Utvalgsregler: Tillatte overganger "via foton" ("radiative transitions") når $\Delta l = \pm 1$ (rotasjon) og

$$\Delta n = \pm 1 \quad (\text{vibrasjon})$$

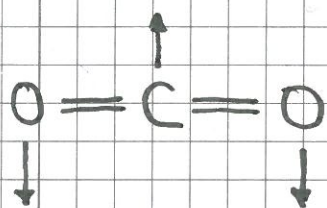
[Se YF Fig 42.9 og Øving 5]

Vibrasjon i fleratomige ($N \geq 3$) molekyler:

- Kalles normale moder (fordi de ulike vibr.beregelsene i en viss forstand er ortogonale).

Eks: CO_2 ; lineært, $N=3 \Rightarrow 3N-5 = 4$ normale moder

[Rotasjon om molekylets akse tilsvarer $I \approx 0$, og dermed $\Delta E^{\text{rot}}(\infty)$ svært stor; dermed er det "i kvantemekanisk forstand" bare to rotasjonsfrihetsgrader for lineære molekyler!]



bøye, i planet



bøye, ut av planet

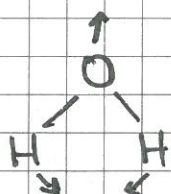


strekke, symmetrisk



strekke, asymmetrisk

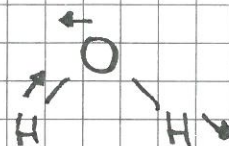
Eks2: H_2O ; ikke lineært; $N=3 \Rightarrow 3$ normale moder



bøye



strekke, symmetrisk



strekke, asymmetrisk

[Tips: Google og finn animasjoner av dette!]

Faste stoffer

95

- ["Kondenserte medier" omfatter også væsker og såkalt "myk materiale" (soft matter), som f.eks. leire, smør etc. La oss holde oss til rimelig perfekte faste stoffer her!]

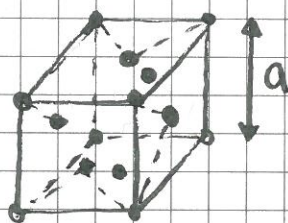
- Krystall: system med orden med lang rekkevidde (∞ lang i perfekt krystall)

Viktige eks: (se YF 42.3 og internett)



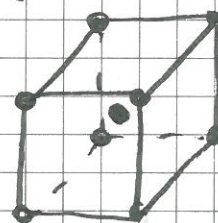
SC

(simple cubic)



FCC

(face centered cubic)
(flatesentrert)



BCC

(body centered cubic)
(romsentrert)

og HCP (hexagonal close packed)

Antall nærmeste naboer:

SC 6

FCC 12

BCC 8

HCP 12

Al, Ag, Au, Cu er eks. på FCC

Diamantstruktur: FCC med 2-atomig basis (2

like atomer), et atom i posisjon $(0,0,0)$ og et atom i pos. $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$ [a = gitterkonstant]

Eks: C (diamant), Si, Ge, Sn

[Gr. IV i periodesystemet]

Sinkblendestruktur: FCC med 2 ulike atomer i basis.

Eks: ZnS ("sinkblende"), GaAs, AlAs,...

Bindingstyper i krystaller:

Ionsk (NaCl, LiF, ...); Kovalent (C, Si, Ge, ...);

Polar kovalent (GaAs, ...);

Hydrogenbinding / van der Waals-binding

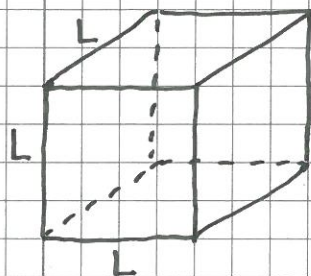
(is, polyetylen, ...); og

Metallbinding (1 eller flere elektroner "figis" fra hvert atom $\Rightarrow$ "gass" av tilnærmet frie elektroner inni metallet, beveger seg i "bakgrunn" av positivt ionegitter)

Energibånd

(97)

"Ytterste" elektron(er) i metaller beskrives brukbart med fri-elektron-modell, dvs som ikke-vekselvirkende partikler i 3D boks [se s. 68]:



Potensial: 0 inni, ∞ utenfor

Volum: $V = L^3$ Antall elektroner: N

TUSL $\Rightarrow \Psi(x,y,z) \sim$ produkt av sinus-funk, evt. (mer hensiktsmessig her!)

$$\Psi(\vec{r}) = A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{plane bølger})$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} (i\vec{k}) \cdot (i\vec{k}) \Psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi$$

$$\Rightarrow E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \text{som med } E = p^2/2m = \frac{1}{2}mv^2$$

gir $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ og $\vec{v} = \hbar\vec{k}/m$

Fra s. 72: $g(E) = \frac{(2m)^{3/2} L^3}{4\hbar^3 \pi^2} \cdot E^{1/2} = \text{tilstandstettheten}$
(romlige tilstander)

Grunntilstanden: Ved $T=0$ okkuperer de N elektronene de N tilstandene som har lavest energi [Pauliprinsippet: Max 1 elektron pr tilstand!], dvs $N/2$ romlige tilstander med 2 elektroner i hver, et med spinn opp ($\uparrow$) og et med spinn ned ($\downarrow$).

Fra s. 72: $2 \cdot \frac{\pi}{6} \cdot \frac{(2m)^{3/2} L^3}{\hbar^3 \pi^3} \cdot E^{3/2} = \text{antall tilstander, inkl. spinn, med energi mindre enn } E$

↑
spinn!

Energien til høyeste okkuperte tilstand (ved $T=0$)

kalles Fermi-energien E_F . Dermed har vi:

$$N = \frac{1}{3} \cdot \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3 \pi^2} L^3 \cdot E_F^{3/2}$$

Innfører $n = N/V$ = antall elektroner pr volumenhet

(som kan måles med Hall-effekten), som med $V = L^3$ gir

$$n = \frac{(2m E_F)^{3/2}}{3 \hbar^3 \pi^2}, \quad \text{som løst mhp } E_F \text{ gir}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot (3\pi^2 n)^{2/3}, \quad \text{og dermed}$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad p_F = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3} \quad \text{og} \quad v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3}$$

(Fermi-impuls) (Fermi-hastighet)

Total energi for de N elektronene:

$$E_{\text{tot}} = 2 \int_0^{E_F} E \cdot g(E) dE \quad \left[\text{fordi } g(E)dE = \text{antall romlige tilst. mellom } E \text{ og } E+dE \right]$$

$$= 2 \cdot \frac{(2m)^{3/2}}{4\hbar^3 \pi^2} \cdot V \cdot \int_0^{E_F} E^{3/2} dE = \frac{(2m)^{3/2}}{5\hbar^3 \pi^2} V \cdot E_F^{5/2}$$

$\int_0^{E_F} E^{3/2} dE = \frac{2}{5} E_F^{5/2}$

$$= \frac{3}{5} \cdot N \cdot E_F$$

Gjennomsnittsenergi pr elektron:

$$\langle E \rangle = \frac{E_{\text{tot}}}{N} = \frac{3}{5} E_F \quad \left[\text{Større enn } \frac{1}{2} E_F \text{ fordi } g(E) \sim \sqrt{E} \right]$$

[øker med økende E .]

Eks: I kobber (Cu) er $\rho = 8.96 \text{ g/cm}^3$, atomær masse er $m_{\text{Cu}} = 63.5 \text{ u}$, og atomnummeret er 29, slik at elektronkonfigurasjonen er $\frac{1s^2}{2} \frac{2s^2 2p^6}{8} \frac{3s^2 3p^6 3d^{10}}{18} 4s^1$, som gir ett fritt elektron pr atom.

Finn n , E_F , v_F , $\lambda_F = 2\pi/k_F$ og $T_F = E_F/k_B$.

Løsning: Med $\rho = M/V$ og $m_{\text{Cu}} = M/N_{\text{Cu}} = M/N$ blir elektrontettheten $n = N/V = \rho/m_{\text{Cu}} = 8.96 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3 / [63.5 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}] \approx 8.45 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$

$$\Rightarrow \text{Fermienergi: } E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} = 1.12 \cdot 10^{-18} \text{ J} = \underline{7.0 \text{ eV}}$$

$$\text{Fermihastighet: } v_F = \sqrt{2E_F/m} = \underline{1.6 \cdot 10^6 \text{ m/s}} \quad (= \frac{1}{2} \% \text{ av } c)$$

[Ved romtemp. er termisk hastighet for elektroner

$$\frac{1}{2} m v_T^2 = \frac{3}{2} k_B T \Rightarrow v_T = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} = 1.2 \cdot 10^5 \text{ m/s} \ll v_F]$$

$$\text{Fermibølgelengde: } \lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \frac{2\pi\hbar}{mv_F} = 4.6 \cdot 10^{-10} \text{ m} = \underline{4.6 \text{ \AA}}$$

[Som er omtrent lik gitterkonstanten: $a_{\text{FCC}}^{\text{Cu}} = 3.61 \text{ \AA}$]

$$\text{Fermitemperatur: } T_F = E_F/k_B = \underline{8 \cdot 10^4 \text{ K}}$$

[Dvs: $T_F \gg T_{\text{rom}} \approx 3 \cdot 10^2 \text{ K}$ for metaller. Med andre ord,

forskjellen mellom romtemp. og det absolute nullpunkt

er praktisk tatt neglisjerbar i denne sammenheng!]

Med endelig temperatur, dvs $T > 0$:

Noen elektroner eksiteres opp til tilstander med høyere energi, denne energien får de tilført fra omgivelsene, og er av størrelsesorden $k_B T$.

Men de eksiterte tilstandene må være ledige, dvs i utgangspunktet ikke okkupert av elektroner, pga Pauliprinsippet.

Dermed vil bare elektroner med energi nær E_F kunne eksiteres termisk, siden $k_B T \ll E_F$.

Kvantitativt beskrives dette med Fermi-Dirac-fordelingen,

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

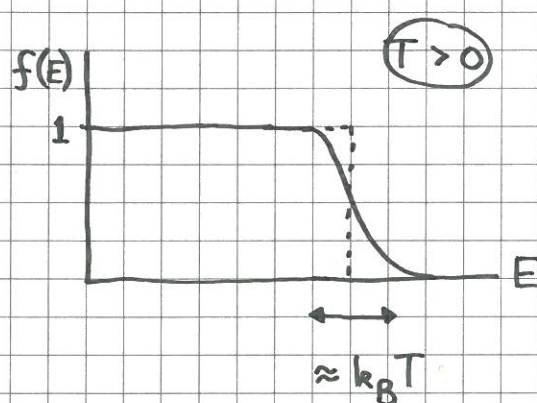
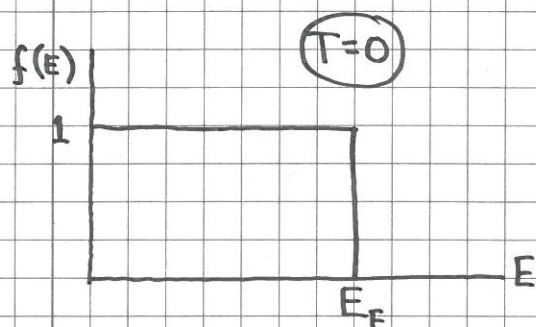
= sannsynligheten for at en tilstand med energi E er okkupert av et elektron ved temperatur T

Parameteren μ kalles kjemisk potensial og er definert ved at

$$f(E=\mu) = \frac{1}{e^0 + 1} = \frac{1}{2}$$

Ved $T=0$ er $f=1$ hvis $E < E_F$ og $f=0$ hvis $E > E_F$, slik at $\mu = E_F$ ved $T=0$.

Grafisk:



Med $f(E)$ = "midlere okkupasjonstall" og
 $g(E)dE$ = antall tilstander mellom E og $E+dE$,
 blir størrelsen

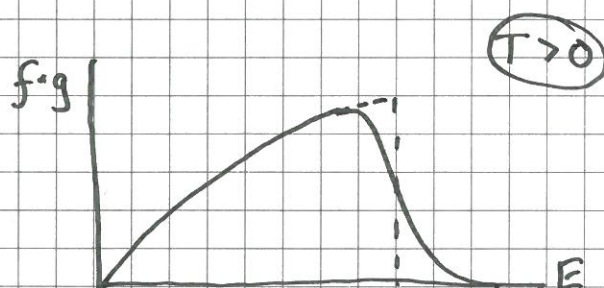
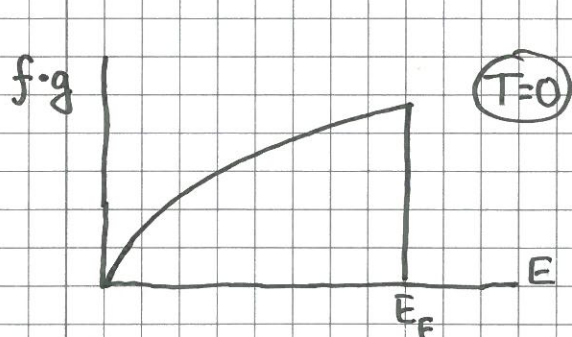
$$f(E) \cdot g(E) dE$$

det midlere antall elektroner med energi mellom E og $E+dE$,
 slik at produktet

$$f(E) \cdot g(E)$$

blir midlere antall elektroner pr energienhet.

Grafisk (siden $g(E) \sim \sqrt{E}$):



Merk: For "høye energier", dvs $E - \mu \gg k_B T$, er

$$f(E) \approx e^{-(E-\mu)/k_B T} = e^{\mu/k_B T} \cdot e^{-E/k_B T},$$

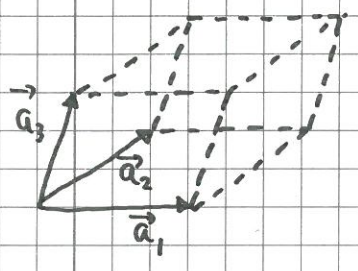
dvs den klassiske Boltzmannfaktoren $\exp(-E/k_B T)$.

Elektroner i periodisk potensial

I en perfekt krystall sitter atomene i faste gitterposisjoner

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (n_j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

der 3 primitive vektorer (i 3D) $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ "utspenner" en primitiv (enhets-)celle:



Volum: $|(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \cdot \vec{a}_3|$

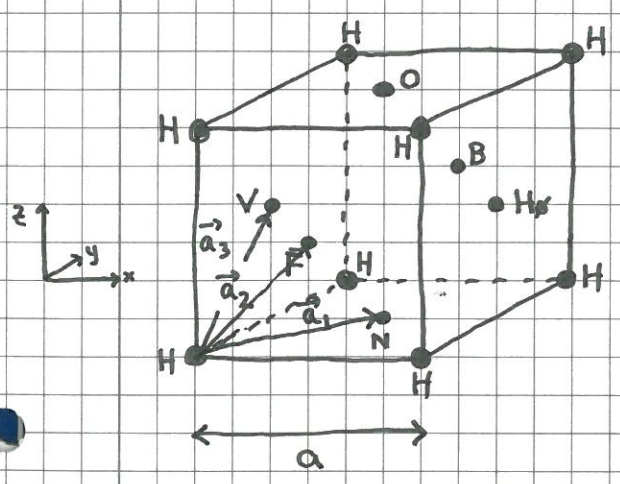
Eks: Flatesentrert gitter (FCC)

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\Rightarrow V = (a^3/8) |((\hat{x} + \hat{y}) \times (\hat{x} + \hat{z})) \cdot (\hat{y} + \hat{z})| = \frac{a^3}{8} \cdot 2 = \frac{a^3}{4}$$

= volum pr gitterpunkt

dvs 4 atomer okkuperer volum a^3



- H: hjørne
- O, N: oppe, nede
- B, F: bak, foran
- V, H: venstre, høyre

Hjørneatomene deles mellom 8 celler
 Flateatomene ——— " ——— 2 ———

$$\Rightarrow 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 1 + 3 = 4 \text{ atomer pr enhetscellevolum } a^3; \text{ OK!}$$

I en slik krystall må potensialet være det samme i $\vec{r}$ og $\vec{r} + \vec{R}$:

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

Da må også elektronettheten (evt. sannsynlighetstettheten) være periodisk:

$$g(\vec{r} + \vec{R}) = g(\vec{r}) \quad ; \quad g(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2$$

Da må vi ha

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

med

$$u(\vec{r} + \vec{R}) = u(\vec{r}) \quad \text{og} \quad \text{reell } \overbrace{\alpha(\vec{r})}^{(\text{skaler})}$$

Videre må $\alpha(\vec{r})$ være en linear funksjon av $\vec{r}$,

$$\alpha(\vec{r}) = \vec{k} \cdot \vec{r} + \alpha_0$$

der $\vec{k}$ er en vilkårlig vektor og α_0 en betydningsløs konstant, som vi velger lik null. (Ikke-linear $\alpha(\vec{r})$ vil ~~gi~~ valget av origo fysisk betydning, som det selvsagt ikke kan ha!)

Konklusjon: Elektroner i et periodisk potensial beskrives av bølgefunksjoner

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad ; \quad u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

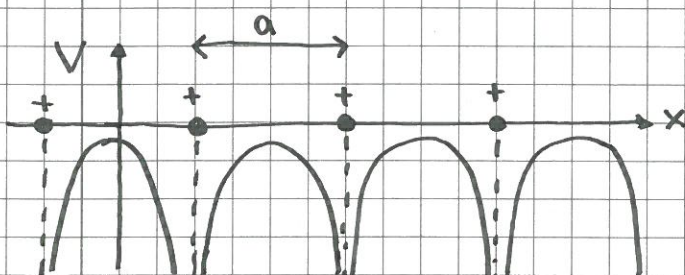
(der $\vec{k}$ er satt på som "merkelapp" på Ψ og u)

Dette er Bløchs teorem. [Felix Bloch, 1928; Nobelprisen i 1952 sammen med Edward Purcell, for presisjonsmålinger av kjernepartiklers magnetiske egenskaper]

La oss forenkle til 1D: TUSL er da

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

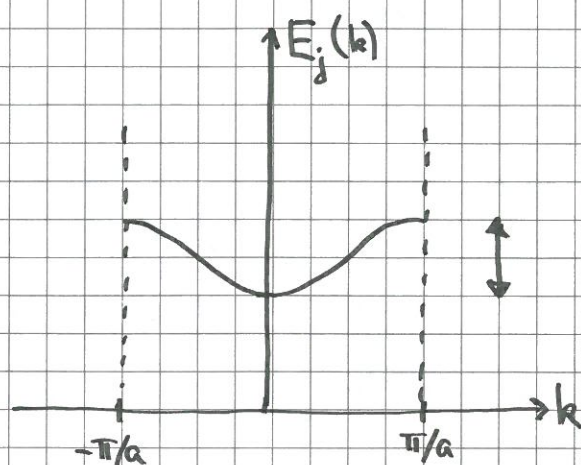
med $V(x+a) = V(x)$ og $\Psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$



N atomer (ert N primitive celler i 3D) med gitterkonstant a

↑ Omtrent slik må potensialet som elektronene føler, se ut!

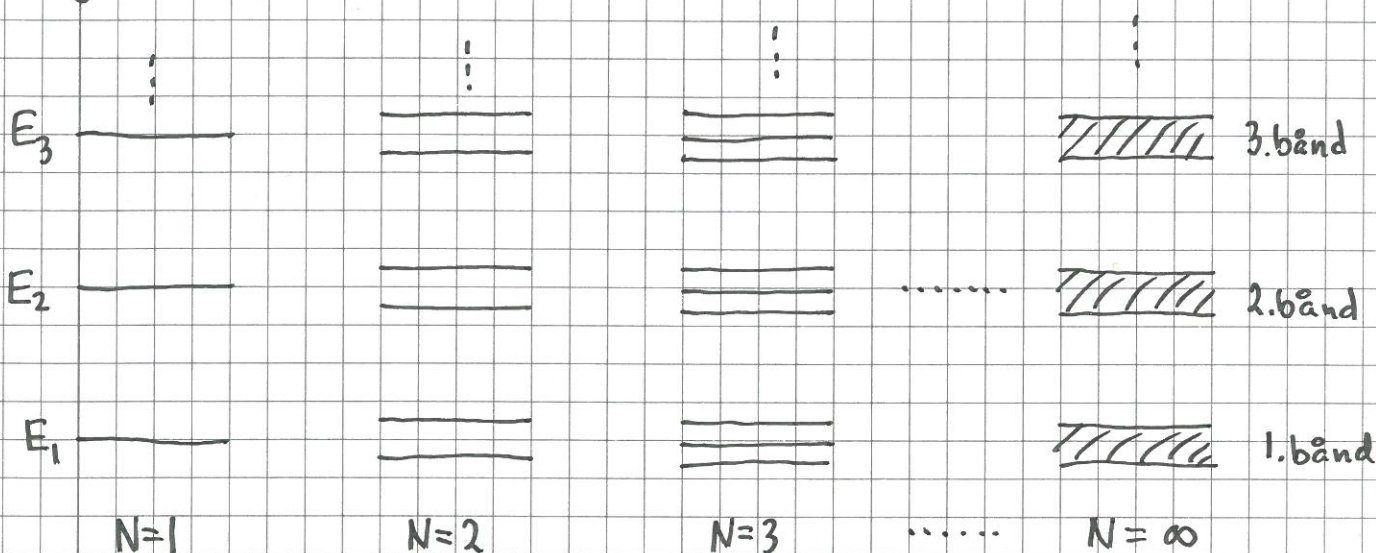
TUSL gir nå, for en gitt verdi av k , energi-egenverdier $E_1(k)$, $E_2(k)$, $E_3(k)$, (helt tilsvarende f.eks. partikkel i boks). Når verdien av k endres, vil også $E_j(k)$ ($j=1,2,3,\dots$) endres. Med N atomer er det N tillatte verdier av k mellom $-\frac{\pi}{a}$ og $+\frac{\pi}{a}$ [som tilsvarer den såkalte 1. Brillouinsone]. Med stor N ($N \rightarrow \infty$) blir ~~ikke~~ $E_j(k)$, for hver j , en kontinuerlig funksjon av k , f.eks. slik:



- Har alltid $E_j(-k) = E_j(k)$
- $E_j(k)$ dekker et område av energier som vi kaller et energibånd

Skjematisk kan overgangen fra atom ($N=1$) til

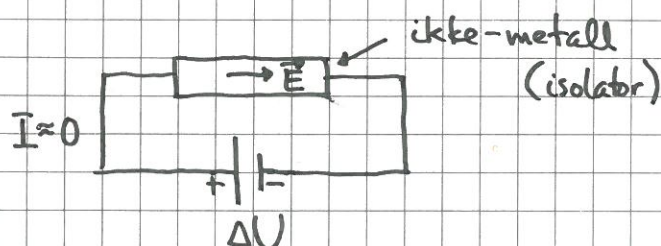
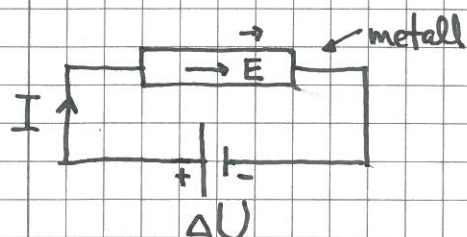
- krystall ($N=\infty$) illustreres slik:



- Hvis to "nabobånd" ikke overlapper i energi, blir det et energiintervall uten tillatte tilstander mellom båndene, et såkalt båndgap.
- Vi kaller "settet av løsninger" $E_j(\vec{k})$ ($j=1,2,3,\dots$) for krystallens (energi-) båndstruktur.
- For frie elektroner, dvs konstant potensial $V=0$, fikk vi kun ett bånd, med parabolisk båndstruktur $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.
- Med reelle krystaller, med periodisk potensial $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$, får vi flere bånd [strengt tatt: ∞ mange bånd!], med en mer "komplisert" båndstruktur $E_j(\vec{k})$ ($j=1,2,3,\dots$).
- Analogt til at en primitiv celle er nok til å beskrive hele krystallen, så er 1. Brillouinsone i $\vec{k}$ -rommet nok til å beskrive $E_j(\vec{k})$ for alle mulige verdier av $\vec{k}$.

Metaller, isolatorer og halvledere

Makroskopisk skilles metaller (ledere) fra "ikke-metaller" ved at et lite elektrisk felt $\vec{E}$ gir en strøm I :



Mikroskopisk klassifisering basert på båndstrukturen :

(Minst) Ett energibånd delvis fylt med elektroner $\Rightarrow$ Metall

Alle energibånd fulle eller tomme $\Rightarrow$ Ikke-metall

Skjematisk forklaring:

Metall:

delvis fylt

fylt

$$\Delta U = 0$$

$$\vec{E} = 0$$

$$e \cdot \Delta U$$

tillatt!

(forbudt)

$$\Delta U \neq 0$$

$$\vec{E} \neq 0$$

$$\Rightarrow I \neq 0$$

Ikke-metall:

tomt

fylt

$$\Delta U = 0$$

$$\vec{E} = 0$$

$$e \cdot \Delta U$$

forbudt!

$$\Delta U \neq 0$$

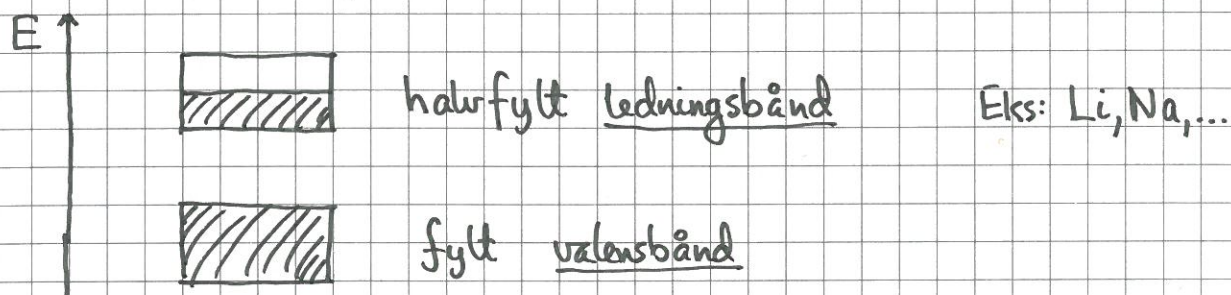
$$\vec{E} \neq 0$$

$$\Rightarrow I = 0$$

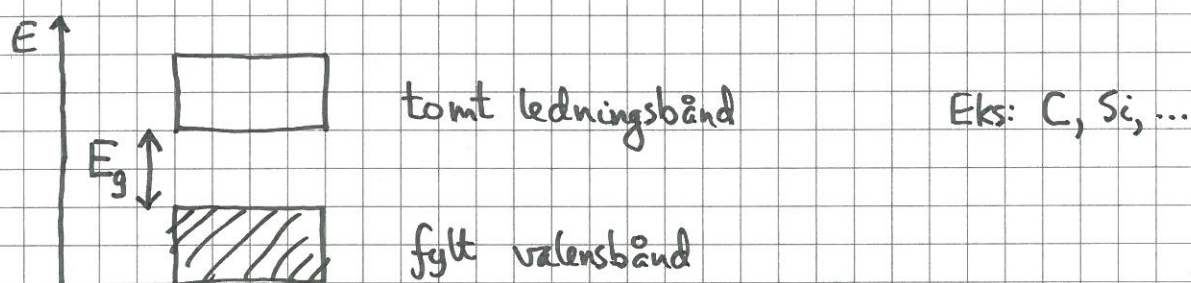
Anta N_0 primitive enhetsceller med 1 gitterpunkt pr enhetscelle, dvs $2N_0$ elektrontilstander pr energibånd.
↑ (spinn!)

(107)

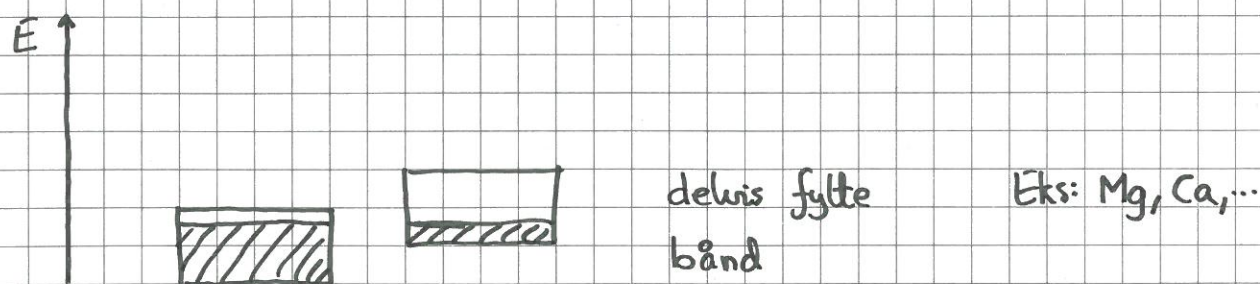
- Oddetall elektroner pr enhetscelle $\Rightarrow$ metall:



- Liketall elektroner pr enhetscelle, uten overlappende energibånd $\Rightarrow$ ikke-metall:



- Liketall elektroner pr enhetscelle med overlappende energibånd $\Rightarrow$ metall:



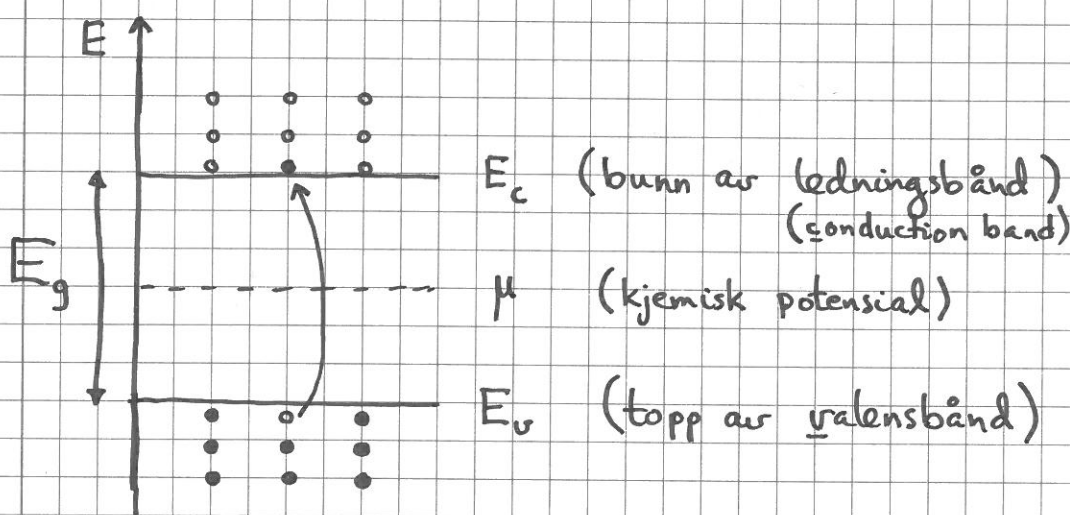
- Med fylt valensbånd og tomt ledningsbånd avgjør størrelsen på båndgapet, E_g (se fig. over), om det er en isolator eller halvleder.

Halvledere

Ved $T = 0$: ikke-metall

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

Skjematisk:



I ren ("intrinsikk") halvleder:

$$\mu \approx E_v + \frac{1}{2}E_g = E_c - \frac{1}{2}E_g = \frac{1}{2}(E_v + E_c) \quad \left[\text{dvs midt i energigapet} \right]$$

Sannsynlighet for okkupert tilstand med $E \approx E_c$:

$$f(E_c) = \frac{1}{e^{(E_c - \mu)/k_B T} + 1} \approx e^{-(E_c - \mu)/k_B T} \approx e^{-E_g/2k_B T}$$

Antall eksiterte elektroner pr volumenhett:

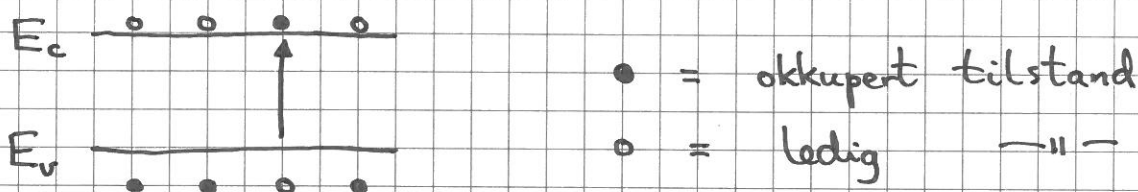
$$n(T) = n_0 e^{-E_g/2k_B T} \quad ; \quad n_0 \sim 10^{26} \text{ m}^{-3}$$

[Typisk tallverdi ved normale temperaturer]

Omtrentlige tallverdier for elementer i gruppe IV:

	E_g (eV)	$\exp(-E_g/2k_B T)$ ved 300 K	n (300K) (pr m^3)	type materiale
C	5.47	$3 \cdot 10^{-48}$	0	isolator (diamant)
Si	1.12	$2 \cdot 10^{-10}$	$\sim 10^{16}$	halvleder
Ge	0.67	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$\sim 10^{20}$	— " —
Sn	0.08	0.2	$\sim 10^{25}$	— " —
Pb	0	1	$\sim 10^{26}$	metall

Hull: For hvert elektron som eksiteres fra valensbåndet til ledningsbåndet i en intrinsikk halvleder, får vi en ledig tilstand i valensbåndet. Denne ledige tilstanden oppfører seg som en partikkel med positiv ladning ($+e$); vi kaller den et hull.

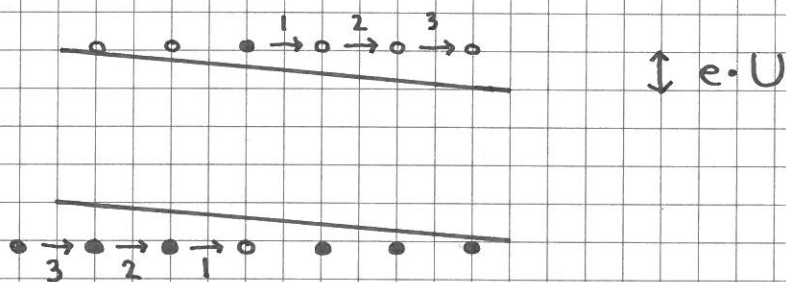


n = konsentrasjon av elektroner i ledningsbåndet
 p = — " — hull i valensbåndet

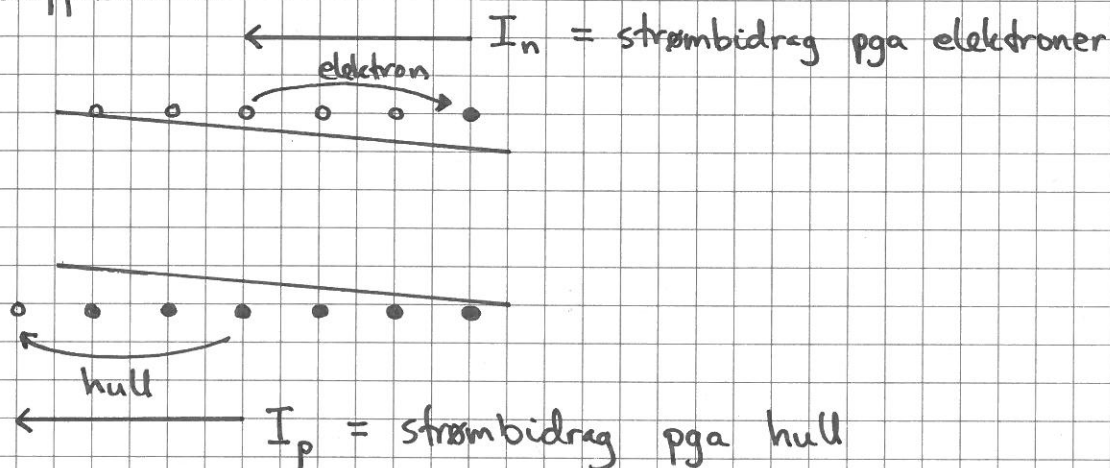
For intrinsikk halvleder: $n = p$

Med påtrykt spenning U , dvs el. felt $\vec{E} = -\nabla U$:

(110)

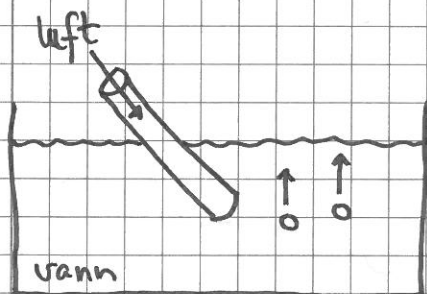


Nettoeffekten er:



Total elektrisk strøm blir: $I = I_n + I_p$

Velkjent analogi:



Luftbobler opp $\hat{=}$ Vann ned !

Fravær av elektron i valensbåndet muliggjør forflytning av de andre. Enklere å beskrive hullets forflytning!

Dopede halvledere

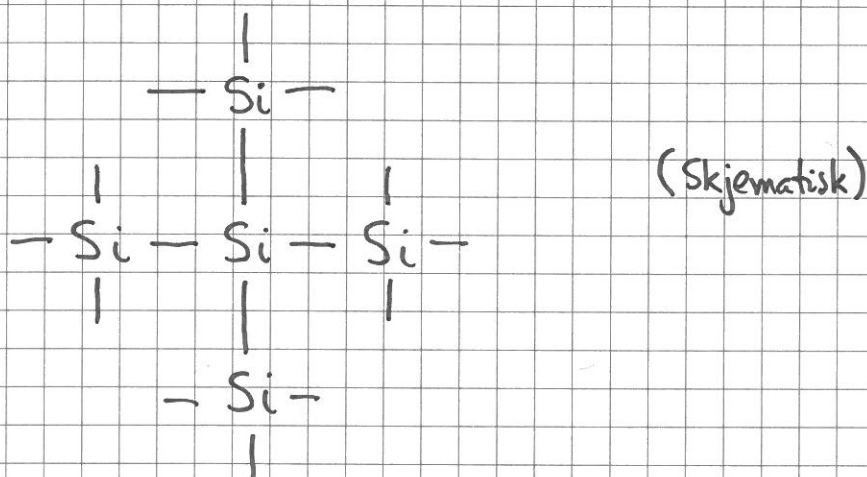
(111)

Si, Ge : 4 valenselektroner

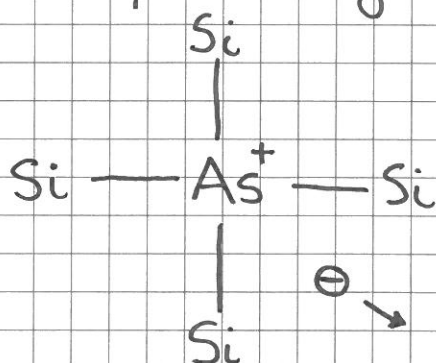
Al, B : 3 —"—

P, As : 5 —"—

Ren Si : Diamantstruktur, 4 nærmeste naboer, kovalente bindinger, 2 elektroner pr binding

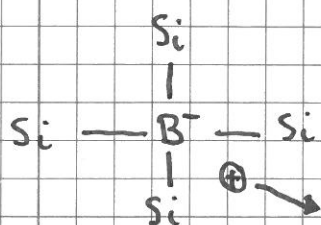


Donor - forurensning: As erstatter Si



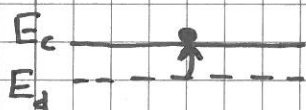
4 av de 5 valenselektronene til As inngår i kovalente bindinger med de 4 Si-naboene; 1 valenselektron er løst bundet til As⁺ og frigjøres lett

Akseptor - forurensning: B erstatter Si



de 3 valenselektronene til B pluss 1 elektron fra valensbåndet til Si-krystallen inngår i de 4 kovalente bindingene med Si-naboer; et hull er løst bundet til B⁻ og frigjøres lett

n-type halvleder: donor-forurensset



E_d = "donornivå" = energien til det 5. valenselektronet på donoratomet

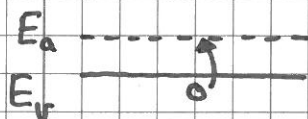


Eks: For As i Ge-krystall er $E_c - E_d \approx 0.013 \text{ eV}$

$\Rightarrow$ mye lettere å frigjøre elektron fra As (dvs: eksitere fra E_d til E_c) enn å eksitere fra E_v til E_c ;

$$E_g = E_c - E_v \approx 0.67 \text{ eV i Ge}$$

p-type halvleder: akseptor-forurensset



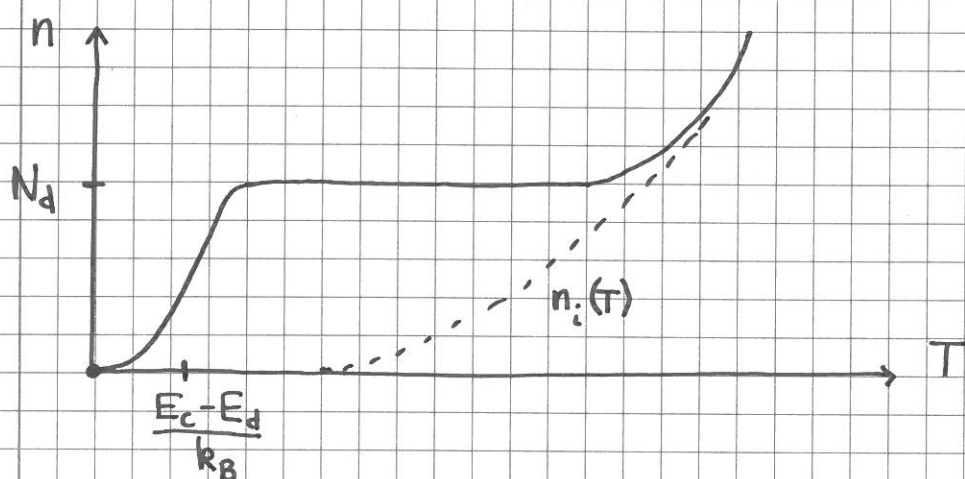
E_a = "akseptornivå" = energien til ledig tilstand på akseptoratomet

Når $E_a - E_v \ll E_g$, er det mye lettere å eksitere et hull i valensbåndet ved å "ta" et elektron fra valensbåndet og putte det i den ledige tilstanden på akseptoratomet, enn å eksitere fra E_v helt opp til E_c

Ladningskonsentrasjon i n-type halvleder:

[tilsvarende argumentasjon for hullkonsentrasjon i p-type]

- $T=0$: $n=0$, E_d okkupert av elektron
- $T > (E_c - E_d)/k_B$: $n \approx N_d$ = antall donatoratomer pr volumenhett ("dope-konsentrasjonen")
- $T \gg (E_c - E_d)/k_B$: $n \approx n_i(T) \sim \exp(-E_g/2k_B T)$ [s. 108]



Ved romtemp. (300K) er vanligvis $n \approx N_d \gg p$ i en n-type halvleder, mens $p \approx N_a \gg n$ i en p-type halvleder (der N_a = antall akseptoratomer pr volumenhett).

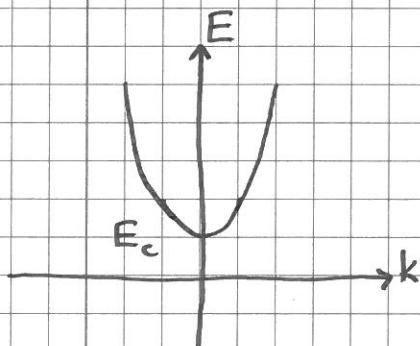
Med andre ord: Vi kan typisk neglisjere hullstrømmen I_p og sette $I = I_n$ i en n-type halvleder.

Og tilsvarende typisk neglisjere elektronstrømmen I_n og sette $I = I_p$ i en p-type halvleder.

Effektiv masse

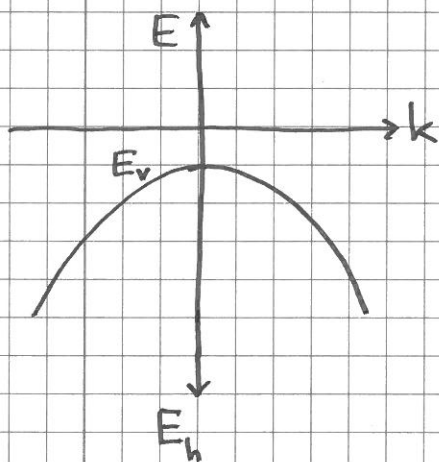
114

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



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

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

Hullets effektive masse m_h^* gitt ved invers krumning:

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

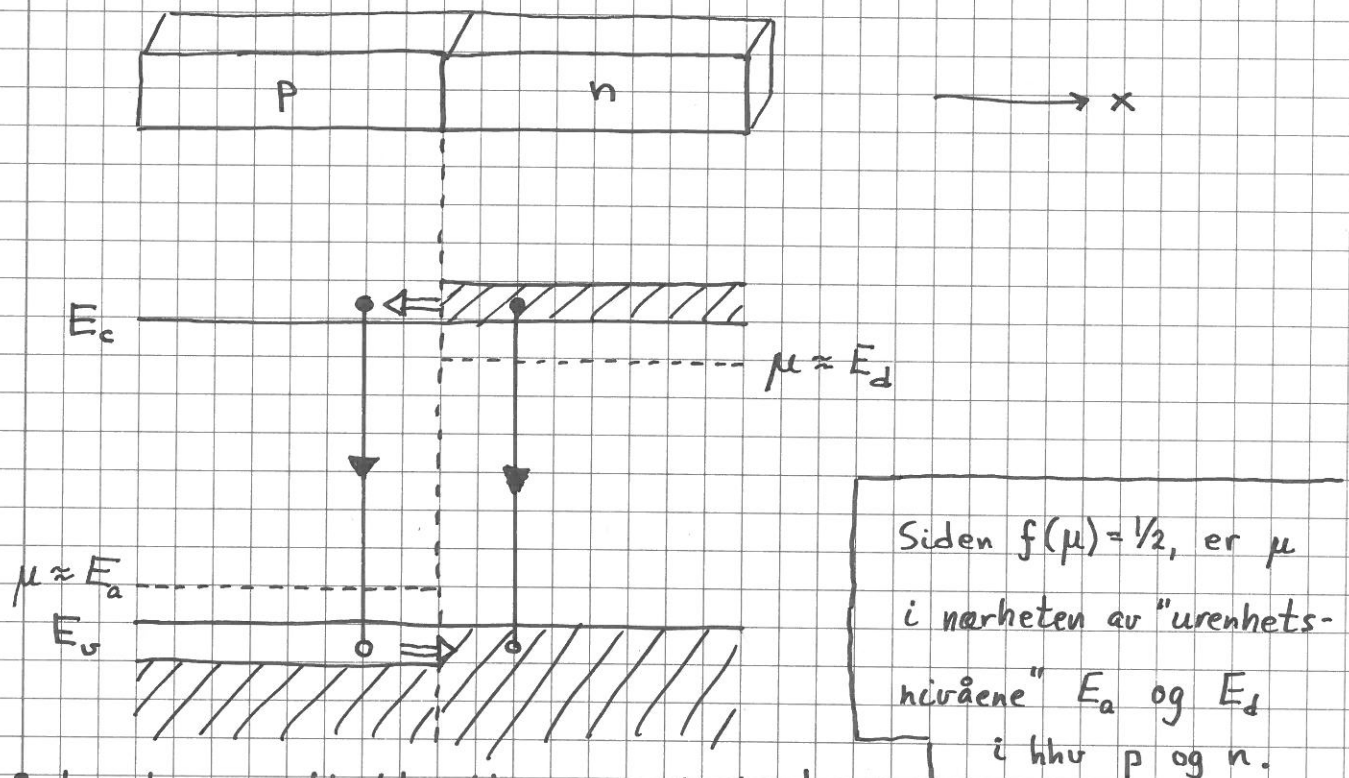
Partiklene (elektronene og hullene) beskrives av båndstruktur ($E(k)$ og $E_h(k)$) nær båndkantene som er "fri-partikkel-lignende", men de er ikke

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 $m^* \sim 0.1 m_e$.

Anvendelser av halvledere

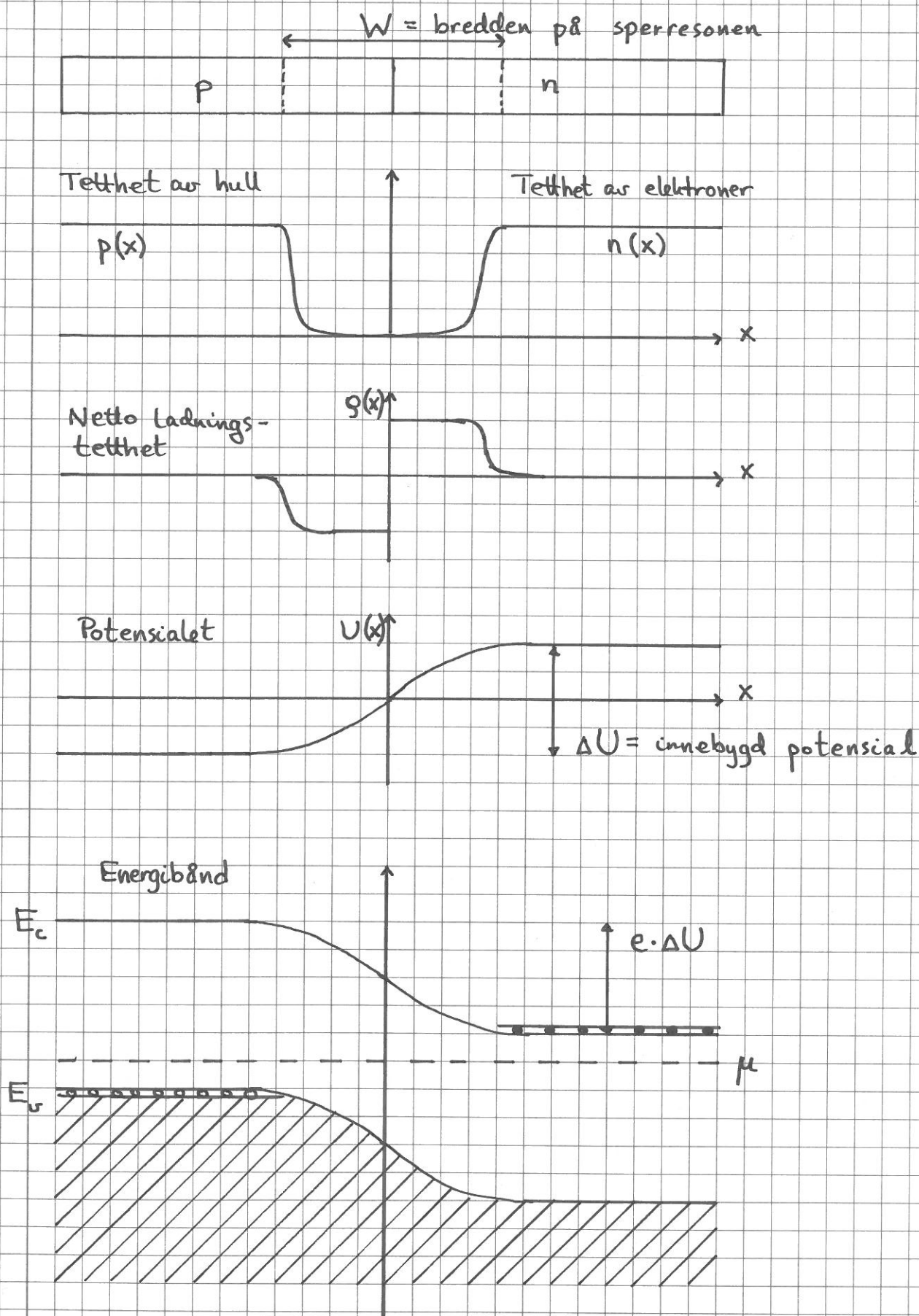
- Enorm betydning for "det moderne samfunn"
- Eksempler: Diode, Transistor, Fotodetektor, Solcelle, LED, Laser
- Vi tar for oss noe av dette, stort sett grunnlaget, og stort sett kvalitativt

pn - overgang

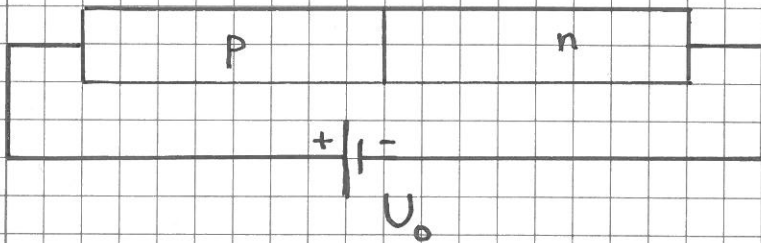


- her har vi ikke likevekt; noe vil skje!
- $n(n) > n(p)$ og $p(p) > p(n) \Rightarrow$ diffusjonsstrøm av elektroner fra n til p og hull fra p til n; samt en del rekombinasjon, som reduserer n og p nær overgangen
- gir overskudd av neg. ladd. på p-siden og pos. ladd. på n-siden av grenseflaten
- gir innebygd potensial ΔU og el. felt $\vec{E} = -\hat{x} dU/dx$
- likevekt når $I_{\text{diffusjon}} + I_{\text{drift}} = 0$ [drift: pga $\vec{E}$]

Likevekt er oppnådd når hele systemet har et felles konstant kjemisk potensial μ :

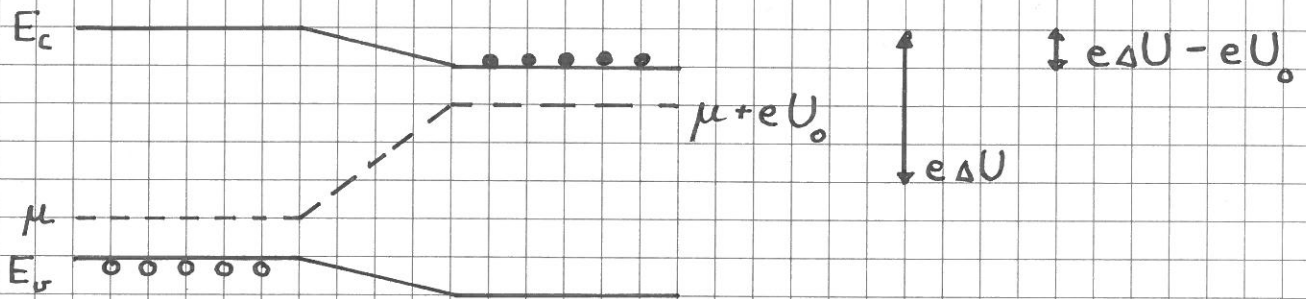


Denne energibånd-figuren gjør det ganske lett å forstå hva som skjer når en ytre spenning U_0 kobles til!



Velger $U_0 > 0$ når positiv pol er koblet til p-siden.

Med $U_0 > 0$ ("positiv forspenning") :

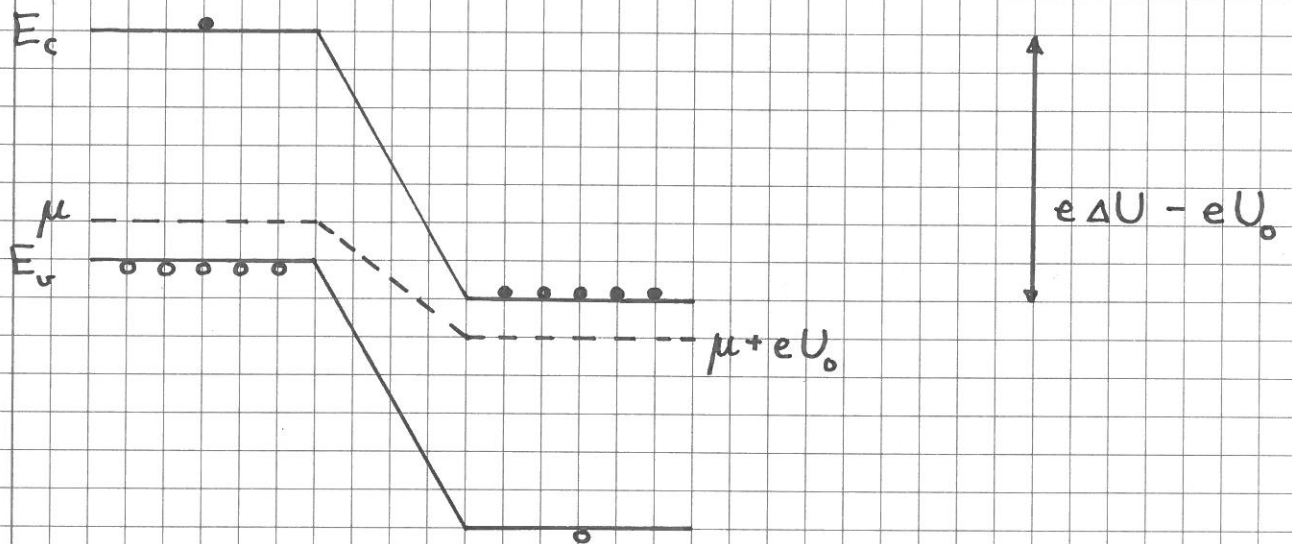


- $U_0 > 0$ representerer ytre kraft på hull (o) mot høyre og på elektroner (•) mot venstre
- Vi ser at energibarrieren som må overvinnes er redusert, fra $e\Delta U$ til $e\Delta U - eU_0$
- Sannsynligheten for termisk eksitasjon er proporsjonal med Boltzmannfaktoren; følgelig må vi få en strøm som øker proporsjonalt med faktoren $\exp[-(-eU_0)/k_B T] = \exp[eU_0/k_B T]$
- Uten en ytre spenning, dvs $U_0 = 0$, er det klart at netto strøm i kretsen er null; følgelig må $I(U_0)$ være på formen

$$I(U_0) = I_0 \left(e^{eU_0/k_B T} - 1 \right)$$

der I_0 er en (temperaturavhengig) konstant, som f.eks. må avhenge av hvor mange ladningsbærere vi har tilgjengelig (hull på p-siden, elektroner på n-siden)

Med $U_0 < 0$ (negativ forspenning):



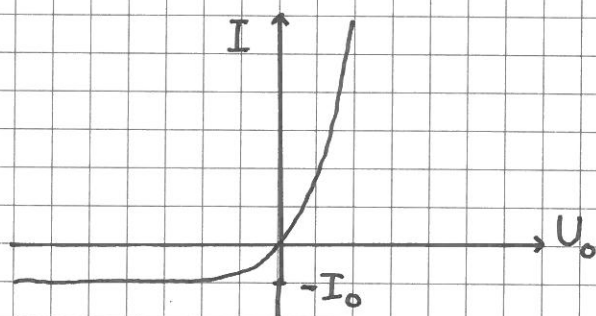
- $U_0 < 0$ gir ytre kraft på hull (o) mot venstre og på elektroner (•) mot høyre
- Energi barrieren økt med $e \cdot |U_0|$ for hull på p-siden og for elektroner på n-siden; strømbidrag fra disse redusert med Boltzmannfaktor $\exp[eU_0/k_B T]$
- Får en liten strøm i kretsen pga at det tross alt er en del elektroner i ledningsbåndet på p-siden og hull i valensbåndet på n-siden
- Samme uttrykk for $I(U_0)$ kan dermed også brukes for $U_0 < 0$:

$$I(U_0) = I_0 \left(e^{eU_0/k_B T} - 1 \right)$$

Dette gir $I(U_0) \approx -I_0$ når $U_0 < 0$ og $e|U_0| > k_B T$

Dermed har vi et kretselement, en diode, med strøm-spennings-karakteristikken

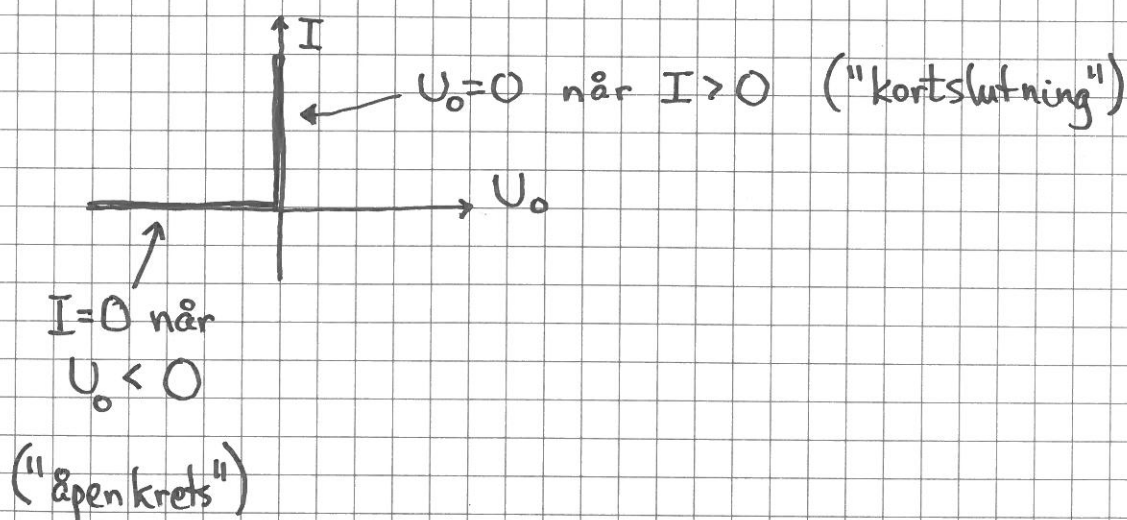
$$I(U_0) = I_0 (e^{eU_0/k_B T} - 1)$$



Dvs: En likeretter; leder godt i "positiv" retning, fra p til n, leder dårlig i "negativ" retning, fra n til p.

Kretssymbol: 

I kombinasjon med andre kretselementer kan ofte $I(U_0)$ (litt grovt) idealiseres til:



Transistor

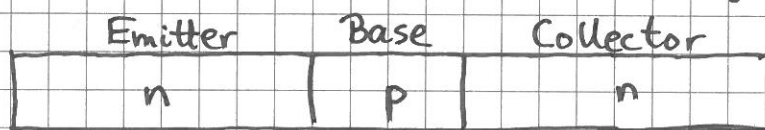
" Transconductance Varying Resistor " "Varistor"

Oppfunnet av Bardeen, Brattain og Shockley i 1947

⇒ Nobelpris i 1956

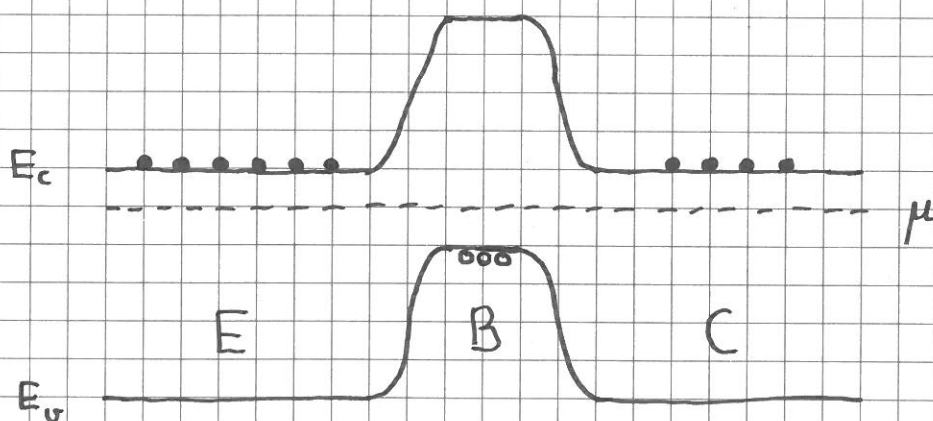
[John Bardeen fikk også Nobelprisen i 1972, sammen med Cooper og Schrieffer, for BCS-teorien for superledning; eneste med to nobelpriser i fysikk.]

En bipolar transistor er to pn-overganger "mot" hverandre:



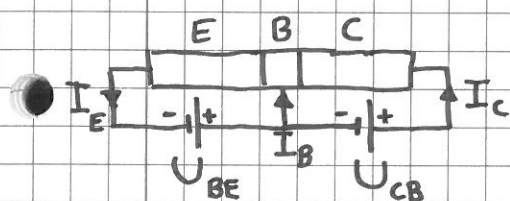
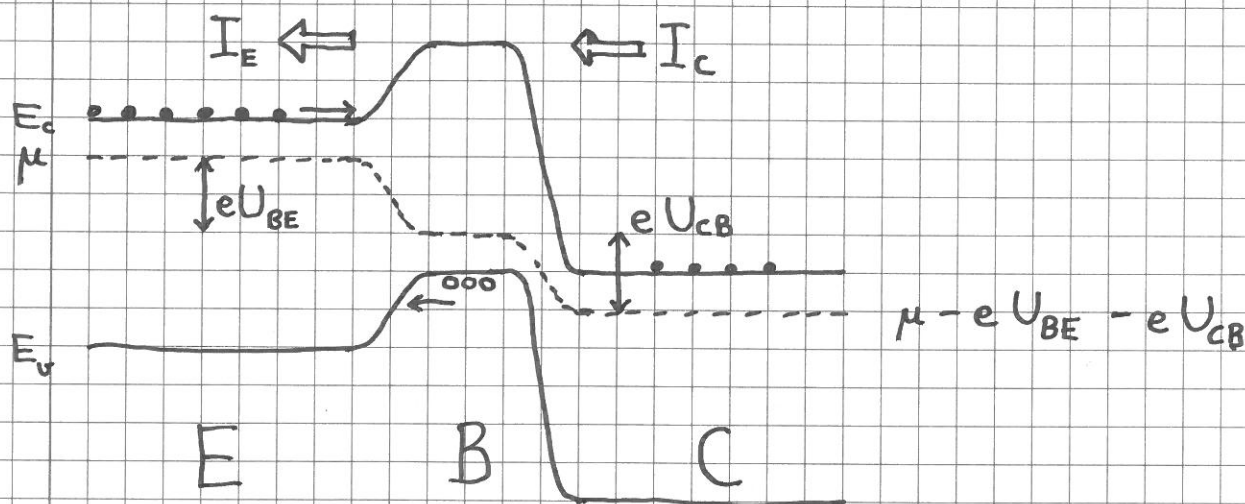
[Se også kap. 18 i FY6018]

Energibånd i likevekt:



Basen representerer en potensialbarriere som hindrer strøm av elektroner mellom emitter og collector hvis en spenning U_{CE} kobles til mellom E og C. Men potensialbarrieren kan reduseres ved å koble til en spenning $U_{BE} > 0$ mellom B og E [evt en $U_{BC} > 0$ mellom B og C, selsagt], og dermed regulere collectorstrømmen I_c ; "transistorvirkning".

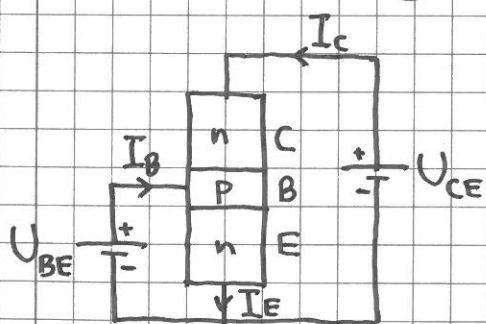
npn-transistoren er aktiv når $U_{BE} > 0$ og $U_{BC} < 0$:



Med smal base "sveipes" elektronene over basen og inn i collectoren, slik at $I_c \approx I_E$ og $I_B \approx 0$.

[Bred base $\Rightarrow$ elektroner fra E rekombinerer med hull i B
 $\Rightarrow I_B \approx I_E$ og $I_c \approx 0$
 $\Rightarrow$ oppførsel som to uavhengige pn-overganger]

Eks: Strømførsterkning i "felles-emitter-konfigurasjon"



For en gitt U_{CE} vil en økning av U_{BE} , og dermed en liten økning av I_B , resultere i en stor økning av I_c .

Strømførsterkningsfaktor: $\beta = \Delta I_c / \Delta I_B \gg 1$ [h_{fe} i FY6018, se kap 18]

Spørsmål: Når både U_{BE} og U_{BC} er positive, er transistoren "i metning", og når begge er negative, er den i "cutoff". Hvorfor er dette "naturlige" betegnelser?

Tips: Se på strømstyrkene I_E , I_c og I_B .

Vekselvirkning med lys og "fotoniske" komponenter

- Klassisk er lys E.M. bølger, der $\vec{E}$ og $\vec{B}$ oppfyller bølgekn.

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu_0 \epsilon_0 \partial^2 \vec{E} / \partial t^2 ; \quad \nabla^2 \vec{B} = \mu_0 \epsilon_0 \partial^2 \vec{B} / \partial t^2$$

som følger fra Maxwells ligninger (jf FY6020). Dvs, $\vec{E}$ og $\vec{B}$ forplanter seg med fart $c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \approx 3 \cdot 10^8$ m/s (i vakuum). Dette forklarer bølgefenomener som interferens og diffraksjon.

- Kvantemekanisk er lys partikler - fotoner - med energi $E = h\nu$ og impuls $p = h/\lambda$, slik at $E = pc$ (da $\nu = c/\lambda$).

Forklarer fenomener som fotoelektrisk effekt og Compton-effekten. Nødvendig for å forklare komponenter som LED, solcelle, Laser osv.

Fotoner er bosoner (med heltallig spinn og symmetriske bølgefunksjoner) uten masse, og antall fotoner i et lukket system er ikke bevart.

Forventet antall bosoner i en tilstand med energi E er

$$\langle N \rangle = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} - 1} \quad (\text{Bose-Einstein-fordelingen})$$

[Sammenlign med Fermi-Dirac-fordelingen, s. 100, for fermioner.]

For fotoner er kjemisk potensial $\mu = 0$, slik at

$$\langle N \rangle = [\exp(E/k_B T) - 1]^{-1} = [\exp(h\nu/k_B T) - 1]^{-1}$$

Eks: Hva er da $\langle N \rangle$ for hhv synlig lys og mikrobølger ved 300K?

- Løsn: Synlig lys $\Rightarrow \lambda = 400-700$ nm $\Rightarrow h\nu = 1.8-3.1$ eV.

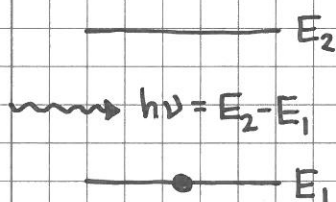
Mikrobølger $\Rightarrow \lambda = 10$ cm (f.eks.) $\Rightarrow h\nu = 12.4$ μ eV

$k_B T = 26$ meV $\Rightarrow \langle N \rangle_{\text{synlig}} \sim 10^{-30}$ til 10^{-52} ; $\langle N \rangle_{\text{mikro}} \sim 2000$

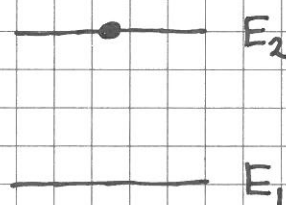
Fotoniske komponenter baserer seg på absorpsjon av fotoner (fotodetektor, solcelle) eller emisjon av fotoner, enten spontan emisjon (LED) eller stimulert emisjon (LASER): [YF 39.3, 39.4]

Absorpsjon: [Anta atom med to energinivåer E_1 og E_2]

Før:

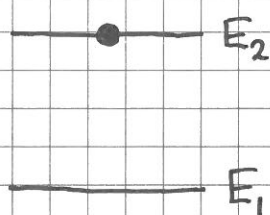


Etter:

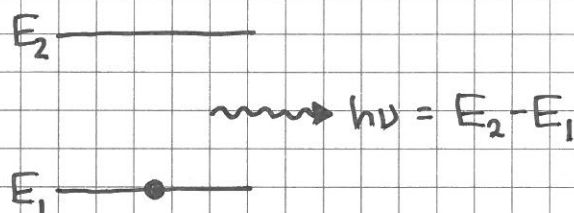


Spontan emisjon:

Før:

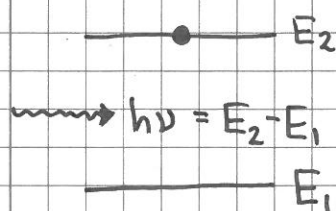


Etter:

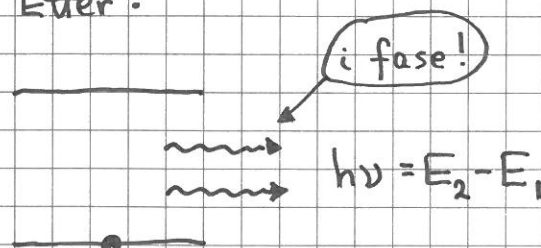


Stimulert emisjon [Einstein, 1917]:

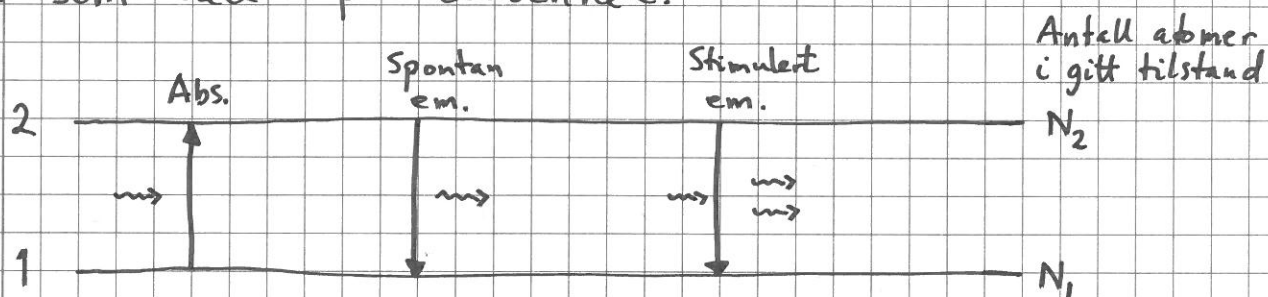
Før:



Etter:



I (dynamisk) likevekt: Like mange overganger
"opp" som "ned" pr tidsenhet.



Sannsynlighet: $B \cdot u(\nu)$

A

$B \cdot u(\nu)$

Rate: $N_1 \cdot B \cdot u(\nu)$

$N_2 \cdot A$

$N_2 \cdot B \cdot u(\nu)$

med $u(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$ = energi pr volum- og frekvensenhet

(dvs Plancks strålingslov, se s. 5)

A, B = Einstein-koeffisientene; $\frac{A}{B} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} = \frac{u(\nu)}{\langle N \rangle}$

der $\langle N \rangle$ = midlere antall fotoner med frekvens ν (se s. 122)

Dermed blir

$$\frac{P(\text{stimulert emisjon})}{P(\text{spontan emisjon})} = \langle N \rangle$$

Med kvanteelektrodynamikk (QED) beregnes at

$$P(\text{emisjon, totalt}) \sim \langle N \rangle + 1$$

dvs

$$P(\text{stim. em.}) \sim \langle N \rangle$$

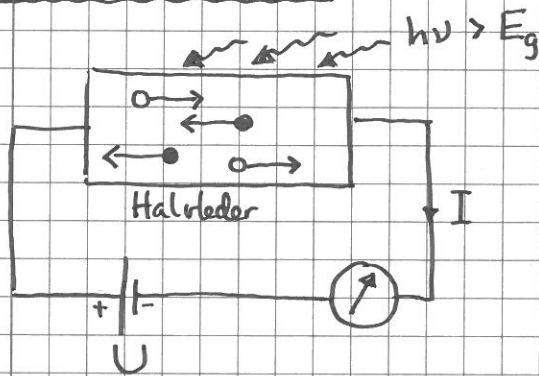
og

1-tallet i $\langle N \rangle + 1$ tilsvarer spontan emisjon

Vi skal straks benytte dette i diskusjonen av laseren.

Fotodetektor

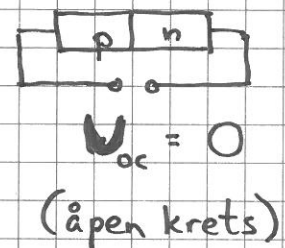
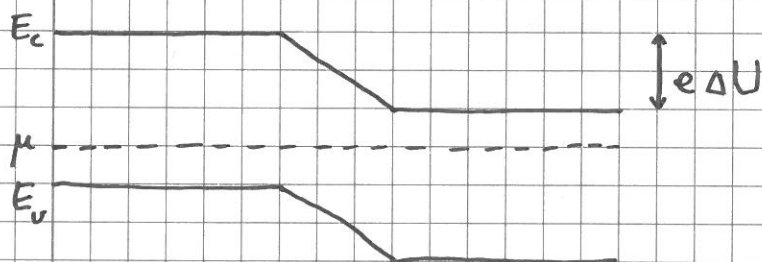
(125)



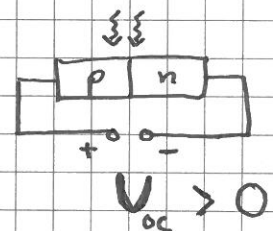
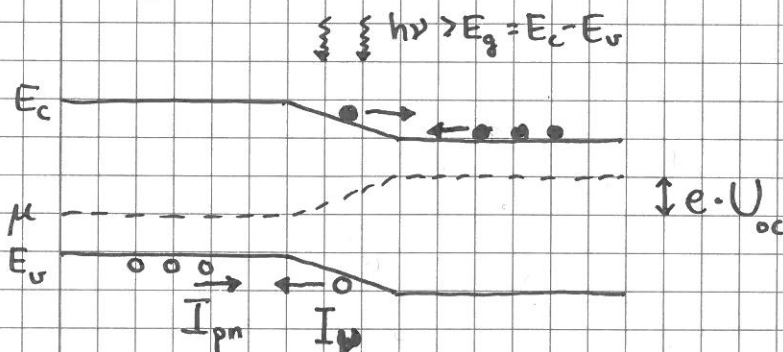
Absorberte fotoner skaper elektron-hull par (hvis $h\nu > E_g$)
 $\Rightarrow$ økning i strømmen I ,
dvs lyset er detektert.

Solcelle

Uten fotoner:



Med fotoner:



I_v = strøm pga genererte elektron-hull par

$I_{pn} = I_0 (e^{eU_{oc}/k_B T} - 1)$ = ideell diodesstrøm med
spenning U_{oc} over pn-overgangen

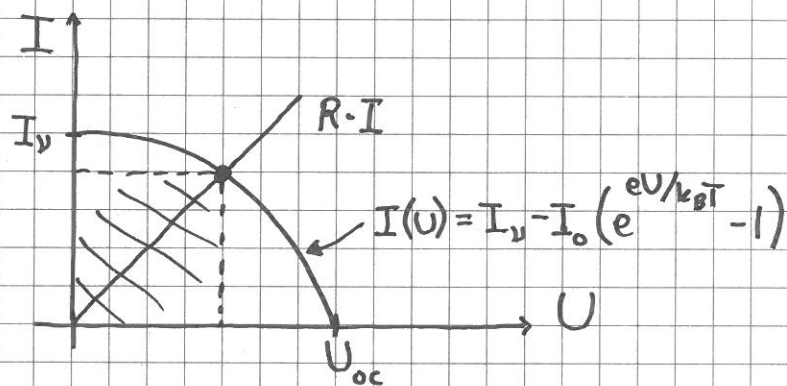
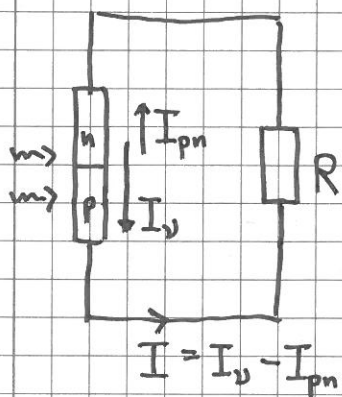
Med åpen krets er $I = I_v - I_{pn} = 0 \Rightarrow I_v = I_{pn}$

$$\Rightarrow U_{oc} = \frac{k_B T}{e} \ln \left\{ \frac{I_v}{I_0} + 1 \right\}$$

Med "brukbar innstråling" er som regel $I_y \gg I_0$

$$\Rightarrow U_{oc} \approx \frac{k_B T}{e} \ln \frac{I_y}{I_0}$$

Kobler til (f.eks.) lyspære med motstand R :



Effekt i lyspære: $P = U \cdot I = \text{skravert areal}$

$$= U I_y - U I_0 (e^{eU/k_B T} - 1)$$

Max effekt oppnås når $dP/dU = 0$

$$\Rightarrow I_y + I_0 - I_0 e^{eU/k_B T} - \frac{eU}{k_B T} I_0 e^{eU/k_B T} = 0$$

$$\Rightarrow e^{eU/k_B T} = \frac{I_y + I_0}{I_0 (1 + eU/k_B T)} \approx \frac{I_y}{I_0} \cdot \frac{k_B T}{eU} \quad (\text{når } I_y \gg I_0 \text{ og } eU \gg k_B T)$$

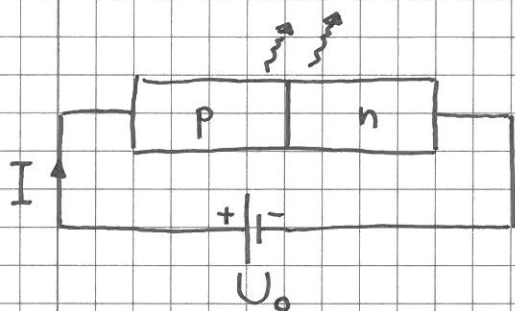
$$\Rightarrow U = \frac{k_B T}{e} \ln \left\{ \frac{I_y}{I_0} \cdot \frac{k_B T}{eU} \right\} = U_{oc} - \frac{k_B T}{e} \ln \left\{ \frac{eU}{k_B T} \right\}$$

(som evt. må løses ^(eller grafisk) numerisk for å bestemme U)

Når U er bestemt, kan f.eks. max effekt $P = UI$ og tilhørende $R = U/I$ fastlegges.

[Øving 6]

Lysemitterende diode (LED)

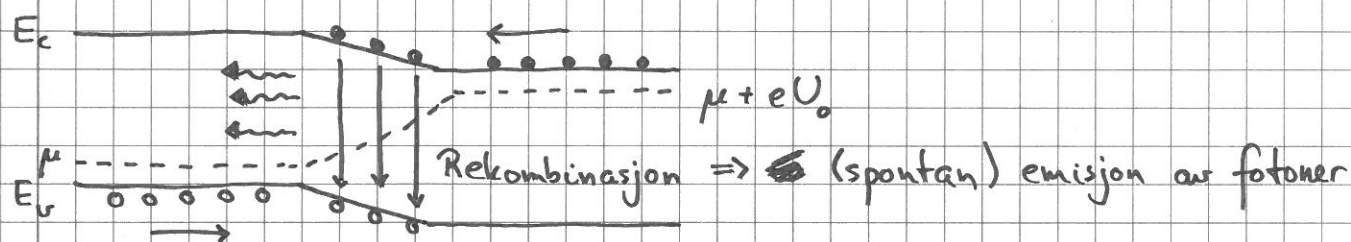


"Positivt forspent" pn-overgang
kan gi fotoner ut!

Betingelser:

- Direkte båndgap
- Passelig stort båndgap (for f.eks. ønsket farge)
- Tilstrekkelig strøm I

Grunnleggende mekanisme:



Ytre spenning $U_0 > 0 \Rightarrow$ tilførsel av ledningsbærere i "sperreresonen", elektroner i ledningsbåndet ($\bullet$) og hull i valensbåndet ($\circ$). Hvis "mange nok", så vil mange elektroner "falle ned" og rekombinere med hull, med utsendelse av fotoner, med energi $h\nu \approx E_c - E_v = E_g = \text{energigapet}$.

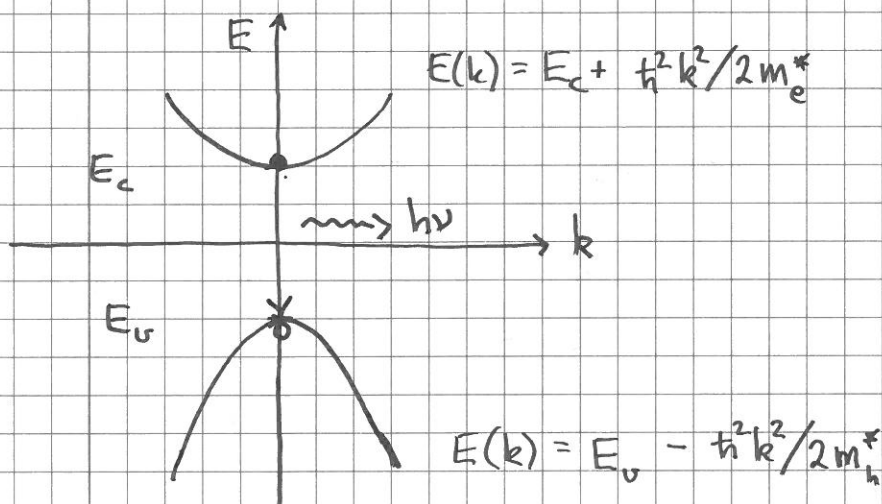
Dvs: Lysets farge bestemmes av båndgapet E_g .

[Blå LED essensielt for utvikling av LED-belysning;
Nobelpris i fysikk 2014 (Akasaki, Amano, Nakamura)]

Hva er direkte og indirekte båndgap?

Og hvorfor direkte båndgap i LED-materialer?

Fra s. 104 og 114:



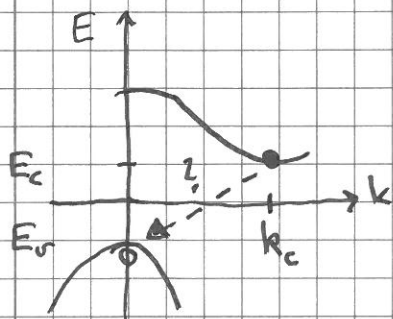
Direkte båndgap: Bunnen av ledningsbåndet (E_c) og toppen av valensbåndet (E_v) ved samme k -verdi, som regel $k=0$. [Husk: $\hbar k$ = elektronets impuls]

Spontan emisjon av foton via rekombinasjon av elektron og hull er en fysisk prosess der både impuls og energi må være bevart.

Typisk fotonimpuls: $p_\nu = E_g/c \sim 1 \text{ eV} / 3 \cdot 10^8 \text{ m/s} \sim 5 \cdot 10^{-28} \text{ kg m/s}$

Dvs at elektronets ($\bullet$) impuls p_e og hullets ($\circ$) impuls p_h ikke kan være mer forskjellige enn $p_\nu \sim 5 \cdot 10^{-28} \text{ kg m/s}$, som tilsvarer at $\Delta k = |k_e - k_h| \sim p_\nu / \hbar \sim 5 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$.

Si er et eks. på halvleder med indirekte båndgap:



Her er $k_v = 0$, mens $k_c \approx \pi/a$, der a er gitterkonstanten i Si, $a \sim 5 \text{ \AA}$; det gir $k_c \sim 6 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} \gg p_\nu / \hbar$. Dermed: Impulsbevarelse ikke mulig kan med fotonemisjon!

Rekombinasjon mellom elektron ~~hull~~ i tilstand med $k=k_c \approx \pi/a$ og hull i tilstand med $k=k_v \approx 0$ kan skje med emisjon av foton, hvis vi samtidig får "hjelp" av vibrasjonsenergien i ionegitteret ("fononer").

Men slike prosesser er mye mindre sannsynlige enn direkte overganger fra $k=k_c=0$ til $k=k_v=0$, uten assistanse fra fononer.

Derfor: Direkte båndgap i LED!

Eks: GaAs (IR), GaP (rød, oransje), ---, InGaN (blå)

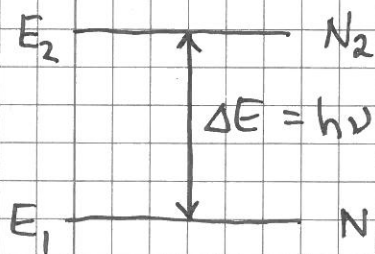
LASER

Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

Dvs: Stimulert emisjon er her den grunnleggende fysiske mekanismen.

Fra s. 123 og 124 er det klart at vi må få til et per betingelser:

- Tilstrekkelig mange atomer (ent elektroner) i en gitt eksisert tilstand
- Tilstrekkelig mange fotoner til stede, med "riktig" energi og frekvens

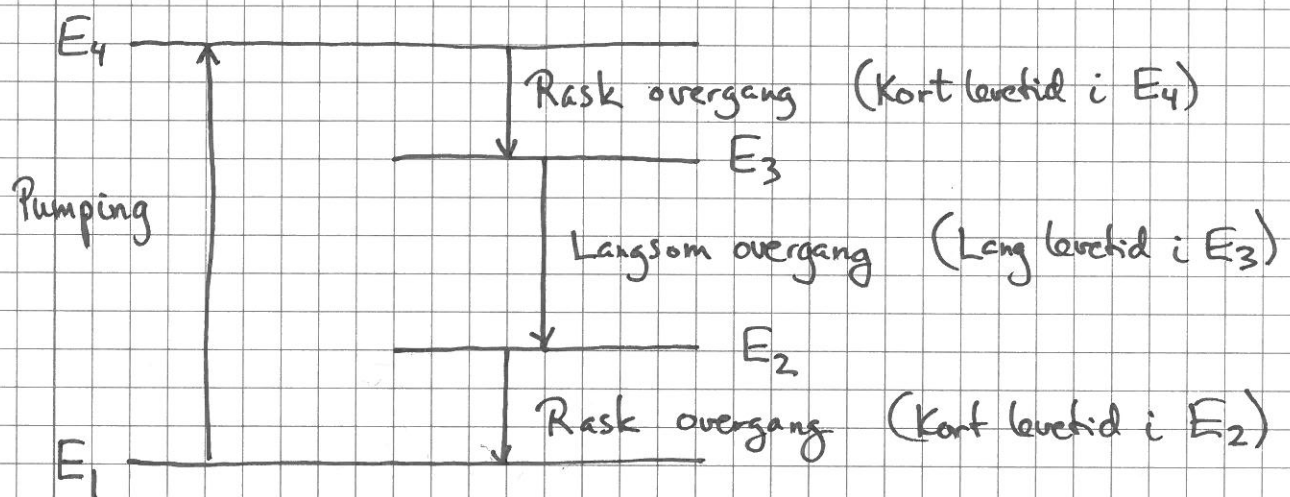


I likerekt vet vi at N_2 er en (Boltzmann-)faktor $\exp(-h\nu/k_B T)$ mindre enn N_1 .

Da vil sannsynligheten være (mye) større for absorpsjon enn for (stimulert) emisjon av et foton med energi $h\nu$.

Hvis stimulert emisjon skal bli dominerende prosess, må vi skape populasjonsinversjon, dvs $N_2 > N_1$.

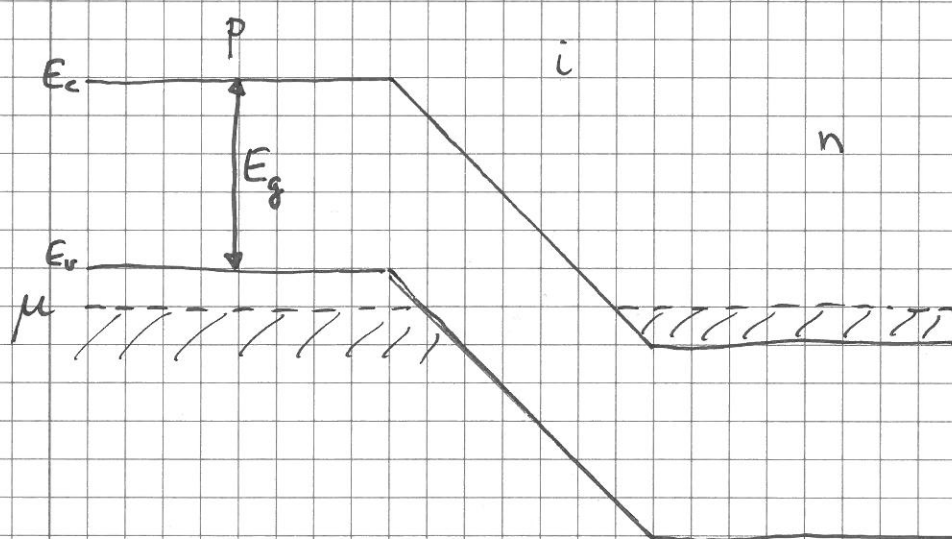
Eksempelvis slik, med 4 nivåer:



$\Rightarrow N_3 > N_2$ blir nå mulig!

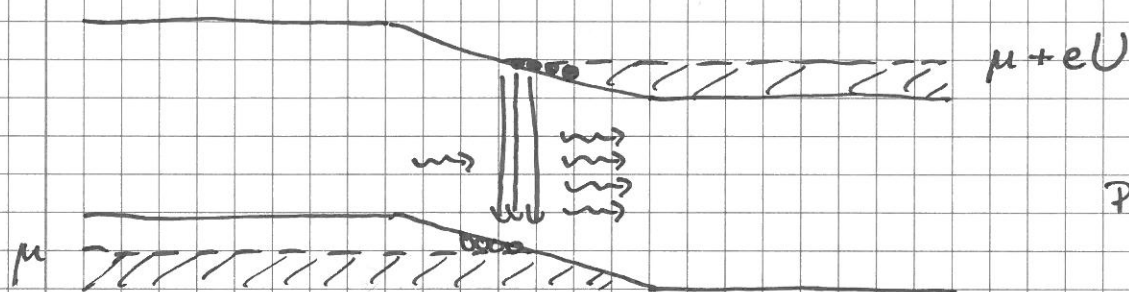
Ved å sørge for at det hele tiden er fotoner til stede i systemet med energi $h\nu = E_3 - E_2$ kan en stimulere et stort antall overganger fra E_3 til E_2 ; dvs Laser-virkning!

Laser-diode: Typisk en p-i-n-struktur med
 høj grad af doping i p- og n-områderne; i =
 intrinsisk (udøjet område).



Sterk doping
 ↓
 Fermi-niveau μ
 under E_v i p
 og over E_c i n

Termisk ligevægt



Positiv U

Med tilstrækkelig positiv ydre spænding U vil mange elektroner
 i ledn.båndet befinde sig rørlig i samme område som
 mange hull i valensbåndet. Tilstedeværende fotoner med
 energi $h\nu \approx E_g$ (fås enten fra "optisk pumping" eller
 fra spontan emission) kan da stimulere emission via
 elektron+hull rekombination $\Rightarrow$ Laservirkning!

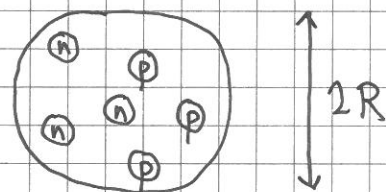
Også her: Direkte båndgap er påkrævet!

YF 43 og 44: Kjernefysikk og Partikkelfysikk.

(Et "kort" utdrag. Les resten selv i YF.)

43.1 Kjernens egenskaper

Fra spredningeksperimenter:



$$R = R_0 \cdot A^{1/3} = \text{kjernens radius}$$

p = proton
n = nøytron

med

$$R_0 \approx 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 1.2 \text{ fm}$$

$$A = Z + N = \text{antall nukleoner}$$

$$Z = \text{antall protoner} = \text{atomnummeret}$$

$$N = \text{antall nøytroner}$$

$$\text{Volum: } V = \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{4}{3} \pi R_0^3 \cdot A$$

$$\text{Masse: } m \approx A \cdot u ; \quad 1u \approx 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\text{Massetetthet: } \rho = m/V = 3u/4\pi R_0^3 \approx 2.3 \cdot 10^{17} \text{ kg/m}^3$$

$\Rightarrow$ (praktisk talt) lik massetetthet for alle kjerner

Nuklide: gitt Z og N (og A)

Isotoper: samme Z , ulik N ; ${}_Z^A X$; $X = \text{atomsymbol}$

Eks: ${}_6^{12}\text{C}$, ${}_6^{13}\text{C}$ ("karbon-12", "karbon-13")

Spinn: Både p og n har $s = \frac{1}{2}$, dvs de er fermioner

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar$$

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

Banedreieimpuls: $L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$; $l = 0, 1, 2, \dots$

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

Total dreieimpuls: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

For kjerne med A nukleoner: $\vec{J} = \sum_{i=1}^A \vec{J}_i$

med $J = |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)} \hbar$ og $J_z = m_j \hbar$; $m_j = -j, \dots, 0, \dots, j$

Hvis A er partall: Heltallig j

Hvis A er oddetall: Halvtallig j

Hvis både Z og N er partall: $j = 0$

Dvs: Både protoner og nøytroner okkuperer tilstander "parvis", med motsatt dreieimpuls.
(Slik elektroner gjør det i atomer.)

Magnetisk moment (se også s. 79-81) :

Vi definerer et kjernemagneton: $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} \approx 5.05 \cdot 10^{-27} \text{ J/T}$

Merk at $\mu_N \ll \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$ (Bohr magneton)

Vil forvente (siden $\mu_z \approx \mu_B$ for elektronets spinn)

μ_z (proton) $\approx \mu_N$ og μ_z (nøytron) ≈ 0 siden protonet har ladning $+e$ og nøytronet har ladning 0 .

Ekspenimenter viser : Proton $\mu_z^p \approx 2.7928 \mu_N$
 Neutron $\mu_z^n \approx 1.9130 \mu_N$

Dette antyder en indre struktur i p og n. De er da heller ikke punktformede elementærpartikler (som elektronet), men består av tre kvarker.

For en gitt atomkjerne er $|\vec{\mu}|$ typisk noen μ_N .

NMR og MRI (Nuclear Magnetic Resonance, Magnetic Resonance Imaging) :

Kjerne med magn. moment $\vec{\mu}$ i ytre magnetfelt $\vec{B} = B\hat{z}$ har pot. energi

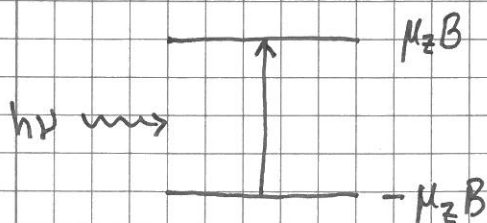
$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B$$

som med kvantisert μ_z gir kvantiserte energinivåer.

Anta f.eks. proton (dvs ^1H -kjerne) i tilstand med $l=0$, dvs $j=s=1/2$.

Da kan kjernen ha "spinn opp" eller "spinn ned", med hhv $U = -\mu_z B$ eller $U = +\mu_z B$.

$\Rightarrow$ Fotoner med energi $h\nu = \Delta E = 2\mu_z B$ kan absorberes og emitteres av slike kjerner ("resonans")



Eks: Med $B = 1.5 \text{ T}$ og $\mu_z = 2.7928 \mu_N$,
bestem frekvens og bølglengde på E.M. bølger
som gir resonans.

Løsn: $\nu = 2\mu_z B / h = 2 \cdot 2.7928 \cdot \left(\frac{e\hbar}{2m_p}\right) \cdot 1.5 \text{ T} / h$
 $= 8.3784 \cdot \frac{e}{4\pi m_p} \approx \underline{64.26 \text{ MHz}}$
 $\lambda = c/\nu \approx \underline{4.67 \text{ m}} \quad \left[\begin{array}{l} \hookrightarrow \frac{\nu}{B} \approx 42.6 \frac{\text{MHz}}{\text{T}} \end{array} \right]$

Dvs: Radiobølger (like under FM-båndet)

MRI: Protoner har ulike omgivelser i ulikt vev

$\Rightarrow$ Varierende $\vec{B}$ -felt fra vev til vev

$\Rightarrow$ Resonans ved varierende λ fra vev til vev

$\Rightarrow$ Avbildning mulig!

43.2 Binding og struktur

Kjernens bindingsenergi E_B defineres som endring i
huleenergi (mc^2) når ~~kjernen~~ ^{atomet} ${}_Z^A X$ splittes opp i

Z hydrogenatomer (${}_1^1\text{H}$; kun et proton i kjernen) og

$N = A - Z$ nøytroner:



$$E_B/c^2 = Z \cdot M_H + N \cdot m_n - M_X$$

Eks: Deuterium, ${}^2_1\text{H}$, masse 2.014102 u. $E_B = ?$

Løsn: $M_H = 1.007825 \text{ u}$, $m_n = 1.008665 \text{ u}$

$$\Rightarrow E_B = c^2 \cdot \{1.007825 + 1.008665 - 2.014102\} \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \\ \approx 3.6 \cdot 10^{-13} \text{ J} \approx \underline{2.2 \text{ MeV}}$$

[Vi har $c^2 \cdot 1 \text{ u} \approx 931.5 \text{ MeV}$, slik at $E_B \approx 931.5 \text{ MeV} \cdot \frac{\Delta m}{u}$]

Pr nukleon: $E_B/A \approx 1.1 \text{ MeV}$ for ${}^2_1\text{H}$

Eks: ${}^{62}_{28}\text{Ni}$, $M = 61.928349 \text{ u}$, $E_B = ?$

Løsn:

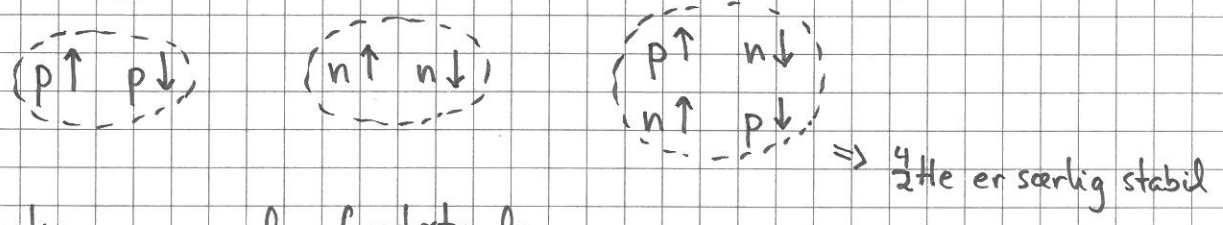
$$E_B = 931.5 \text{ MeV} \cdot \{28 \cdot 1.007825 + 34 \cdot 1.008665 - 61.928349\} \\ = 931.5 \text{ MeV} \cdot 0.585361 \\ = \underline{545.3 \text{ MeV}}$$

Pr nukleon: $E_B/62 \approx \underline{8.795 \text{ MeV}}$

[Se Fig. 43.2 i YF]

Sterke kjernekrefter:

- tiltrekkende
- kort rekkevidde ($\sim 10^{-15}$ m)
- uavhengig av elektrisk ladning
- hvert nukleon vekselvirker med sine naboer
- gir opphav til pardannelse og "par-av-par-dannelse":



- konkurrerer med frast\o t\o t\o nde Coulombkrefter (mellom protoner)

Dette empiriske grunnlaget muliggj\o r et par relativt enkle modeller for \aa beskrive binding i kjerner kvantitativt.

V\ae skedr\ae pemodellen:

Baserer seg p\aa at masetettheten ρ er tiln\ae rmet konstant, dvs at $R \sim A^{1/3}$ (R =kjerneradius; A =antall nukleoner).

$$E_B = C_1 A - C_2 A^{2/3} - C_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - C_4 \frac{(A-2Z)^2}{A} \pm C_5 A^{-4/3}$$

(Her er de 5 koef. $C_1 - C_5$ positive, med dimensjon energi.)

Argumenter for disse fem leddene:

- ① V.v. kun med de n\ae rmeste naboene $\Rightarrow$ ledd prop. med A
- ② Fradrag prop. med overflatearealet, dvs prop. med R^2 , dvs. prop. med $A^{2/3}$, fordi ~~de~~ nukleoner p\aa overflaten har f\ae rre naboer enn nukleoner "inni"

- ③ Fradrag pga frastøtende Coulombkrefter, der Z protoner v.v. med alle de $Z-1$ resterende
 $\Rightarrow$ ledd prop. med $Z(Z-1)/R \sim Z(Z-1)/A^{1/3}$
- ④ Siden "kvartetter" med $2p + 2n$ gir stabilisert kjerne (store E_B), må vi ha med et fradrag dersom det er "dårlig balanse" mellom N og Z . Kunne f.eks. ha vært prop. med $-|N-Z|$, men best samsvar med exp. oppnås med $-(N-Z)^2/A$, som med $N=A-Z$ gir $-(A-2Z)^2/A$.
- ⑤ Fradrag hvis ikke optimal pardannelse er mulig:
 Z og N partall $\Rightarrow +C_5 A^{-4/3}$
 Z og N oddetall $\Rightarrow -C_5 A^{-4/3}$
 Z eller N partall $\Rightarrow 0$
 (Best samsvar med exp. hvis eksponent $-4/3$.)

Tallverdier (MeV): $C_1 = 15.75$, $C_2 = 17.80$, $C_3 = 0.7100$,
 $C_4 = 23.69$, $C_5 = 39$

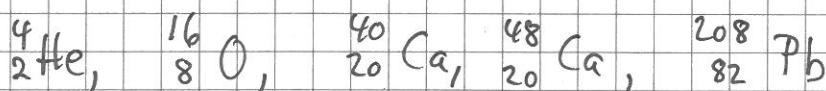
Eks: Bruk dråpemodellen og regn ut E_B , E_B/A
 og $M(^{238}\text{U}) = 92 m_H + 146 m_n - E_B/c^2$
 for uran-isotopen $^{238}_{92}\text{U}$. Sammenlign med de
 målte verdiene $(E_B/A)_{\text{exp}} = 7.57 \text{ MeV}$ og $M = 238.051 \text{ u}$.

["Fasit": Feilen i E_B/A er ca 0.8%,
 feilen i M er ca 0.006 %.]

Skallmodellen:

Analogt med at atomer med $Z = 2, 10, 18, 36, 54$ (dvs edelgassene) er spesielt stabile, er kjerner med N og/eller $Z = \underbrace{2, 8, 20, 28, 50, 82, 126}_{\text{"Magiske tall"}}$ også særlig stabile.

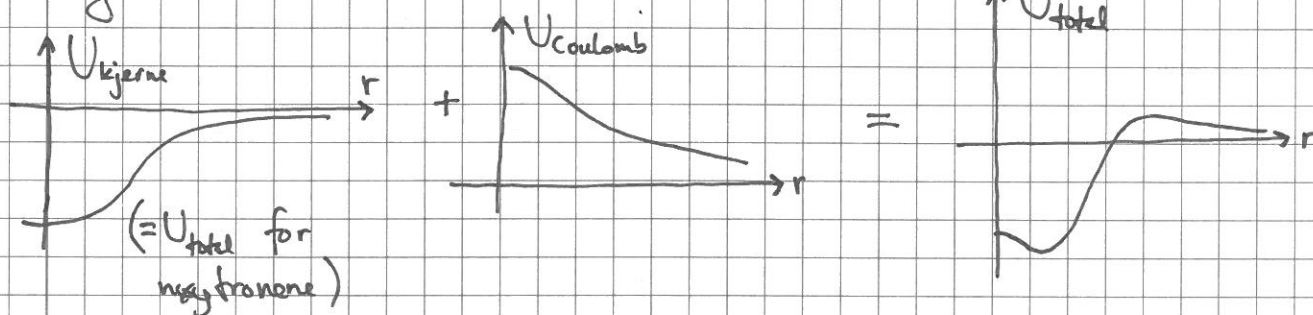
Med både N og Z magiske fås de "dobbelst-magiske" kjernene



som er ekstra stabile.

Modellen tar utgangspunkt i å anta at et gitt nukleon beveger seg i et "gjennomsnittlig potensiel" fra alle de andre.

Dette potensialet er summen av et sterkt tiltrekkende kjernepotensial U_{kjerne} med kort rekkevidde, og, for protonene, et svakere frastøtende Coulombpotensial U_{Coulomb} med lang rekkevidde:



Siden TUSL for elektroner i atomer gir "skall"

(K, L, M, N... for $n=1, 2, 3, 4, \dots$, se s. 75), er det vel bare

"rett og rimelig" at $U_{\text{total}}(r)$ og TUSL for protoner og neutroner i kjernen også gir skall. Med $U_{\text{total}}(r)$ forskjellig fra $U_{\text{Coulomb}}(r)$ fås andre magiske tall enn for elektroner i atomer!

43.3 Radioaktivitet

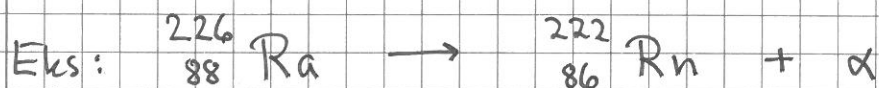
Det fins ca 2500 kjente nuklider, mindre enn 300 av disse er stabile.

Ustabile kjerner spaltes (henfaller; "decay"), med utsending av partikler eller fotoner.

Levetider varierer mellom brøkdel av μs til milliarder av år. [Se eksempel s. 67]

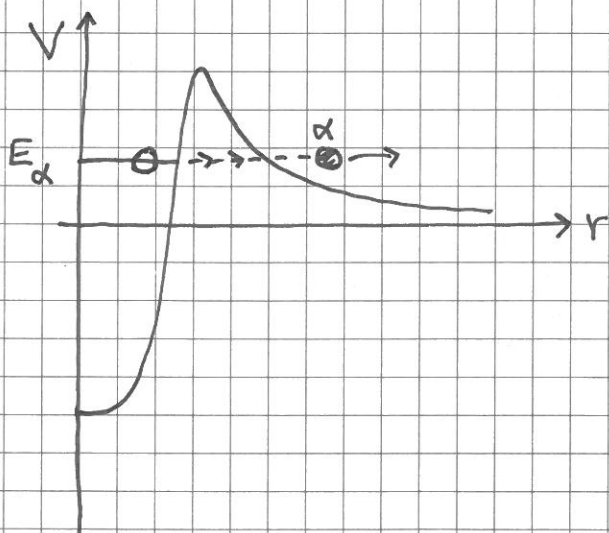
α -decay

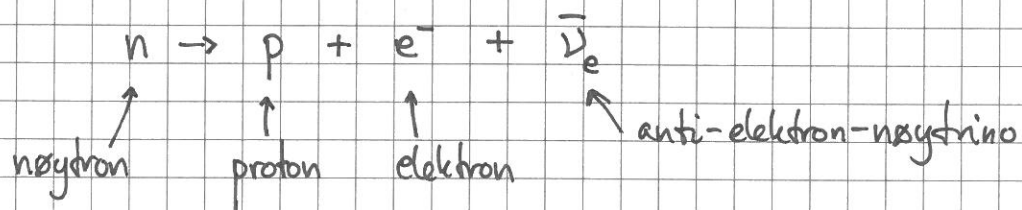
${}^4_2\text{He}$ sendes ut



Spontan α -decay mulig hvis $\Delta m < 0$ (massen reduseres) i reaksjonen; da frigjøres energi.

α -partikkelen må tunnelere gjennom en potensialbarriere for å unnslippe kjernen:



β -decay β^- : frigjøring av elektron (e^-)

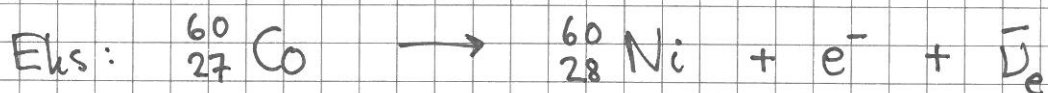
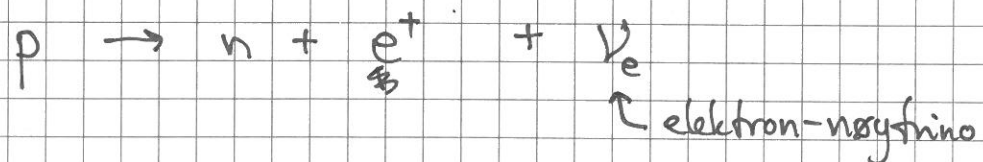
Spinnet må være bevart $\Rightarrow \bar{\nu}_e$ må ha $s = 1/2$, siden både n, p og e^- har $s = 1/2$

Ladning må være bevart $\Rightarrow \bar{\nu}_e$ må ha null ladning

Masse? $m(\bar{\nu}_e) \approx 0$ (men ikke eksakt null...)

Observert i 1953.

Spontan β^- -decay fordrer $\Delta m < 0$.

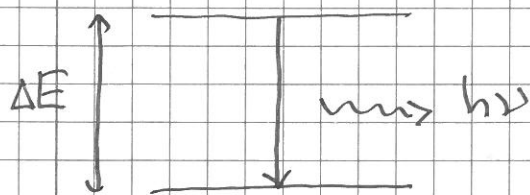
 β^+ : frigjøring av positron (e^+)

elektron-innfangning:



γ -decay

Utsending av foton, ved overgang fra eksitert tilstand til grunntilstanden for kjernen.



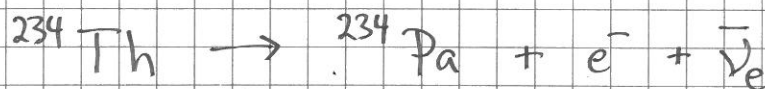
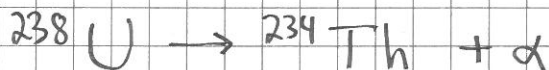
$$\Delta E \sim 10 \text{ keV til } 5 \text{ MeV}$$

Naturlig radioaktivitet:

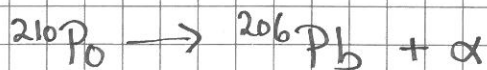
Moderkjerne $\rightarrow$ Datterkjerne + $\{\alpha, \beta \text{ eller } \gamma\}$

Kan skje via mange "mellomtrinn" før stabil kjerne oppnås.

Eks:



⋮



via 8 α -decays og 6 β^- -decays.

43.4 Aktivitet og halveringstid

143

Et enkelt, standard statistisk argument gir

$N(t)$ = antall (gjenværende) radioaktive kjerner ved tid t

dersom

λ = sannsynligheten pr tidsenhet (raten) for at en gitt kjerne spaltes

Da er

$$-dN = \lambda dt \cdot N$$

der

$-dN$ = antall kjerner som spaltes mellom t og $t+dt$

λdt = sanns. for at gitt kjerne spaltes mellom t og $t+dt$

Enkel diff. ligning,

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt,$$

med løsning

$$N(t) = N(0) e^{-\lambda t}$$

$N(0)$ = antall radioaktive kjerner ved tid $t=0$

Halveringstid $T_{1/2}$ definert ved: $\frac{N(t+T_{1/2})}{N(t)} = \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow e^{-\lambda T_{1/2}} = 1/2 \Rightarrow T_{1/2} = \frac{1}{\lambda} \ln 2$$

Levetid: $\tau = 1/\lambda$

$$(\Rightarrow T_{1/2} = \tau \cdot \ln 2)$$

Enheter for radioaktivitet:

1 Bq (becquerel) = 1 spalting pr sekund

1 Ci (curie) = $3.70 \cdot 10^{10}$ spaltinger pr sekund

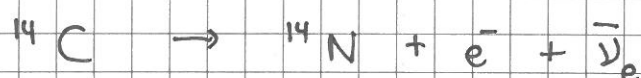
[omtrentlig decay-raten for 1g radium (Ra)]

Radiologisk datering:

Levende organismer puster inn og ut CO_2 fra og til atmosfæren

$\Rightarrow$ atmosfærens isotop-fordeling av karbon den samme som i levende organismer

Opptak av CO_2 stanser når organismen dør, og andelen av f.eks. ^{14}C øktar pga β -decay,



med en halveringstid $T_{1/2} = 5730$ år.

$\Rightarrow$ Hvis vi kjenner $[^{14}\text{C}]$ i atmosfæren (over tid), kan forløpt tid fra organismens død beregnes.

43.5 Biologiske effekter av stråling

Svært viktig tema i biofysikk / medisinsk fysikk,
Her: Lesestoff.

43.6 Kjernerreaksjoner

"Generell" kjernerreaksjon: $A + B \rightarrow C + D$

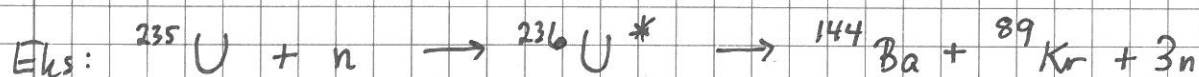
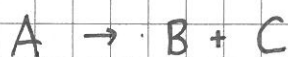
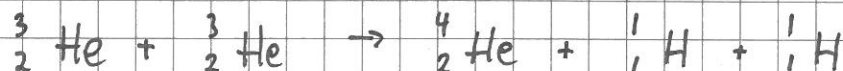
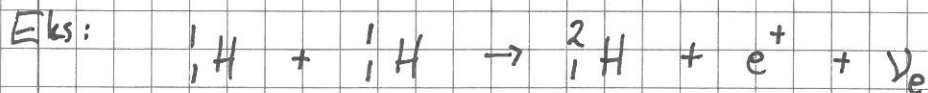
Reaksjonsenergi: $Q = (M_A + M_B - M_C - M_D) c^2$

~~Fortegn~~Fortegnssvalg: $Q > 0 \hat{=}$ eksoterm reaksjon; masse omdannes til kinetisk energi

$Q < 0 \hat{=}$ endoterm reaksjon; kin. energi omdannes til masse (hvileenergi)

Terskelenergi:

For å få en gitt endoterm reaksjon til å skje, må initiell kin. energi K_i være minst like stor som $|Q|$.

43.7 Fisjon43.8 Fusjon

44.3 Partikler og vekselvirkninger

V.v.	Relativ styrke	Rekkevidde	Utreksslingspartikkel			
			Namn	Masse	Ladning	Spin
Sterk	1	Kort ($\sim 1 \text{ fm}$)	Gluon	0	0	1
E.M.	$1/137$	Lang ($\sim \frac{1}{r^2}$)	Foton	0	0	1
Svak	10^{-9}	Kort ($\sim 10^{-18} \text{ m}$)	$W^{\pm}, Z^0$	$80.4 \frac{\text{GeV}}{c^2}$ $91.2 \frac{\text{GeV}}{c^2}$	$\pm e, 0$	1
Gravitasjon	10^{-38}	Lang ($\sim \frac{1}{r^2}$)	Graviton	0	0	2

Graviton : Ikke exp. påvist

Gluon, foton : Stabile

$W^{\pm}, Z^0$: Exp. påvist ved CERN ~~1983~~ 1983 ; Rubbia og van der Meer, Nobelpris 1984

Antipartikler :

Med partikler med høy energi må Schrödingerlign. erstattes av den relativistiske Diracligningen. Diracligningen gir både positive energier,

$$E = +\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

og negative energier,

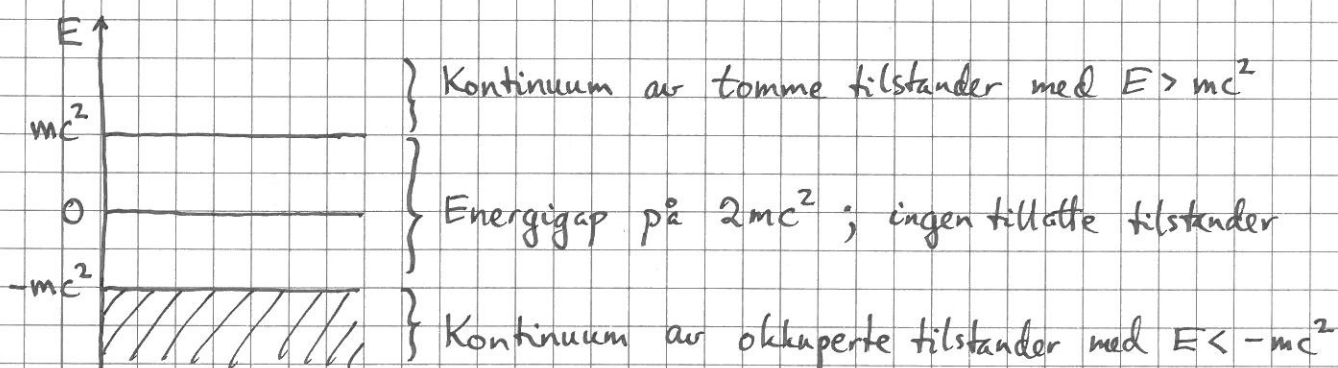
$$E = -\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

som mulige løsninger, for frie partikler med masse m og impuls $\vec{p}$.

Dirac foreslo at tilstandene med $E < 0$ (egentlig: $E < -mc^2$) alle er okkupert av elektroner, ett i hver tilstand, siden de er fermioner som oppfyller Pauli-prinsippet.

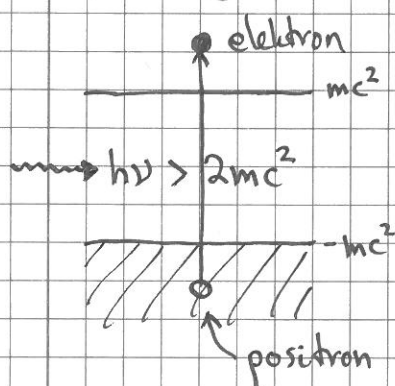
Denne "sjøen" med uendelig mange elektroner er en slags uniform bakgrunn som vi ikke "ser", omtrent som at et fullt valensbånd i en krystall ikke gir noe bidrag til elektrisk strøm.

Grunntilstanden ("Vakuum") kan dermed beskrives slik:

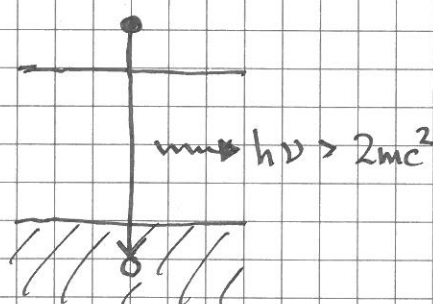


Dette forklarer både parproduksjon, parannihilasjon, og eksistensen av antipartikler (positronet i elektronets tilfelle, påvist av Carl Anderson i 1932):

Parproduksjon:



Parannihilasjon:



[Sammenlign med hull og elektroner i faststoff-fysikk]

Partikkel og dens antipartikkel har lik masse, men motsatt ladning. Hvis den ene har spinn $\vec{S}$ og magnetisk moment $\vec{\mu}$ i samme retning, har den andre $\vec{S}$ og $\vec{\mu}$ i motsatt retning. (Men lik $S = |\vec{S}|$!)

Kvantefeltteori (QED og QCD) viser at alle partikler har sin antipartikkel. Antiprotonet $\bar{p}$ ble oppdaget i 1955, antineutronet $\bar{n}$ i 1956.

Klassifisering av partikler:

(148)

Leptoner: Partikler uten sterk v.v.

Fermioner, $s = 1/2$

6 stk: e^- , ν_e (elektron, elektron-nøytrino)

μ^- , ν_μ (myon, myon - " -)

τ^- , ν_τ (tau, tau - " -)

Masser: $m_e = 0.511 \text{ MeV}/c^2$

$m_\mu = 105.7$ " -

$m_\tau = 1777$ " -

($m_\nu \approx 0$)

Bevaringslov: Leptontallene L_e , L_μ , L_τ er alle bevart.

e^- , ν_e : $L_e = 1$; e^+ , $\bar{\nu}_e$: $L_e = -1$
(og tilsv. for μ og τ)

Ekst: $\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$

Før: $L_\mu = 1$, $L_e = 0$

Etter: $L_\mu = 1$, $L_e = 1 - 1 = 0$ } ok!

Hadroner: Partikler med sterk v.v.

Underklasser: Mesoner, Baryoner

Mesoner: Bosoner med $s = 0$

Ustabile

π , K og η

Baryoner: Fermioner med $s = 1/2$

p er stabil, n har lang levetid, resten er ustabile ($\Lambda, \Sigma, \Xi, \Delta, \Omega, \dots$)

Konservierungslov: Baryontallet B er bevart.

Baryon $\Rightarrow B = +1$

Antibaryon $\Rightarrow B = -1$

Eks: $n + p \rightarrow n + p + p + \bar{p}$

Før: $B = 1 + 1 = 2$

Etter: $B = 1 + 1 + 1 - 1 = 2$ } OK

44.4 Kvarker

Leptonene er fundamentale (udelelige) elementærpartikler

Hadroner består av 2 eller 3 kvarker.

Kvarker er fermioner med $s = 1/2$ og ladning $-\frac{1}{3}$ eller $+\frac{2}{3}$.

Meson = kvark + antikvark par

Baryon = 3 kvarker; Antibaryon = 3 antikvarker

6 ulike kvarker: u (up), d (down), s (strange), c (charm), b (bottom), t (top)

Hver kvark har sin antikvark, og alle kommer i tre ulike farger, "rød", "grønn" og "blå".

$\Rightarrow$ i alt $6 \cdot 2 \cdot 3 = 36$ varianter!

Eks: Proton, $p = uud$, $Q_u = +\frac{2}{3}$, $Q_d = -\frac{1}{3} \Rightarrow Q_p = \frac{2}{3} + \frac{2}{3} - \frac{1}{3} = \underline{\underline{+1}}$

Nøytron, $n = udd \Rightarrow Q_n = \frac{2}{3} - \frac{1}{3} - \frac{1}{3} = \underline{\underline{0}}$

All materie bygd opp av 3 typer elementærpartikler:
Leptoner, Kvarker og Utvekslingspartiklene.

De 6 leptonene klassifiseres etter ladning (Q), elektron-tall (L_e), myon-tall (L_μ) og tau-tall (L_τ):

	Q	L_e	L_μ	L_τ
e	-1	1	0	0
ν_e	0	1	0	0
μ	-1	0	1	0
ν_μ	0	0	1	0
τ	-1	0	0	1
ν_τ	0	0	0	1

(For de 6 antileptonene snus alle fortegn.)

De 6 kvarkene klassifiseres etter ladning (Q), "strangeness" (S), "charm" (C), "beauty" (B), "truth" (T), "upness" (U), "downness" (D):

	Q	D	U	S	C	B	T
d	$-1/3$	-1	0	0	0	0	0
u	$2/3$	0	1	0	0	0	0
s	$-1/3$	0	0	-1	0	0	0
c	$2/3$	0	0	0	1	0	0
b	$-1/3$	0	0	0	0	-1	0
t	$2/3$	0	0	0	0	0	1

(Alle fortegn snus for antikvarkene)

Utrekslingspartiklene:

Fotonet (for E.M. v.r.)

W^+ , W^- og Z (for svake kjernekraft)

Gravitonet (antas; for gravitasjon)

8 stk gluoner (for sterk kjernekraft)

⇒ I alt 12 (evt. 13 hvis gravitonet regnes med)

I tillegg: Higgs-partikkelen ! (CERN, LHC, 4/7 - 2012)

Gir i alt minst 61 (62) elementærpartikler:

12 lepton-/antileptoner

36 kvarker/antikvarker

13 (14) utrekslingspartikler

44.6 og 44.7 Kosmologi

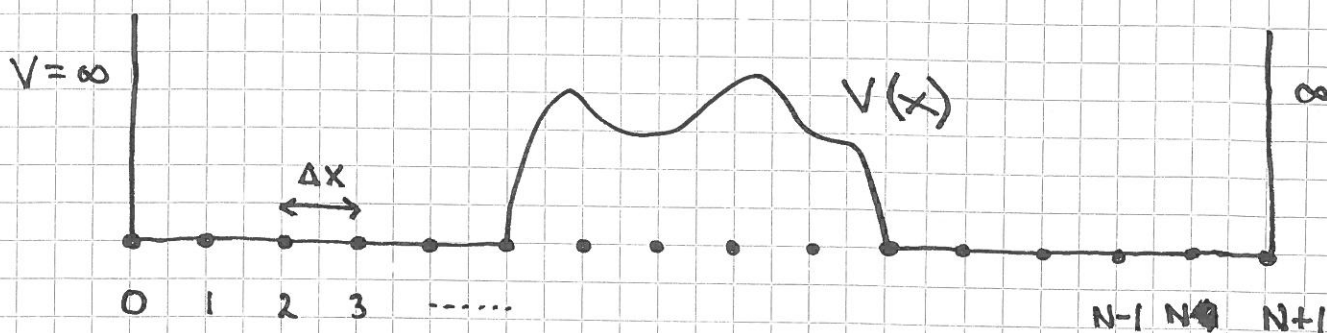
Lesestoff

Numerisk løsning av TUSL

[En metode;
andre finnes!]

(N1)

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



$$\psi(0) = \psi_0 = 0, \quad \psi((N+1)\Delta x) = \psi_{N+1} = 0$$

$$\psi(n \cdot \Delta x) = \psi_n, \quad V(n \cdot \Delta x) = V_n$$

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

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

$$(n=1, 2, 3, \dots, N)$$

$$\Rightarrow \vec{H} \vec{\psi} = E \vec{\psi}; \quad \vec{H} = (N \times N)\text{-matrise med}$$

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

(resten av $H_{ij} = 0$)

$$\Rightarrow (H - E I) \vec{\Psi} = 0 \quad (I_{nn} = 1) \quad (N2)$$

Ikke-trivielle løsninger (dvs: $\vec{\Psi} \neq 0$) kun dersom

$$\det(H - E I) = 0$$

$$\Rightarrow N\text{-te-gradsligning, } c_N E^N + c_{N-1} E^{N-1} + \dots + c_0 = 0$$

med N løsninger $E_1, E_2, \dots, E_N$ som

er energieigenverdiene til TUSL.

Til hver E_j hører en eigenvektor $\vec{\Psi}_j$ som er bølgefunksjonen som hører til E_j ; bestemmes

ved å løse $(H - E_j I) \vec{\Psi}_j = 0$, og til

slutt normere ved å kreve $\int |\vec{\Psi}_j|^2 dx = 1$,

$$\text{dvs } \sum_{i=1}^N \Psi_j^{(i)*} \cdot \Psi_j^{(i)} \cdot \Delta x = 1.$$

Ser at H er symmetrisk (dvs $H_{n,n+1} = H_{n+1,n}$) og reell; har da reelle egenverdier E_j , og tilhørende egenvektorene $\vec{\Psi}_j$ kan også velges reelle, og ortogonale.

Standard egenverdiproblem, løses med `linalg.eigh(H)` i python: $w, v = \text{np.linalg.eigh}(H)$

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

kolonne nr 0 i $v = \vec{\Psi}_1, \dots$, kolonne nr $N-1$ i $v = \vec{\Psi}_N$
(dvs $v[:,0], \dots, v[:,N-1]$)