

Plancks strålingslov [OS 6.1; YF 39.5]

①

Legeme med temperatur T emitterer energi i form av elektromagnetiske (EM) bølger.

Eks: Sola. Overflatetemp. ca 5800 K



$j(T)$ = emittert effekt pr flateenhet (W/m^2)

Josef Stefan (exp 1877) og Ludwig Boltzmann (termodynamikk 1884):

$$j(T) \sim T^4 \quad (\sim : \text{proporsjonal med})$$

Svart legeme:

Generelt vil EM stråling inn mot et legeme delvis absorberes, reflekteres og transmitteres, med andeler a , r og t , dvs $a+r+t=1$.

Et svart legeme er en idealisering med $a=1$.

Hvis det svarte legemet er i termisk likevekt, dvs har konstant temp. T , må det emittere like mye energi som det absorberer. Dermed:

$$a = e = 1 \quad ; \quad e = \text{emisjonseffekten (emissiviteten)}$$

(Reelle eks: Polert metallplate $a \approx 0.1$
Matte overflater $a > 0.9$ (alle farger))

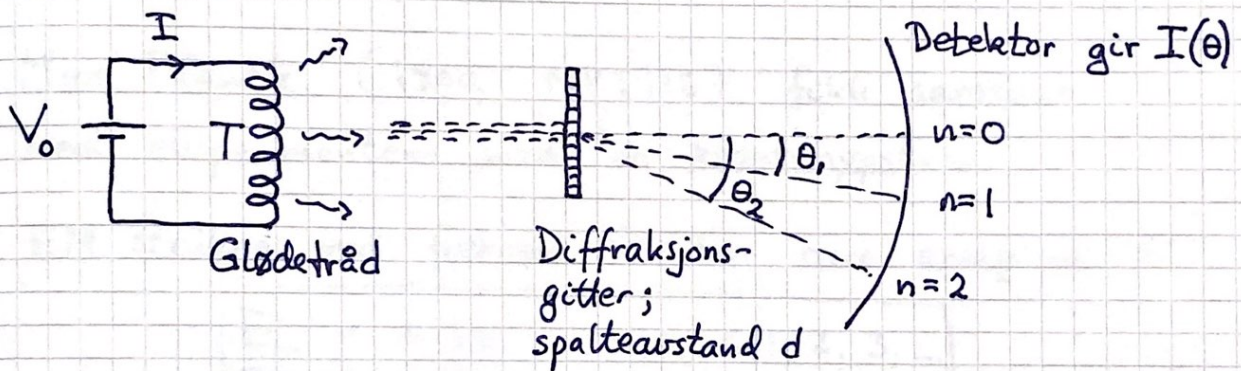
$j(T)$ er total emittert intensitet. Fordeler seg over "alle mulige" bølgelengder og frekvenser: ②

$$j(T) = \int_0^{\infty} I_{\lambda}(\lambda, T) d\lambda = \int_0^{\infty} I_{\nu}(\nu, T) d\nu$$

I_{λ} = emittert intensitet pr bølgelengdeenhet $\left(\frac{W}{m^2 \cdot m}\right)$

I_{ν} = " " " " frekvensenhet $\left(\frac{W}{m^2 \cdot Hz}\right)$

Måling av I_{λ} (eller I_{ν}):



Konstruktiv interferens i retninger som oppfyller

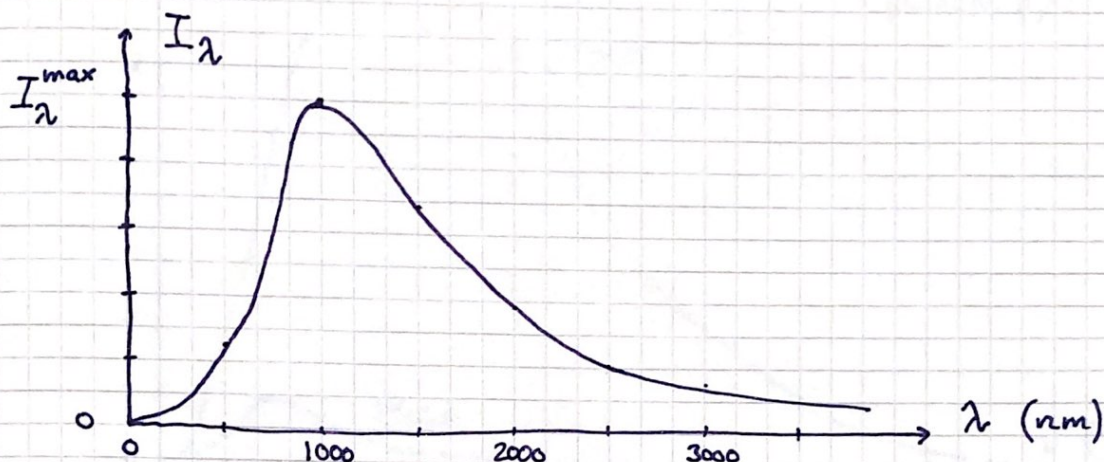
$$d \cdot \sin \theta = n \cdot \lambda$$

Kan måle $I_1(\theta)$ omkring θ_1 (gjennom 1. orden) og regne om til I_{λ} med

$$\lambda = d \cdot \sin \theta \quad (n=1)$$

③

Halogenlampe med wolframtråd, $T = 3000 \text{ K}$
(shimadzu.com) :



Max Planck (1900, NP1918) fikk samsvar med eksperimentene med en kvantehypotese :

EM stråling med frekvens ν har bare energiene

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

med $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

Dette gir frekvensfordelingen for et svart legeme :

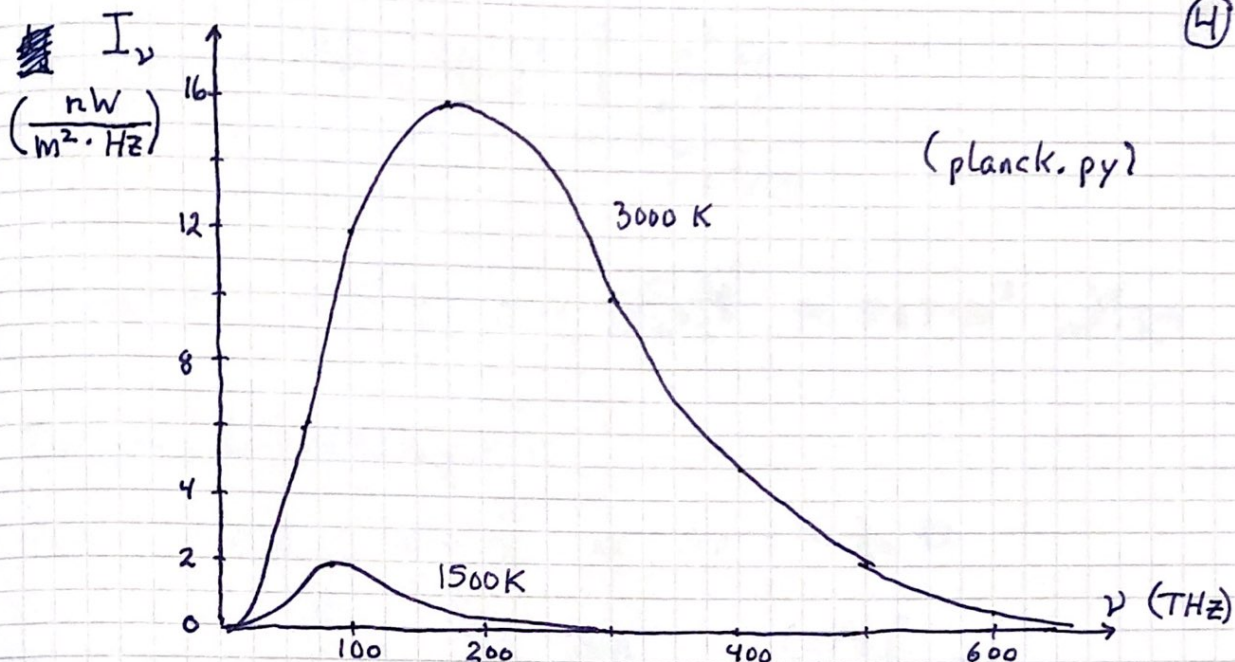
$$I_\nu(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \cdot \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

som er Plancks strålingslov. Her er

$h \equiv 6.62607015 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ = Plancks konstant

$c \equiv 299792458 \text{ m/s}$ = lysfarten i vakuum

$k_B \equiv 1.380649 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ = Boltzmanns konstant



Vi ser at

- $j(T)$ øker raskt når T økes
- ν som gir $\max I_\nu$ øker med T

Dette er hhv Stefan-Boltzmanns Lov og
Wiens forskyvningslov

Stefan - Boltzmanns lov:

$$j(T) = \int_0^\infty I_\nu(\nu, T) d\nu = \frac{2\pi h}{c^2} \int_0^\infty \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

Vi substituerer med dimensjonsløs $x = h\nu/k_B T$:

$$d\nu = \frac{k_B T}{h} dx \quad ; \quad \nu^3 = \left(\frac{k_B T}{h}\right)^3 x^3$$

(5)

$$\Rightarrow j(T) = \frac{2\pi h}{c^2} \left(\frac{k_B T}{h} \right)^4 \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}}_{= \pi^4/15}$$

$$\Rightarrow j(T) = \sigma T^4; \quad \sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^2} \approx 5.67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4}$$

Bølgelengdefordelingen:

Fra $c = \lambda \cdot \nu$: $\nu = \frac{c}{\lambda}$ og $d\nu = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda$

$$\begin{aligned} \Rightarrow j(T) &= - \int_0^\infty d\lambda \cdot \frac{c}{\lambda^2} \cdot \frac{2\pi h}{c^2} \cdot \frac{(c/\lambda)^3}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1} \\ &= + \int_0^\infty d\lambda I_\lambda(\lambda, T) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow I_\lambda(\lambda, T) = \frac{2\pi h c^2 / \lambda^5}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1}$$

Wiens forskyvningslov:

Max I_λ ved $\lambda_{\max}$ som fastlægges med $\frac{dI_\lambda}{d\lambda} = 0$.

Max I_ν ved $\nu_{\max}$ " " $\frac{dI_\nu}{d\nu} = 0$.

Gir hhv

$$\lambda_{\max} \cdot T \approx 2898 \mu\text{m} \cdot \text{K}$$

og

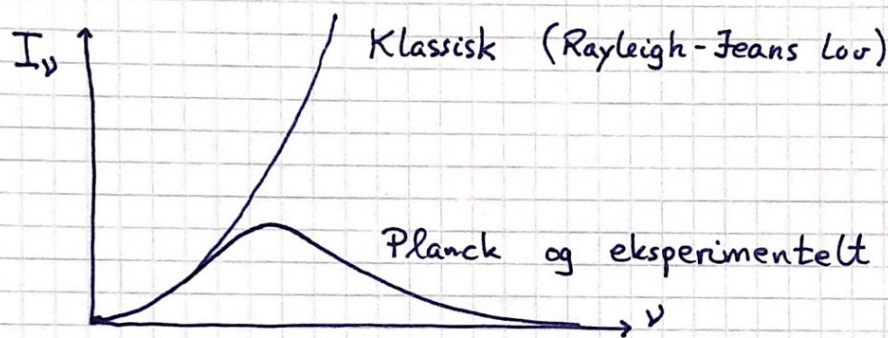
$$\frac{\nu_{\max}}{T} \approx 5.876 \cdot 10^{10} \text{ Hz/K}$$

(6)

Den klassiske grensen: Hvis termisk energi er mye større enn avstanden mellom de kvantiserte energinivåene, dvs $k_B T \gg h\nu$, forsvinner effekter knyttet til kvantisering.

$$h\nu \ll k_B T \Rightarrow e^{h\nu/k_B T} - 1 \approx 1 + \frac{h\nu}{k_B T} - 1 = \frac{h\nu}{k_B T}$$

$$\Rightarrow I_\nu(\nu, T) \approx \frac{2\pi h\nu^3/c^2}{h\nu/k_B T} = \frac{2\pi k_B T}{c^2} \cdot \nu^2$$



Siden $I_\nu \sim \nu^2$ med klassisk teori, blir

$$j(T) = \int_0^\infty I_\nu d\nu \rightarrow \infty$$

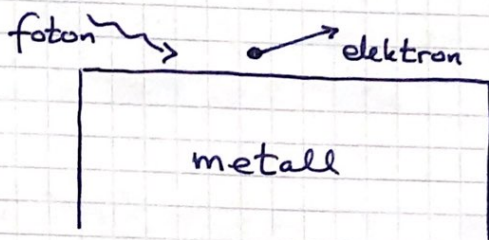
som er ufysisk. ("UV-katastrofen")

Fotoelektrisk effekt

[OS 6.2 ; YF 38.1]

⑦

EM stråling kan slå ut elektroner fra metalloverflate:

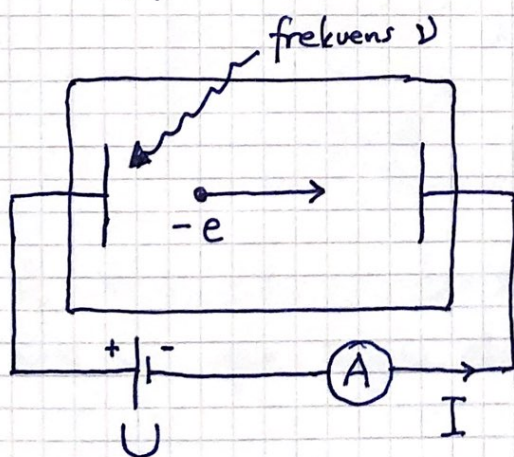


Klassisk fysikk tilsier at intensiteten i innkommende stråling må overstige en minsteverdi for at elektroner skal løsnes.

Ekperimentene (Hertz 1887, Lenard 1900,

Millikan 1914 (NP1923)) viser at frekvensen i innkommende stråling må overstige en minsteverdi for at elektroner skal løsnes.

Einstein forklarte eksperimentene med Plancks kvantehypotese (1905, NP1921) :



Vakuumrør med
to elektroder

Strålingsenergien kommer i "pakker", $E = h\nu$.
Et elektron i metalloverflaten kan bare absorbere hele energien $h\nu$.

8
Må derfor ha $h\nu > W$ for å rive løs elektroner.

W = metallets frigjøringsarbeid (work function)
= minste energi som kan løsne et elektron fra metalloverflaten

(Eks: Sn (tinn) 4.42 eV ; Na 2.36 eV)

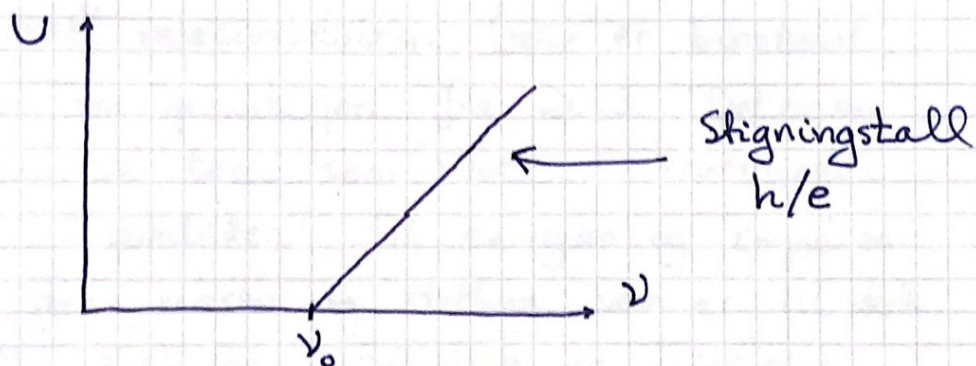
Frigjorte elektroner får kinetisk energi inntil

$$K = h\nu - W \quad (\text{pga energibevarelse})$$

Oppnår elektrisk strøm i kretsen. En motspenning

$U = K/e$ vil hindre strømmen å gå.

$$\Rightarrow U(\nu) = \frac{1}{e}(h\nu - W) = \frac{h}{e}(\nu - \nu_0) \quad (\text{Terskelspenningen})$$



$\nu_0 = W/h$ = terskefrekvensen; "lys" med $\nu < \nu_0$ gir ingen elektroner og null strøm.

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

Relativitetsteori [OS5; YF 37]

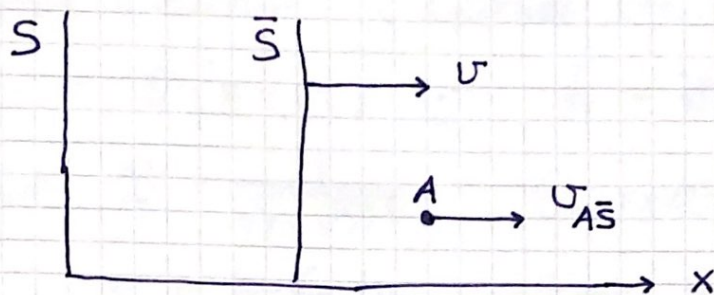
Einsteins spesielle rel.teori (SR) bygger på to postulater:

1. Relativitetsprinsippet: De samme naturlover gjelder i alle inertialsystemer (dvs: referansesystem i ro eller i rettløst bevegelse med konstant fart). Ingen ny ide; også formulert av Galilei tidligere.
2. Lysfarten i vakuum er den samme for alle observatører, uavhengig av observatørens relative bevegelse.

For de fleste er nr 1. opplagt og nr 2. uhørt!

[Generell relativitetsteori (GR) er Einsteins teori om gravitasjon fra 2015. Det er en geometrisk teori som relaterer krumningen av "romtiden" til energien og impulsen til den masse og stråling som er til stede. Dette beskrives matematisk av Einsteins feltligninger. Vi går ikke nærmere inn på GR i FY6019.]

Postulatene til Einstein har diverse konsekvenser:



S og $\bar{S}$ er to inertialsystemer i relativ bevegelse.

$v = v_{\bar{S}S}$ = farten til $\bar{S}$ relativt S

(og omvendt er da selvsagt $v_{S\bar{S}} = -v$)

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

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

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

Vi antar at $v = v_{\bar{S}S}$ er langs x -aksen.

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

(11)

Ifølge Einstein (Lorentz-transformasjonene):

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

med $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$ (Lorentzfaktoren)

$c =$ lysfarten i vakuum $\approx 3 \cdot 10^8$ m/s

- Nye uttrykk for impuls $\vec{p}$ og energi E , slik at prinsippene om impuls- og energibevarelse er i samsvar med relativitetsprinsippet:

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

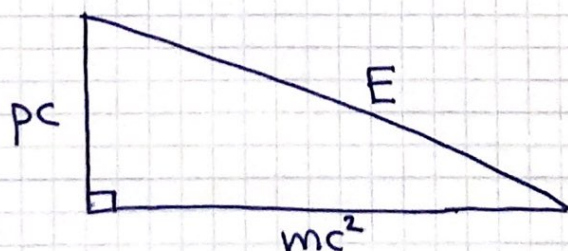
Hvilkeenergien: $E_0 = mc^2$

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

For partikkel med masse m , impuls p og energi E gjelder

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

som kan visualiseres "à la Pythagoras":



(12)

Eks 1: Lysets bølge- og partikkelegenskaper

Som bølge: $\lambda, \nu, c = \lambda \cdot \nu$

Som partikkel: $p = \gamma m v$; med $v = c$ vil $\gamma \rightarrow \infty$.

Da må vi ha $m = 0$, for å unngå $p \rightarrow \infty$.

Vi har generelt $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$, som med $m = 0$ gir $E = pc$. Samtidig er $E = h\nu$.

Alt dette gir

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

Eks 2: Kinetisk energi for ikke-relativistisk partikkel.

Når $v \ll c$ er $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} \approx 1 + v^2/2c^2$

Dermed:

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

i samsvar med definisjonen av K i ikke-relativistisk mekanikk.

Bohr - modellen (1913, NP1922) ⁰⁵ 13 [6.4] [YF 39.3]

Bakgrunn for Niels Bohrs ideer:

- Balmerserien for H-atomet.

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

(Balmer 1885)

ert.

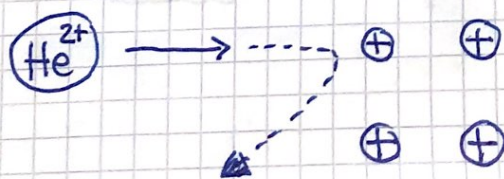
$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) ; R = \frac{4}{B} \approx 10^7 \text{ m}^{-1}$$

(Rydberg 1888)

- Rutherfords atommodell (1911).

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

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



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

Bohrs postulater:

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

Balmer serien antyder at energinivåene i H-atomet er

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

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

- Elektronet går i klassiske sirkelbaner rundt kjernen. [Stemmer ikke!] 15

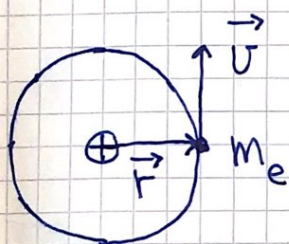
Newtons 2. lov, $F = m_e a$, med $a = v^2/r$

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

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

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

- Elektronets dreieimpuls er kvantisert. [Stemmer!]



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

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

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

[Stemmer ikke!]

Dermed:

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

dvs sirkelbanene har radius

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

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

Energiniivåene:

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

i samsvar med Balmers (og Rydbergs) formel!

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

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

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

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

Partikkelbølger [OS 6.5, 6.6; YF 39.1]

(17) ~~18~~

Louis de Broglie (1923, NP 1929): Lys er både bølger og partikler. Da bør også partikler med masse ha både partikkel- og bølgeegenskaper.

For fotoner:

$$E = h\nu = pc \quad ; \quad c = \lambda\nu \quad \Rightarrow \quad \boxed{\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{og} \quad \nu = \frac{E}{h}}$$

Gjelder også for elektroner, protoner etc.

Fra termodynamikk og kinetisk gassteori:

Ideell gass av atomer eller molekyler har midlere translasjonsenergi $\frac{3}{2}k_B T$ pr partikkel.

(Ifølge ekuipartisjonsprinsippet.)

$$\text{Dvs: } p^2/2m = \frac{3}{2}k_B T$$

Innsetting av $p = h/\lambda$ gir

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}}$$

Termisk de Broglie-
bølgelengde

Dette er "typisk" bølgelengde for gass med partikler med masse m ved temperatur T .

Eks: Gass med Na_2 -molekyler ved 770°C .

$$m = 2 \cdot 23u = 46 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \quad T = 1043 \text{ K}$$

$$\Rightarrow \lambda = 1.1 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 11 \text{ pm}$$

Etter 1923 har mange eksperimenter vist partiklers bølgeegenskaper.

- Davisson og Germer 1927: Diffraksjon med elektroner reflektert fra Ni-krystall
- C. Jönsson 1961: Interferens i dobbeltspalteforsøk med elektroner.
- Tonomura et al 1989: Interferens med ett og ett elektron gjennom dobbeltspalte.
- Zeilinger et al 2003: Interferens med ett og ett C_{60} -molekyl gjennom diffraksjonsgitter.
- Arndt et al 2015: Interferens med makromolekyler

Schrödingerligningen

[OS 7 ; YF 40]

19

Erwin Schrödinger fant en bølgligning som kunne beskrive de Broglies partikkelbølger i 1925.

Dele nobelpreisen med Paul Dirac i 1933.

Werner Heisenberg fikk nobelpreisen i 1932.

Først en kort repetisjon av klassisk bølgefysikk.

Bølgligning for mekaniske og elektromagnetiske bølger:

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

Her kan ξ være utsving på en streng, trykk eller tetthet i et fluid, elektrisk felt $\vec{E}$ eller magnetfelt $\vec{B}$ i en EM-bølge osv.

Generell løsning er på formen

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

Spesielt viktig er harmoniske bølger, med veldefinert ("skarp") bølgelengde λ og frekvens ν :

$$\xi(x,t) = A \sin(kx - \omega t) \quad \text{eller} \quad A \cos(kx - \omega t)$$

A = amplitude ; $k = 2\pi/\lambda$ = bølgetall

$\omega = 2\pi\nu = 2\pi/T$ = vinkel frekvens ; T = periode

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

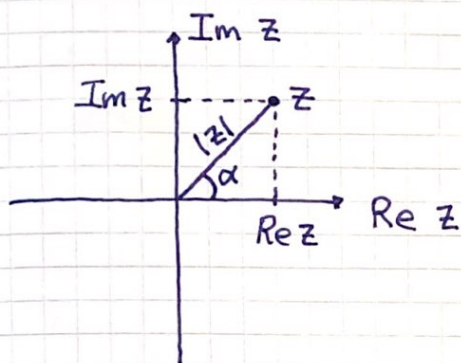
$v_g = d\omega/dk$ = gruppehastighet

Ofte hensiktsmessig med kompleks representasjon: (20)

$$\xi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

Eulers formel: $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$; $i = \sqrt{-1}$

Det komplekse plan:



$$z = \operatorname{Re} z + i \operatorname{Im} z$$

$$z = |z| e^{i\alpha}$$

$$|z| = \sqrt{(\operatorname{Re} z)^2 + (\operatorname{Im} z)^2}$$

$$\operatorname{Re} z = |z| \cdot \cos \alpha$$

$$\operatorname{Im} z = |z| \cdot \sin \alpha$$

Kompleks-konjugent av z :

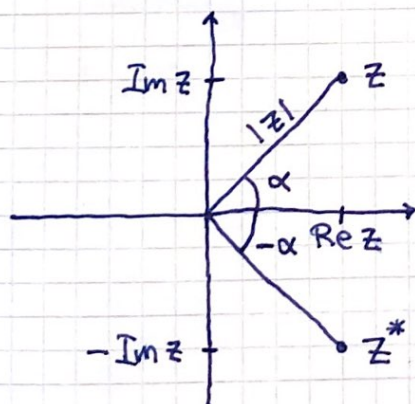
$$z^* = \operatorname{Re} z - i \operatorname{Im} z = |z| e^{-i\alpha}$$

dos $\operatorname{Re} z^* = \operatorname{Re} z$, $\operatorname{Im} z^* = -\operatorname{Im} z$

Dermed: $|z|^2 = z^* z$

$$\begin{aligned} \text{Bevis: } z^* z &= (\operatorname{Re} z - i \operatorname{Im} z) \cdot (\operatorname{Re} z + i \operatorname{Im} z) \\ &= (\operatorname{Re} z)^2 + (\operatorname{Im} z)^2 = |z|^2 \end{aligned}$$

Grafisk:



Vi ser at $\operatorname{Re} z$ og $\operatorname{Im} z$ kan oppfattes som kartesiske koordinater, mens $|z|$ og α kan oppfattes som polarkoordinater i beskrivelsen av det komplekse tallet z .

Eksempler

(21)

① Løs ligningen $z^2 + 2z + 2 = 0$

Løsning:

$$z = \frac{-2 \pm \sqrt{4-8}}{2} = -1 \pm \sqrt{-1} = \underline{\underline{-1 \pm i}}$$

② Vis at $\cos \alpha = \frac{1}{2}(e^{i\alpha} + e^{-i\alpha})$

Løsning:

Vi har $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$ og $e^{-i\alpha} = \cos \alpha - i \sin \alpha$
(siden $\cos(-\alpha) = \cos \alpha$ og $\sin(-\alpha) = -\sin \alpha$).

Addisjon av disse to ligningene gir

$$e^{i\alpha} + e^{-i\alpha} = 2 \cos \alpha, \text{ dvs } \cos \alpha = \frac{1}{2}(e^{i\alpha} + e^{-i\alpha})$$

③ Vis at $\sin \alpha = \frac{1}{2i}(e^{i\alpha} - e^{-i\alpha})$

Løsning:

Subtraksjon av de to ligningene ovenfor gir

$$e^{i\alpha} - e^{-i\alpha} = 2i \sin \alpha, \text{ dvs } \sin \alpha = \frac{1}{2i}(e^{i\alpha} - e^{-i\alpha})$$

④ Vis at $|e^{i\alpha}| = 1$ for enhver reell verdi for α

Løsning:

$$|e^{i\varphi}| = |\cos \varphi + i \sin \varphi| = \sqrt{\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi} = \sqrt{1} = 1$$

⑤ Vis at $\cos(\alpha + \beta) = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta$

Løsning:

$$\begin{aligned} \cos(\alpha + \beta) &= \operatorname{Re}\{e^{i(\alpha + \beta)}\} = \operatorname{Re}\{e^{i\alpha} \cdot e^{i\beta}\} = \\ &= \operatorname{Re}\{[\cos \alpha + i \sin \alpha] \cdot [\cos \beta + i \sin \beta]\} = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta \end{aligned}$$

⑥ Vis at $\sin(\alpha+\beta) = \cos\alpha \sin\beta + \sin\alpha \cos\beta$

22

Løsning:

$$\begin{aligned}\sin(\alpha+\beta) &= \operatorname{Im}\{e^{i\alpha} e^{i\beta}\} = \operatorname{Im}\{[\cos\alpha + i\sin\alpha] \cdot [\cos\beta + i\sin\beta]\} \\ &= \cos\alpha \sin\beta + \sin\alpha \cos\beta\end{aligned}$$

⑦ Uttrykk $\cos 3\alpha$ ved hjelp av $\cos\alpha$ og $\sin\alpha$

Løsning:

$$\begin{aligned}\cos 3\alpha &= \operatorname{Re}\{e^{3i\alpha}\} = \operatorname{Re}\{[e^{i\alpha}]^3\} = \operatorname{Re}\{[\cos\alpha + i\sin\alpha]^3\} \\ &= \operatorname{Re}\{\cos^3\alpha + 3i\cos^2\alpha \sin\alpha + 3i^2\cos\alpha \sin^2\alpha + i^3\sin^3\alpha\} \\ &= \operatorname{Re}\{\cos^3\alpha + 3i\cos^2\alpha \sin\alpha - 3\cos\alpha \sin^2\alpha - i\sin^3\alpha\} \\ &= \cos^3\alpha - 3\cos\alpha \sin^2\alpha\end{aligned}$$

⑧ Hva er $|z|$ og α for følgende komplekse tall?

(a) $1-i$ (b) $(1-i)^2$ (c) $\sqrt{i}$

Løsning:

(a) $|1-i| = \sqrt{1+1} = \sqrt{2}$; $\alpha = \arctan(-1/1) = -\frac{\pi}{4}$ ($= -45^\circ$)

(b) $|(1-i)^2| = |1-2i-1| = |-2i| = 2$; $\alpha = -\frac{\pi}{2}$

(c) $\sqrt{i} = (e^{i\pi/2})^{1/2} = e^{i\pi/4} \Rightarrow |\sqrt{i}| = 1$ og $\alpha = \frac{\pi}{4}$

⑨ Hva er $\left(\frac{2+i}{i-4}\right)^*$?

Løsning:

$$\left(\frac{2+i}{i-4}\right)^* = \frac{2-i}{-i-4} = \frac{-(i-2)}{-(i+4)} = \underline{\underline{\frac{i-2}{i+4}}}$$

Så, hva slags bølgeligning kan beskrive partikkelbølger?

(23)

Ser først på fri partikkel med masse m i konstant potensial $V=0$.

[Fri partikkel: $\vec{F}=0$, dvs $V=\text{konstant}$, f.eks. $V=0$]

Anta fart i pos. x -retning, $\vec{p}=m\vec{v}=mv\hat{x}=\text{impulsen}$.

Energien: $E=K=\frac{1}{2}mv^2=p^2/2m$

Ifølge de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar} \quad (\hbar = \frac{h}{2\pi})$$

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

Med skarp (dvs veldefinert) λ og ν er det naturlig å anta en harmonisk bølgeløsning

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

En passende bølgeligning finner vi "ved inspeksjon":

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \cdot \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) \cdot \Psi = E\Psi \quad (-i^2 = 1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2 \cdot \Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi$$

Etersom $E=p^2/2m$, er det naturlig å sette på bølgeligningen

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

for en fri partikkel med masse m i potensialet $V=0$.

(24)

Fra klassisk mekanikk: Valget av nullpunkt for potensialet V er uten fysisk betydning.

$\Rightarrow$ Fri partikkel i potensialet $V = V_0 = \text{konstant}$ må kunne beskrives med samme planbølge

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

Vi deriverer igjen mhp t og x for å finne en passende bølgeligning:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi = (K+V)\Psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V_0\right)\Psi$$

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

Dermed naturlig å satse på bølgeligningen

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

Hvis $\vec{F} \neq 0$ er $V(x)$ [evt. $V(\vec{r})$] ikke konstant, og $\vec{p}$ er ikke lenger konstant; $d\vec{p}/dt = \vec{F} \neq 0$.

Schrödinger satset likevel på samme bølgeligning,

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

som er Schrödingers ligningen, i en romlig dimensjon.

[Generalisering til 3D:

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

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

]

Tolkning av bølgefunksjonen [OS 7.1; YF 40.1] (25)

Hvis Ψ er en reell funksjon, blir venstre side i SL imaginær og høyre side reell. (Og omvendt hvis Ψ er rent imaginær.)

Dermed: Ψ må være en kompleks funksjon hvis den skal være løsning av SL.

Målbare fysiske størrelser er reelle.

Derfor kan Ψ ikke være direkte målbare.

Max Born (1926, NP1954):

$\Delta P = |\Psi(x, t)|^2 \Delta x$ = sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x + \Delta x$ ved tid t .

Dvs: $|\Psi(x, t)|^2 = \Delta P / \Delta x$ = sanns. pr lengdeenhet

Normering av sannsynlighet:

Et eller annet sted må partikkelen være, slik at

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

Borns tolkning kan begrunnes ved å sammenligne fotoner og elektroner sendt gjennom et diffraksjonsgitter. Med mange spalter N gir begge eksperimenter interferens, med høy intensitet i retninger bestemt av $d \sin \theta = n\lambda$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ d = spalteavstand, θ = avbøyningsvinkel).

(26)

Fotoner : $I \sim |\vec{E}|^2 = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \dots + \vec{E}_N|^2$

Elektroner : $I \sim |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2 + \dots + \Psi_N|^2$

$\Rightarrow$ Vi kan tolke $|\vec{E}|^2$ og $|\Psi|^2$ som uttrykk for sannsynligheten for hvor hvor et gitt foton og et gitt elektron vil treffe detektoren.

Bølgepakker og uskarphet [OS 7.2; YF 40.1]

Planbølge for partikkel med helt skarp impuls p er ikke normerbar:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |e^{i(px - Et)/\hbar}|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 dx = \infty$$

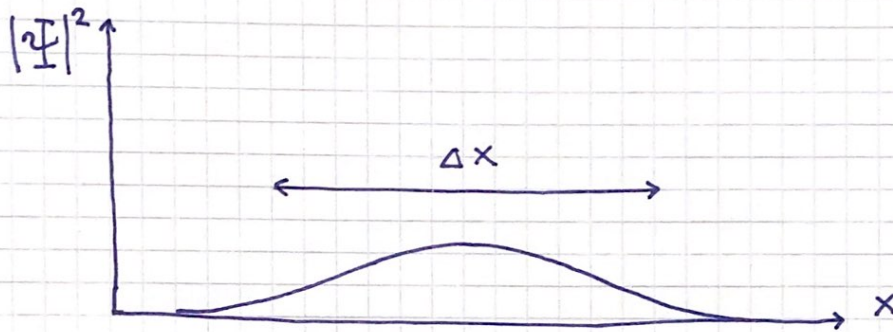
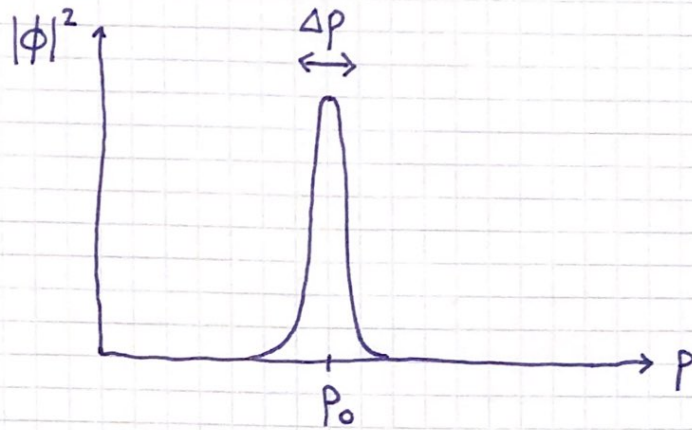
For å lokalisere partikkelen må vi lage en bølgepakke,

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

dvs en sum av plane bølger med ulike impulser, der $|\phi(p)|^2 dp$ angir sannsynligheten for at en måling av partikkelens impuls gir en verdi mellom p og $p + dp$.

(27)

Smal impulsfordeling $|\phi(p)|^2$ gir bred
romlig fordeling $|\Psi(x,t)|^2$, og omvendt:



Heisenbergs uskarphetsrelasjon:

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

Operatorer, egenfunksjoner og egenverdier

(28)

[os 7.1]

$$\begin{array}{c} \text{Operator} \nearrow \hat{A} f(x) = A f(x) \nwarrow \text{Egenfunksjon} \\ \text{Egenverdi, uavhengig av } x \nwarrow \end{array}$$

Eks: $\frac{\partial}{\partial x} \sin kx = k \cos kx$; da er $\sin kx$ ikke en egenfunksjon til operatoren $\frac{\partial}{\partial x}$

Impulsoperator:

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

Dvs: Planbølgen $e^{i(px-Et)/\hbar}$, som beskriver en fri partikkel med impuls p , er egenf. til oper. $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, med egenv. p . Da er det rimelig å kalle dette en impulsoperator,

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

Operator for kinetisk energi:

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

Dvs: Samme planbølge er egenf. til oper. $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, med egenv. $p^2/2m = K$. Da er det rimelig å si at dette er oper. for kinetisk energi,

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

(29)

Operator for total energi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right) e^{i(px-Et)/\hbar} = \left(\frac{p^2}{2m} + V_0\right) e^{i(px-Et)/\hbar}$$

Dus: $\hat{K} + V_0$ er oper. for total energi $E = K + V_0$ for fri partikkel i konstant potensial V_0 .

Hvis $V(x)$ ikke er konstant, er planbølgen ikke lenger en egenf. til oper. $\hat{K} + V(x)$; da vil andre funksjoner være egenfunksjoner.

Tradisjonelt kalles oper. for total energi Hamilton-operatoren, $\hat{H} = \hat{K} + V(x)$. Dermed kan Schrödingerligningen skrives slik:

$$i\hbar \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{SL}$$

$$1D: \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$$3D: \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

(30)

Stasjonære tilstander og tidsuavhengig Schrödingerligning (TUSL) [OS 7.3; YF 40.1]

Ofta (og alltid i FY6019) er potensialet uavhengig av tida t , dvs $V = V(x)$. Da er $\hat{H}$ også uavhengig av t , og produktløsninger

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

er løsninger av SL. Innsetting i SL gir:

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

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

Divisjon med $\Psi = \psi \cdot T$ på begge sider gir:

$$i\hbar \frac{\partial T / \partial t}{T} = \frac{\hat{H} \psi}{\psi}$$

Her er venstre side kun avh. av t og høyre side kun avh. av x ; da må begge sider være lik en og samme konstant, som vi "f.eks." kan kalle E . Da kan vi løse ligningen for $T(t)$, en gang for alle:

$$i\hbar \frac{dT/dt}{T} = E \Rightarrow \frac{dT}{T} = \frac{E}{i\hbar} dt$$

$$\Rightarrow \ln T = -iEt/\hbar \quad (+ \text{konstant})$$

$$\Rightarrow \boxed{T(t) = \exp(-iEt/\hbar)}$$

(Notasjon: $\exp(i\alpha)$ er det samme som $e^{i\alpha}$)

Ligningen for $\Psi(x)$:

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

Her er $\hat{H}$ operator for partikkelens totale energi. Dermed tolker vi E som mulige ("tillatte") energieigenverdier for partikkelen, når den befinner seg i potensialet $V(x)$, og $\Psi(x)$ er de tilhørende energieigenfunksjonene (evt. energieigenstandene).

De fullstendige løsningene av SL,

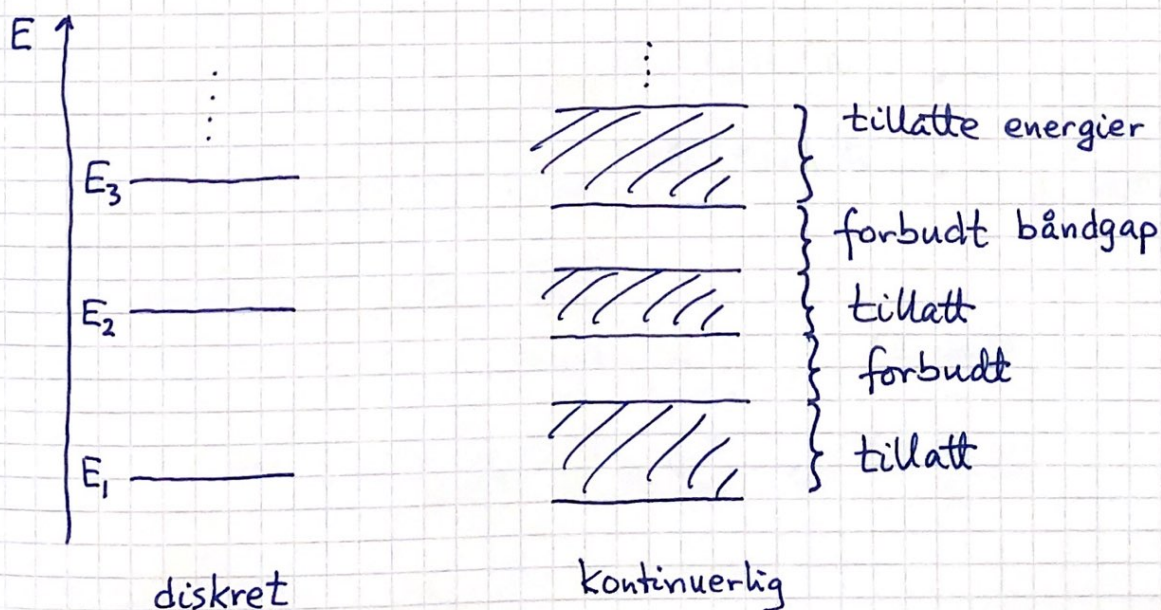
$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

kalles naturlig nok stasjonære tilstander, fordi sannsynlighetstettheten

$$|\Psi|^2 = |\Psi|^2$$

er uavhengig av tiden t . (Husk: $|e^{i\alpha}| = 1$.)

TUSL har diskrete (adskilte) egenverdier og/eller (ett eller flere) kontinuerlige energibånd:



(32)

SL og TUSL er lineære ligninger. Da er den generelle løsningen av SL en vilkårlig sum (lineærkombinasjon) av stasjonære tilstander:

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

[Pluss eventuelt et integral over kontinuerlige energibånd, men la oss ikke komplisere for mye...!]

Hvis to eller flere tilstander med ulike verdier av E bidrar til $\Psi(x,t)$, blir $|\Psi|^2$ avhengig av t , og da er Ψ ikke lenger en stasjonær tilstand.

$$\text{Eks: } \Psi(x,t) = c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\Psi|^2 &= \Psi^* \Psi \\ &= \{c_1^* \psi_1^* e^{iE_1 t/\hbar} + c_2^* \psi_2^* e^{iE_2 t/\hbar}\} \cdot \\ &\quad \{c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}\} \\ &= |c_1|^2 |\psi_1|^2 + |c_2|^2 |\psi_2|^2 \\ &\quad + c_1^* \psi_1^* c_2 \psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \leftarrow f(x,t) \\ &\quad + c_1 \psi_1 c_2^* \psi_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \leftarrow f^*(x,t) \end{aligned}$$

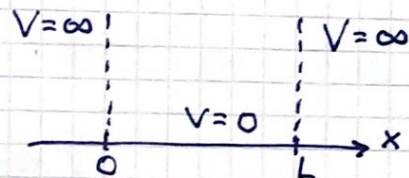
$$\begin{aligned} f(x,t) + f^*(x,t) &= 2 \operatorname{Re} f(x,t) \\ &= 2 \operatorname{Re} \{c_1^* \psi_1^* c_2 \psi_2\} \cdot \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar} \\ &\quad - 2 \operatorname{Im} \{c_1^* \psi_1^* c_2 \psi_2\} \cdot \sin \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar} \end{aligned}$$

Partikkel i 1D boks [OS 7.4; YF 40.2]

(33)

Anta at en partikkel, masse m , befinner seg i potensialet

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



Klassisk: $E = K = \frac{1}{2}mv^2$, med alle $E \geq 0$ tillatt.
Hastighet $v = \pm \sqrt{2E/m}$; partikkelen seiler fram og tilbake mellom to harde vegger.

Kvantemekanisk: SL har stasjonære løsninger

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

der $\psi(x)$ og E er hhv egenfunkt. og egenverdier til operatoren

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

dus

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

Utenfor boksen: $V = \infty \Rightarrow |\psi|^2 = 0$; dus null sannsynlighet for at partikkelen er der $V = \infty$.

Inni boksen: $V = 0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad ; \quad E = K \geq 0$$

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

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

(34)

Vi krever at sanns.fordelingen $|\psi|^2$ og
bølgefunksjonen ψ er kontinuerlige funksjoner :

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

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

Dermed er også energien kvantisert :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L^2}$$

Normering av sannsynlighet: $\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$

$$\begin{aligned} \sin^2(k_n x) &= \left\{ \frac{1}{2i} (e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}) \right\}^2 \\ &= -\frac{1}{4} (e^{2ik_n x} + e^{-2ik_n x} - 2) \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2k_n x \end{aligned}$$

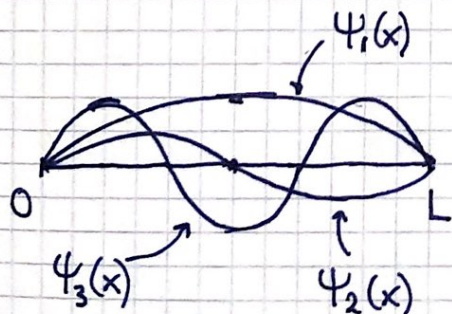
Dermed, med $\psi_n(x) = A_n \sin k_n x$:

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

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

Normerte egenfunksjoner er da, med $k_n = n\pi/L$:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$



$$E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$$

$$E_2 = 4E_1$$

$$E_3 = 9E_1$$

$$\vdots$$

$$E_n = n^2 E_1$$

Merknader:

(35)

- Symmetri:

Symmetrisk $V(x)$ gir symmetrisk $|\Psi_n(x)|^2$, dvs enten symm. eller antisymm. $\Psi_n(x)$.

Her: $\Psi_n(x)$ symm./antisymm. for odde/like n .

- Nullpunkter:

Antall nullpunkter øker med energien, fra $n=0$ i grunntilstanden (=tilst. med lavest energi) og oppover, for bundne tilstander i en dimensjon.

- Grensebetingelser:

$\Psi(x)$ er kontinuerlig overalt; det gir kontinuerlig sannsynlighetstetthet $|\Psi(x)|^2$.

$\Psi' = d\Psi/dx$ er også kontinuerlig overalt, unntatt der $V(x)$ gjør et uendelig sprang. Da ~~en~~ har $\Psi(x)$ et knekkpunkt, Ψ' er diskontinuerlig, og Ψ'' går mot uendelig, i tråd med TUSL,

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

Her: Knekkpunkter i $x=0$ og $x=L$.

- Krumningsegenskaper:

$E > V \Rightarrow \Psi''/\Psi < 0 \Rightarrow$ krumning mot x -aksen

$E < V \Rightarrow \Psi''/\Psi > 0 \Rightarrow$ — " — bort fra x -aksen

Kvantemekanikk tillater at partikkelen befinner seg i et klassisk forbudt område, med $E < V$.

(Dog ikke hvis $V \rightarrow \infty$.)

• Ortogonalitet:

(36)

$\vec{V}_1$ og $\vec{V}_2$ er ortogonale hvis $\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_2 = 0$.

$\vec{V}_1$ og $\vec{V}_2$ er normerte hvis $\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_1 = \vec{V}_2 \cdot \vec{V}_2 = 1$.

Kronecker-delta:

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

$\Rightarrow \vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij}$ for ortonormert vektorsett
 $\{\vec{V}_i\} = \{\vec{V}_1, \vec{V}_2, \vec{V}_3, \dots\}$

Tilsvarende er funksjonssettet $\{\psi_n(x)\}$; $n=1,2,3,\dots$ ortonormert dersom

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

Løsninger $\psi_n(x)$ av TUSL er generelt ortogonale.

Eks: Partikkel i boks, $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$

$$\sin \alpha \cdot \sin \beta = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$$

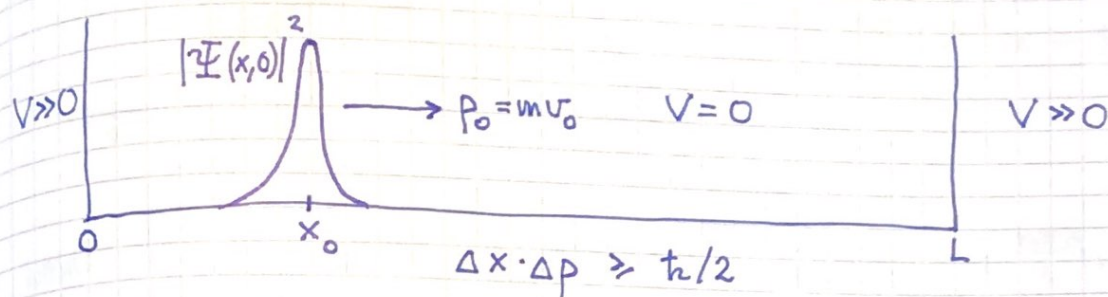
$$\Rightarrow \int_0^L \psi_n^*(x) \psi_k(x) dx = \frac{1}{L} \int_0^L \left[\cos \frac{(n-k)\pi x}{L} - \cos \frac{(n+k)\pi x}{L} \right] dx$$

$$= 0 \text{ hvis } n \neq k \quad \text{og} \quad 1 \text{ hvis } n = k.$$

Ikke-stasjonære løsninger av SL:

(37)

Starttilstand $\Psi(x,0)$ og tidsutviklingen $\Psi(x,t)$



$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

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

$$\begin{aligned} 1 &= \int \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx \\ &= \sum_n \sum_j c_n^* c_j e^{i(E_n - E_j)t/\hbar} \cdot \overbrace{\int \psi_n^*(x) \psi_j(x) dx}^{= \delta_{nj}} \\ &= \sum_n |c_n|^2 = \sum_n P_n \end{aligned}$$

$P_n = |c_n|^2$ = sanns. for å måle at partikkelen har energi E_n

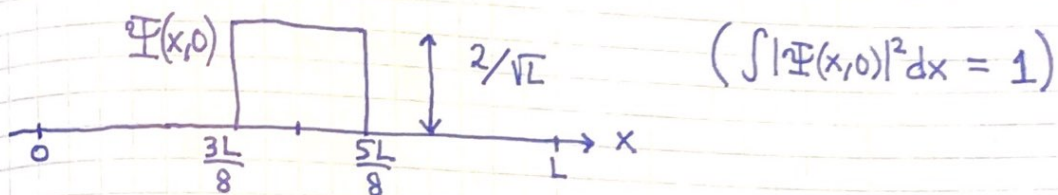
Beregning av c_n når $\Psi(x,0)$ er gitt/kjent:

$$\int \psi_n^* \Psi(x,0) dx = \sum_j c_j \int \psi_n^* \psi_j dx = \sum_j c_j \delta_{nj} = c_n$$

$$\text{dvs } c_n = \int \psi_n^*(x) \Psi(x,0) dx$$

Eks: Hva er P_1 og P_2 når $\Psi(x,0)$ er som i fig. for partikkel i boks?

(38)



$$\begin{aligned} \text{Løsning: } c_n &= \int \Psi_n^*(x) \Psi(x,0) dx = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \frac{2}{\sqrt{L}} \cdot \int_{3L/8}^{5L/8} \sin \frac{n\pi x}{L} dx \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{L} \cdot \frac{L}{n\pi} \left\{ \cos \frac{3n\pi}{8} - \cos \frac{5n\pi}{8} \right\} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow P_1 = |c_1|^2 = 0.475 ; \quad P_2 = 0$$

Siden $\Psi(x,0)$ her er symmetrisk på $(\frac{3L}{8}, \frac{5L}{8})$ mens $\Psi_2(x), \Psi_4(x), \dots$ er antisymmetriske, må $c_2 = c_4 = \dots = 0$.

Postulatene

Empirisk grunnlag i klassisk mek.: Newtons lover

—————"—————" kvantemek.: Følgende postulat

A. Operatorpostulat

Målbare størrelser i klassisk mek. representeres i QM av lineære operatorer som konstrueres ved at impulskoordinater p_j erstattes av operatorer

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

der q_j = tilhørende posisjonskoordinat

Eks: Kinetisk energi

(39)

Klassisk: $K = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m (p/m)^2 = \frac{p^2}{2m}$

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

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

$$\hat{p}^2 = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)^2$$

$$= \cancel{\hbar^2} - \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$\Rightarrow \hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

B. Tilstandspostulat

Bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ beskriver partikkelens tilstand fullstendig og er bestemt av

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

med

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

C. Forventningsverdipostulat

(40)

Mange målinger av en størrelse F på systemer som alle er preparert i samme tilstand Ψ vil gi en middelværdi

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx \quad (1D)$$

når Ψ er normert, $\int |\Psi|^2 dx = 1$.

Vi kaller $\langle F \rangle$ forventningsverdien av F .

Eks: Partikkel i boks i stasjonær tilstand

$$\Psi_n(x,t) = \Psi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar)$$

$$\langle x \rangle = \int_0^L \Psi_n^*(x,t) x \Psi_n(x,t) dx = \frac{L}{2} \quad (\text{pga symmetri})$$

$$\langle p \rangle = \int_0^L \Psi_n^*(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n(x,t) dx = 0 \quad (\text{pga symmetri})$$

$$\left[\langle x \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \dots = \frac{L}{2} \right.$$

$$\left. \langle p \rangle \sim \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx = 0 \right]$$

D. Målepostulat

(41)

De mulige måleresultatene ved måling av F er egenverdiene f_j gitt ved

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

der Ψ_j er egenfunksjoner til $\hat{F}$. Hvis F måles, med resultat f_j , havner partikkelen i egentilstanden Ψ_j . Dvs, målingen påvirker partikkelen!

Eks: Anta at en partikkel er preparert i starttilstanden

$$\Psi(x,0) = c_1 \Psi_1(x) + c_2 \Psi_2(x) \quad \text{ved tid } t=0.$$

Måling av partikkelens energi E vil da gi E_1 eller E_2 , med sanns. hhv. $|c_1|^2$ og $|c_2|^2$.

Anta at vi måler $E = E_2$ ved tid $t_1 > 0$.

Da beskrives part. av

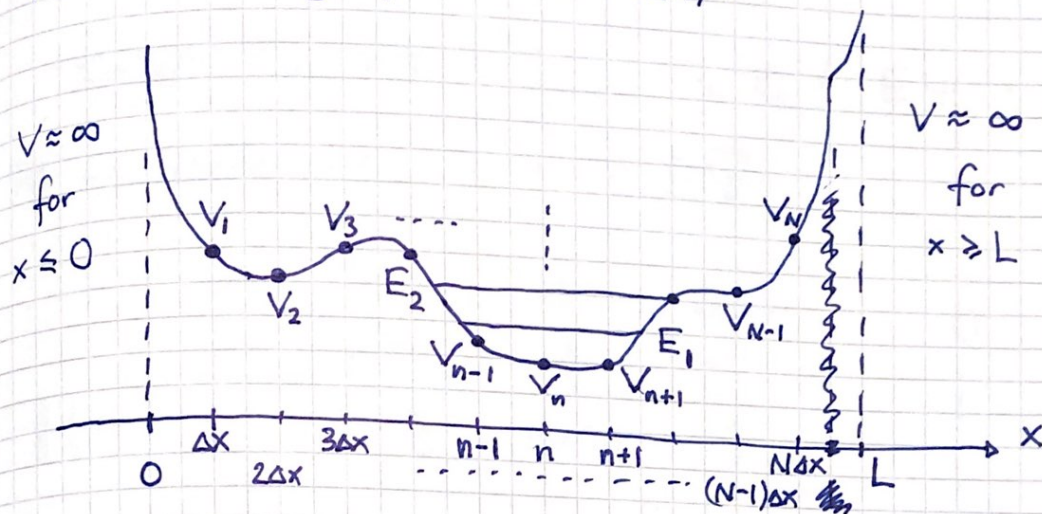
$$\Psi_2(x,t) = \Psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

fra og med $t = t_1$, og en ny energimåling vil med sikkerhet gi resultatet $E = E_2$.

Numerisk løsning av TUSL

(42)

Anta "vilkårlig" potensial $V(x)$:



For tilstander med $E_j \ll V(0)$ og $V(L)$ kan vi med god tilnærming sette $\psi_j(x) = 0$ og $V(x) = \infty$ utenfor intervallet $(0, L)$.

Diskretisering:

$$\Delta x = \frac{L}{N+1}; \quad x_n = n \cdot \Delta x; \quad V_n = V(x_n); \quad \psi_n = \psi(x_n)$$

$$\text{Grensebetingelser: } V_0 = V_{N+1} = \infty; \quad \psi_0 = \psi_{N+1} = 0$$

Diskretisering av $d^2\psi/dx^2$:

$$\psi_n'' = \psi''(x_n) \approx \frac{\psi'(x_n + \frac{1}{2}\Delta x) - \psi'(x_n - \frac{1}{2}\Delta x)}{\Delta x}$$

$$\psi'(x_n + \frac{1}{2}\Delta x) \approx \frac{\psi(x_n + \Delta x) - \psi(x_n)}{\Delta x} = \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta x}$$

$$\psi'(x_n - \frac{1}{2}\Delta x) \approx \frac{\psi(x_n) - \psi(x_n - \Delta x)}{\Delta x} = \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta x}$$

$$\Rightarrow \psi_n'' \approx \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta x)^2}$$

TUSL: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$ (43)

Erstattes nå av N differanseligninger:

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

På matriseform: $\mathbf{H}\vec{\Psi} = E\vec{\Psi}$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon + V_1 & -\frac{\varepsilon}{2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{\varepsilon}{2} & \varepsilon + V_2 & -\frac{\varepsilon}{2} & 0 & & \\ 0 & -\frac{\varepsilon}{2} & \varepsilon + V_3 & -\frac{\varepsilon}{2} & & \\ \vdots & & & & & \\ & & & -\frac{\varepsilon}{2} & \varepsilon + V_{N-1} & -\frac{\varepsilon}{2} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -\frac{\varepsilon}{2} & \varepsilon + V_N \end{bmatrix}$$

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix}$$

Tridiagonal, reell og
symmetrisk Hamilton-
matrise $\mathbf{H}$

Har ikke-trivielle egenvektorer, dvs $\vec{\Psi} \neq 0$, når

$$\det \{\mathbf{H} - E\mathbf{I}\} = 0$$

Enhetsmatrisen:

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}$$

Determinanten er et N.gradspolynom i E som gir 44

- N distinkte energiegenverdier $E_1, E_2, \dots, E_N$
- N tilhørende egenvektorer $\vec{\psi}^{(1)}, \vec{\psi}^{(2)}, \dots, \vec{\psi}^{(N)}$

En effektiv funksjon i "biblioteket" `scipy.linalg` er `eigh_tridiagonal`. Gjøres tilgjengelig i ditt python-program med kommandoen

```
from scipy.linalg import eig_h_tridiagonal
```

Egenverdiene er sortert:

$$E_1 < E_2 < \dots < E_N$$

Egenvektorene er reelle og ortonormerte:

$$\sum_{n=1}^N \psi_n^{(j)} \psi_n^{(k)} = \delta_{jk}$$

Pass på notasjonen: $\psi_n^{(j)} = \psi^{(j)}(x_n)$

Starttilstand som sum av de N stasjonære løsn.:

$$\Psi(x_k, t=0) = \Psi_k(0) = \sum_{j=1}^N c^{(j)} \psi_k^{(j)} ; k=1, 2, \dots, N$$

$$c^{(j)} = \sum_{k=1}^N \psi_k^{(j)} \cdot \Psi_k(0) ; j=1, 2, \dots, N$$

Tidsutviklingen:

$$\Psi_k(t) = \sum_{j=1}^N c^{(j)} \psi_k^{(j)} e^{-iE_j t/\hbar} ; k=1, 2, \dots, N$$

Eksempler

(45)

box.py: $V(x) = 0$ for $0 < x < L$; $V = \infty$ ellers
 $L = (N+1)\Delta x$

$$m = m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

Gir med god tilnærming $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$
som vi fant analytisk, og $\psi_n(x) \sim \sin(n\pi x/L)$

kvantebroenn.py: $V(x) = V_0 = 0$ på hver side av en
"broenn" med $V(x) = V_1 = -1 \text{ eV}$, med broenbredde
 $2 \cdot N/2 \cdot dx = 4.0 \text{ nm}$ (med $N=100$ og $dx=0.02 \text{ nm}$).

$\psi(x)$ i grunntilstanden ca som for partikkel i boks, men
exp. "hale" erna i det klassiske forbudte området.

Stykkervis konstante potensialer i en dimensjon
er forholdsvis enkle å regne på, fordi løsninger
av TUSL,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi,$$

er på formen

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

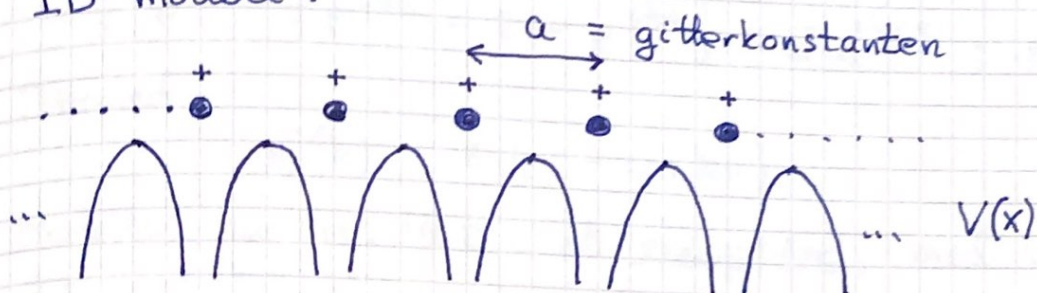
$$\psi(x) = a e^{iqx} + b e^{-iqx}; \quad E > V_0; \quad q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Slike potensialer er ikke kun av akademisk interesse.
De kan lages i faste stoffer (krystaller),
typisk ved å kombinere ulike halvledere.

Elektroner i faste stoffer

(46)

1D modell:



Perfekt krystall $\Rightarrow$ Periodisk potensial for elektronene:

$$V(x + j \cdot a) = V(x) ; \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Da må også $|\Psi|^2$ være periodisk,

$$|\Psi(x + j \cdot a)|^2 = |\Psi(x)|^2$$

med Ψ på formen

$$\Psi(x) = e^{ikx} \cdot u(x) ; \quad u(x + j \cdot a) = u(x)$$

**Blochs
teorem**

Dvs: Elektronene beskrives "nesten" av plane bølger. Vi har "nesten" frie elektroner!

Aller enkleste modell: Et elektron befinner seg på/nær et eller annet atom, i posisjon $x_n = n \cdot a$.

Da kan vi bruke vår diskretiserte TUSL fra s. 43, med $\Delta x = a$ og $V(x_n) = V_n = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} \{ \Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1} \} = E\Psi_n$$

Med $\Psi_n = \Psi(x_n)$ definert kun i $x_n = n \cdot a$ er den periodiske u_n også definert kun i $x_n = n \cdot a$. Da kan vi sette $u_n = 1$ og står igjen med $\Psi_n = e^{ikx_n} = e^{ikna}$.

Innsetning av Ψ_{n+1} , Ψ_n og Ψ_{n-1} i TUSL gir:

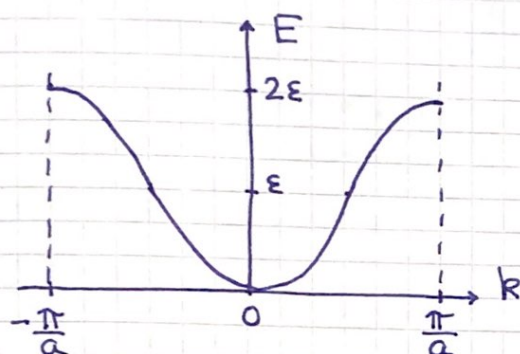
(47)

$$-\frac{\varepsilon}{2} e^{ikna} \{ e^{ika} - 2 + e^{-ika} \} = E e^{ikna} ; \quad \varepsilon = \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

Dermed:

$$E(k) = \varepsilon (1 - \cos ka)$$

Modellen har resultert i et energibånd, med båndbredde $2\varepsilon = 2\hbar^2/ma^2$:



Hvis elektronets bølgelengde er stor, $\lambda \gg a$, opplever det essensielt et konstant potensial, og da har vi et fritt elektron med $E = K = p^2/2m$.

Det ser bra ut: $\lambda \gg a$ betyr $k \cdot a \ll 1$ (da $k = 2\pi/\lambda$)

Når $|x| \ll 1$ er $\cos x \approx 1 - x^2/2$, slik at

$$E(k) \approx \varepsilon (1 - 1 + \frac{1}{2} k^2 a^2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m},$$

for partikkel med impuls $p = \hbar k$ ($= h/\lambda$).

Reelle krystaller er tredimensjonale, og gjerne med flere atomer pr enhetscelle, krystallens minste repeterende enhet. Resultatet blir flere energibånd, med tillatte tilstander for elektronene, adskilt av båndgap, energintervaller uten tillatte tilstander. (Som skissert på s. 31.)

(48)

Med N enhetsceller i krystallen får vi N romlige bølgefunksjoner $\Psi(\vec{r})$ i hvert energibånd. Pga at elektronet har spinn, som beskrives av 2 uavhengige spinn-bølgefunksjoner, χ_+ for spinn "opp" og χ_- for spinn "ned", blir elektronets totale bølgefunksjon

$$\phi(\vec{r}, m_s) = \Psi(\vec{r}) \cdot \chi_{m_s} \quad ; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

romlig del; orbital spinn del

Dermed: 2 tilstander ϕ pr orbital Ψ

Dermed: 2N tilstander pr energibånd

Paulis eksklusjonsprinsipp ("Pauliprinsippet") :

Maksimalt ett elektron i en gitt (enpartikkel-) tilstand

Grunntilstanden (i atomer, molekyler, krystaller):

Elektronene okkuperer tilstander, i samsvar med Pauliprinsippet, slik at systemets totale energi blir lavest mulig.

Ulike energibånd kan overlappe, eller ikke.

Anta her at energibåndene ikke overlapper.

Dermed, for krystallens grunntilstand:

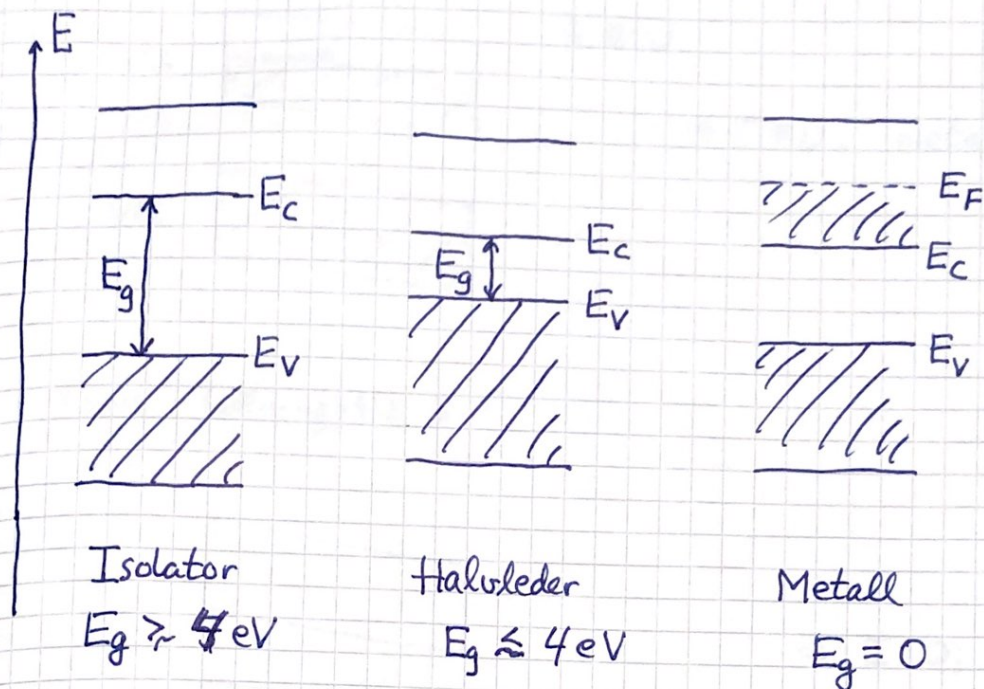
Partall elektroner pr enhetscelle $\Rightarrow$ Bare fylte og tomme energibånd.

Oddetall ————— " ————— $\Rightarrow$ Fylte, ett halvfyllt, resten tomme.

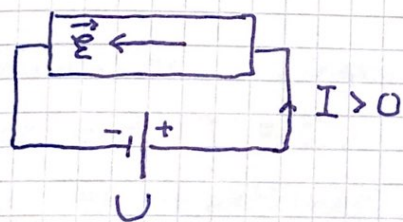
Terminologi:

Valensbåndet: Det fyldte båndet som har højest energi.

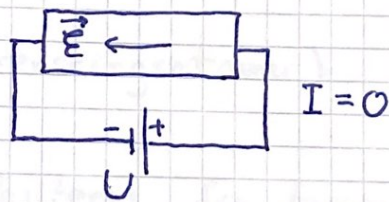
Ledningsbåndet: Neste bånd; tomt eller halvfylt.



Empirisk:



Metall



Ikke-metall / Isolator

Påtrykt spenning U gir elektrisk felt $\vec{E}$ i materialet. Må ha ledige tilstander umiddelbart over okkuperte tilstander for at $\vec{E}$ skal kunne gi elektroner økt fart og dermed strøm I .
Dvs, må ha delvis fylt bånd for å få $I \neq 0$.

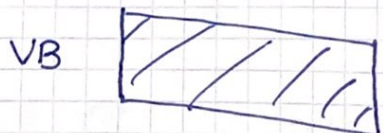
Skjematisk:

Delvis fylt ledningsbånd:

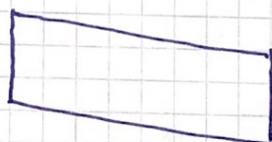


$\updownarrow e \cdot U$

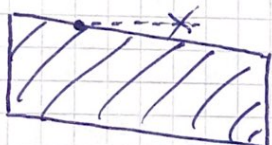
$\Rightarrow I \neq 0$; metall



Tomt ledningsbånd:



$\Rightarrow I = 0$; isolator



Forbudt!

Ren halvleder (ingen forurensningsatomer):

Isolator ved $T = 0$.

$T > 0 \Rightarrow$ elektroner kan eksiteres fra toppen av VB til bunnen av CB. Ledige tilstander (o)

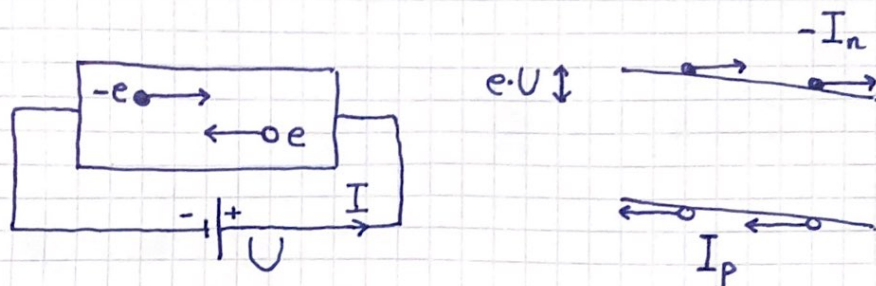
E_c —●●●●●

E_v —○●●●●

kalles hull. Disse oppfører seg som partikler med positiv ladning $+e$.

Både elektroner i CB (●) og hull i VB (○) bidrar til elektrisk strøm.

Spennning U gir partikkelstrøm av elektroner og hull i motsatt retning:



Total elektrisk strøm: $I = I_n + I_p$

Konsentrasjon av elektroner og hull i en ren halvleder ved temperatur T :

$$n(T) = n_0 \exp(-E_g/2k_B T) ; \quad p(T) = n(T)$$

$n_0 \sim 10^{26}$ pr m^3 i "typisk" halvleder

Silicium (Si): $E_g = 1.12 \text{ eV} \Rightarrow n(300\text{K}) \approx 10^{16}$ pr m^3

Germanium (Ge): $E_g = 0.67 \text{ eV} \Rightarrow n(300\text{K}) \approx 10^{20}$ —"—"

Diamant (C): $E_g = 5.47 \text{ eV} \Rightarrow n(300\text{K}) = 0$

Doping av halvledere:

En liten andel av Si (evt. Ge) erstattes av atomer fra en nabogruppe i det periodiske system.

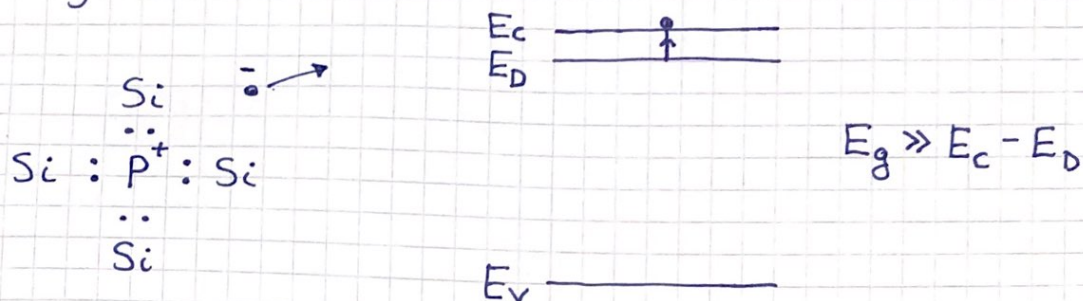
Si, Ge: Gruppe 14, 4 valenselektroner

B, Al, Ga...: Gruppe 13, 3 valensel.

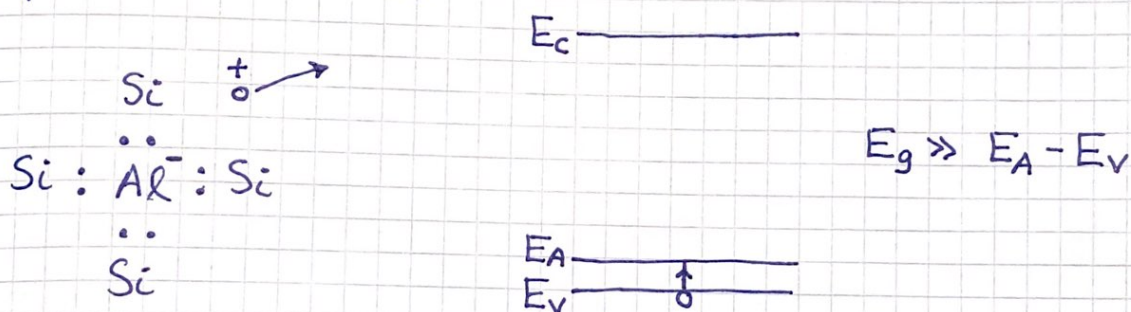
N, P, As...: Gruppe 15, 5 —"—"

n-type Si: Dopet med f.eks P (fosfor). (52)

4 av 5 valensel. inngår i bindinger med 4 Si-naboer; det 5. frigjøres lett fra P-atomet og doneres til ledningsbåndet i Si.



p-type Si: Dopet med f.eks Al (aluminium).
 Alle 3 valensel. + 1 elektron fra valensbåndet i Si inngår i bindinger med 4 Si-naboer; et fritt hull skapes i valensbåndet.



$$E_c - E_D \sim k_B T \quad \text{og} \quad E_A - E_v \sim k_B T \quad \text{ved romtemp.}$$

$$\Rightarrow n \approx N_D \quad \text{i n-type halvledere} \quad (n \gg p \quad \text{i n-type})$$

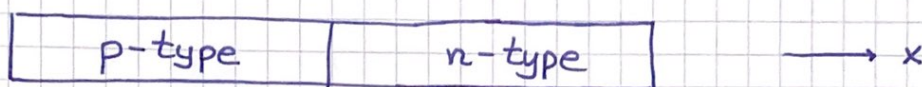
$$p \approx N_A \quad \text{i p-type} \quad \text{---} \text{---} \quad (p \gg n \quad \text{i p-type})$$

N_D = kons. av donoratomer

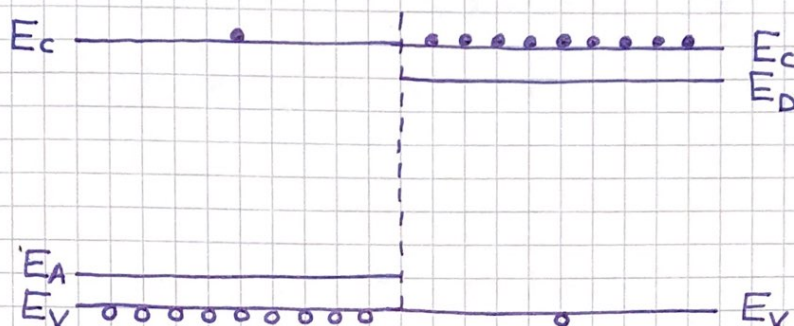
N_A = --- akseptoratomer

pn-overgangen: dioden [os 9.7; YF 42.7]

(53)



Energibånd før likevekt er etablert:

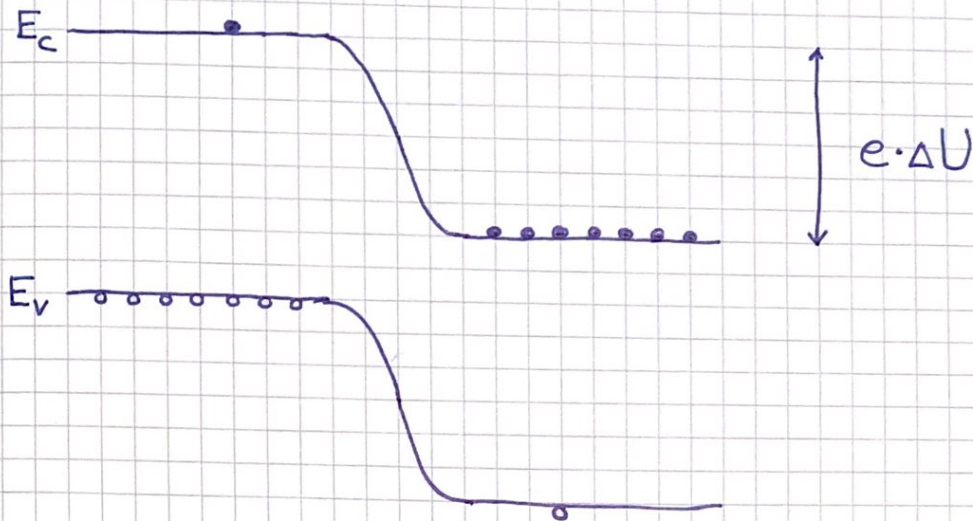


- Konsentrasjonsforskjellene medfører diffusjon av elektroner fra n- mot p-siden og hull motsatt vei.
- Gir negativt ladet p-side og positivt ladet n-side. Får dermed et innebygd elektrisk felt $\vec{E}$ med retning fra n- mot p-siden, og en innebygd potensialforskjell $\Delta U = -\int \vec{E} \cdot d\vec{x}$, med høyest potensial på n-siden og dermed høyest potensiell energi for elektroner på p-siden.
- Kraften $\vec{F} = q\vec{E}$ gir en drift av elektroner fra p- mot n-siden og hull motsatt vei.
- Likevekt er etablert når netto strøm er null, dvs

$$I(\text{diffusjon}) + I(\text{drift}) = 0$$

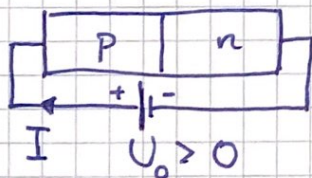
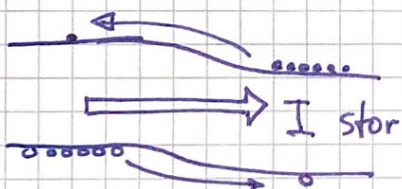
Energibånd når likevekt er etablert:

(54)

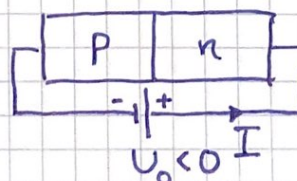
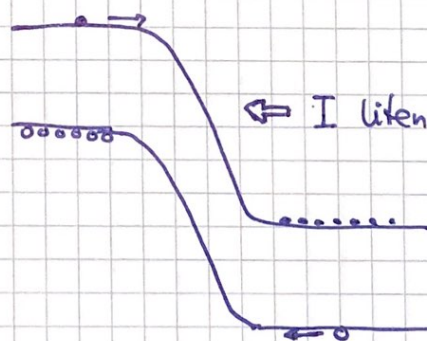


En påtrykt spenning U_0 vil nå enten redusere energibarrieren fra $e \cdot \Delta U$ til $e \cdot (\Delta U - U_0)$ og resultere i en stor strøm, av mange elektroner og hull mot hver venstre og høyre; eller øke energibarrieren til $e \cdot (\Delta U + |U_0|)$ og gi en liten strøm, av få elektroner og hull mot hver høyre og venstre.

Positiv forspenning:



Negativ forspenning:



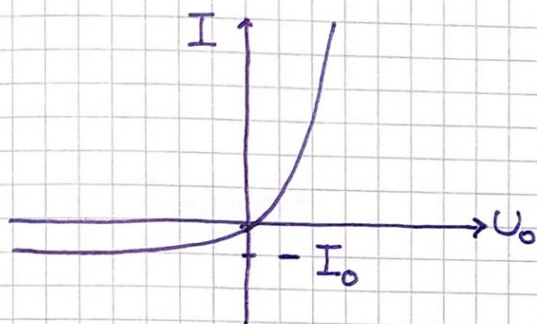
Strømmen I øker proporsjonalt med Boltzmannfaktoren

55

$$\exp\{e \cdot U_0 / k_B T\} \quad (\text{for } U_0 > 0)$$

som sammen med at $I=0$ for $U_0=0$ gir $I(U_0)$ på formen

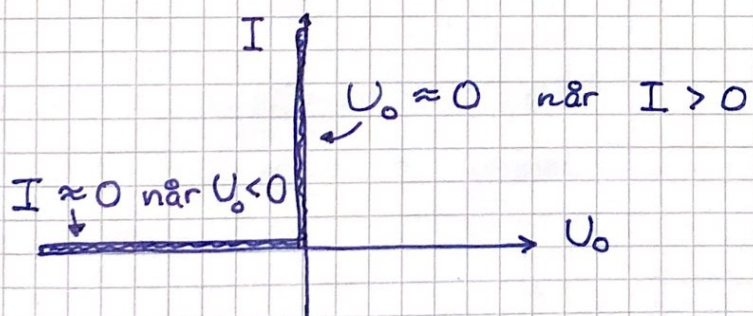
$$I(U_0) = I_0 \{ \exp(e U_0 / k_B T) - 1 \}$$



Likeretter: Leder godt fra p til n, dårlig fra n til p.

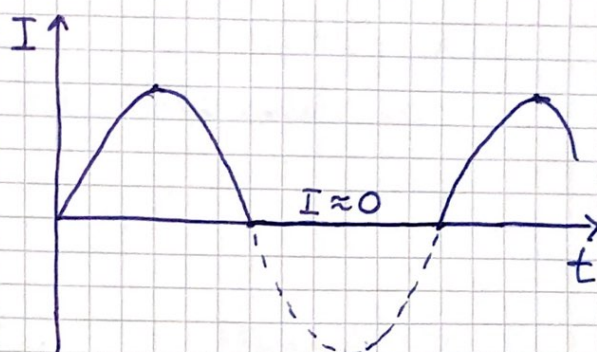
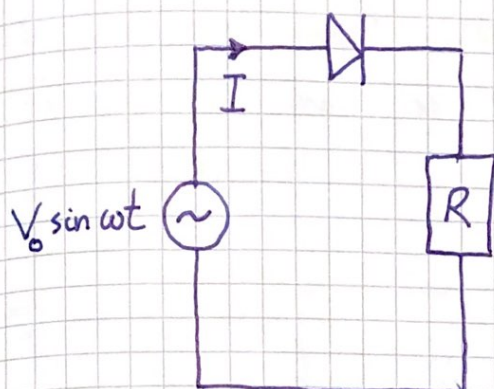
Kretssymbol: 

Idealisert strøm-spennings-karakteristikk:

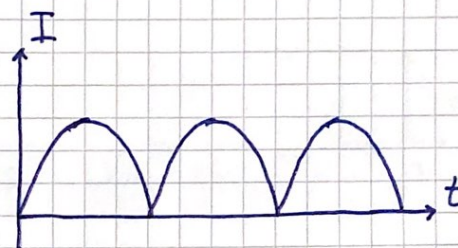
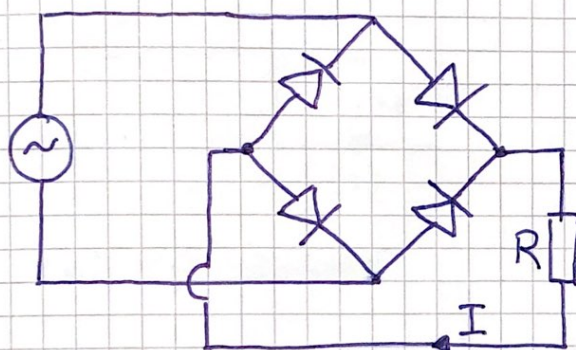


Halvbølge likeretter:

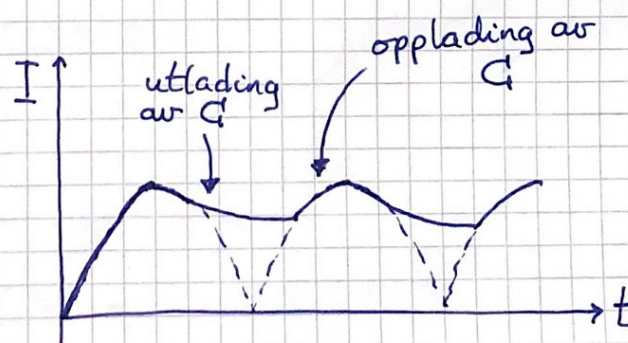
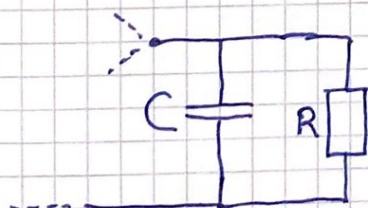
(56)



Helbølge likeretter:



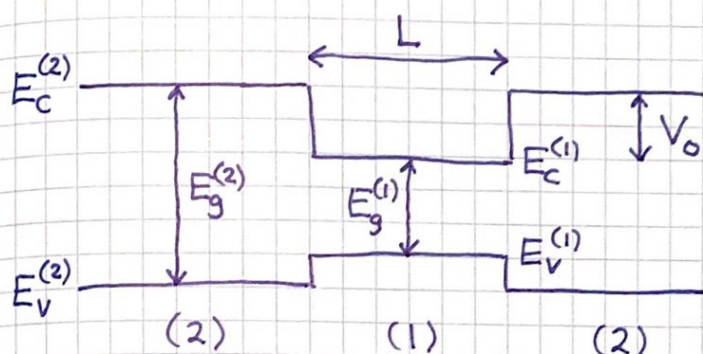
Med en kondensator koblet
i parallell med R jernes
 $I(t)$ ut:



Mer om diode og transistor i FY6018.

Lagdelte halvledere: Heterostrukturer

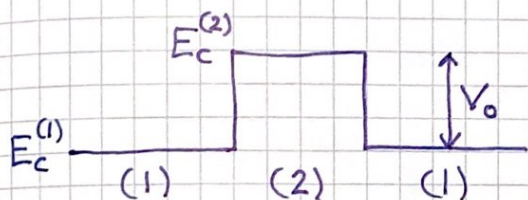
Halvledere med ulike båndgap $E_g = E_c - E_v$ kan skjotes sammen og danne potensialbrønner og -barrierer:



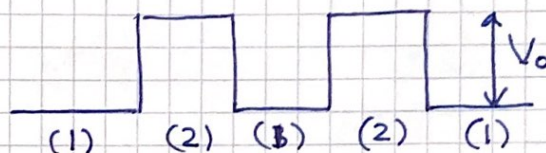
Potensialbrønn
med dybde

$$V_0 = E_c^{(2)} - E_c^{(1)}$$

og bredde L .



Potensialbarriere



Dobbelbarriere

Eks: (1) GaAs $E_g^{(1)} = 1.43 \text{ eV}$

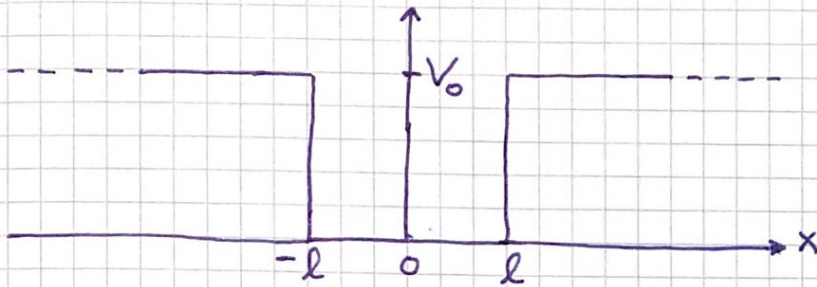
(2) $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ $E_g^{(2)} = 1.84 \text{ eV}$

Gir $V_0 = 0.23 \text{ eV}$

Endelig potensialbrønn

[YF 40.3]

(58)



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

TUSL:

$$\Psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \Psi(x) = \begin{cases} -k^2 \Psi(x) & ; |x| < l ; k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \\ \kappa^2 \Psi(x) & ; |x| > l ; \kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \end{cases}$$

Mest interessant med bundne tilstander, med $E < V_0$:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} & (x < -l) \\ C \sin kx \text{ (AS) eller } D \cos kx \text{ (S)} & (-l < x < l) \\ B e^{-\kappa x} & (x > l) \end{cases}$$

Med symmetrisk $V(x)$ er $\Psi(x)$ enten symm. (S) eller antisymm. (AS); derfor enten $\sin kx$ (AS) eller $\cos kx$ (S) inne i brønnen.

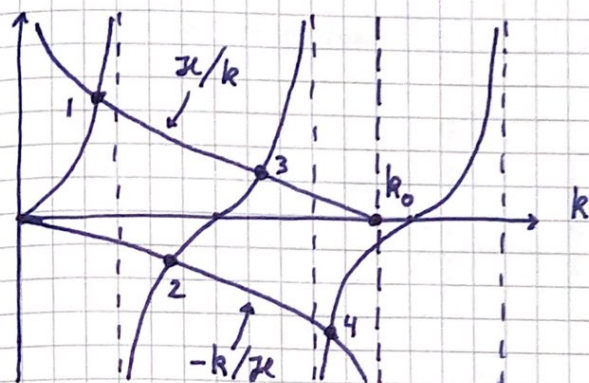
Bruger nå at Ψ og $d\Psi/dx$ er kontinuerlige overalt, for å bestemme de tillatte energiene E .

$$\begin{aligned} \text{S, } x=l: \quad B e^{-\kappa l} &= D \cos kl \\ -\kappa B e^{-\kappa l} &= -k D \sin kl \\ \Rightarrow \tan kl &= \kappa/k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{AS, } x=l: \quad B e^{-\kappa l} &= C \sin kl \\ -\kappa B e^{-\kappa l} &= k C \cos kl \\ \Rightarrow \tan kl &= -k/\kappa \end{aligned}$$

Grafisk bestemmelse av Løsningene:

(59)



$$k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$k < k_0$$

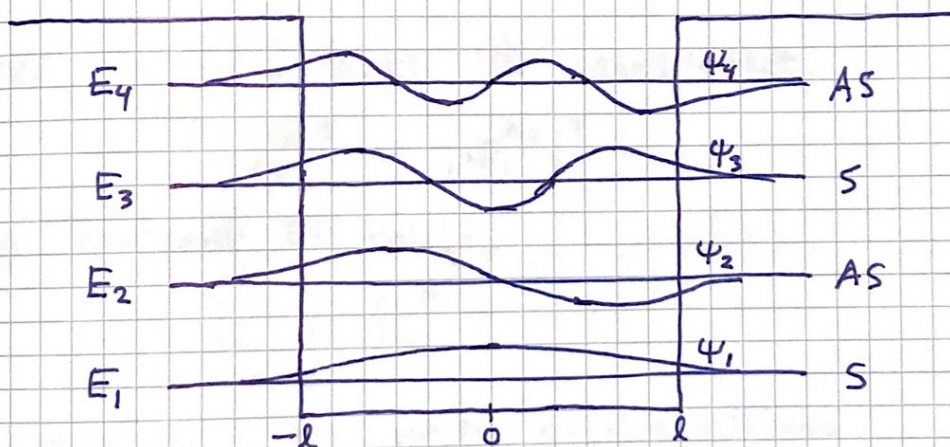
$$x = \sqrt{k_0^2 - k^2}$$

Flere bundne tilstander jo dypere og bredere brønn.

Med $E > V_0$ har vi ubundne tilstander. For $|x| > l$ er da

$$\Psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx ; K = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$$

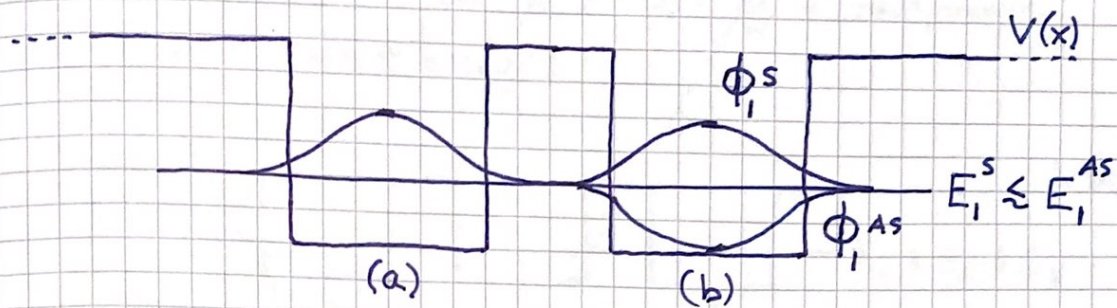
og alle $E > V_0$ er mulig.



$|\Psi|^2 > 0$ også i det klassisk forbudte området $|x| > l$. Siden $\Psi(x) \sim \exp(-\kappa|x|)$ blir κ^{-1} et mål for hvor langt bølgefunksjonen strekker seg inn i det klassisk forbudte området.

Flere potensialbrønner

Med 2 like brønner adskilt av en barriere:



Bølgefunksjoner for dobbeltbrønnen kan lages med utgangspunkt i de to enkeltbrønnene:

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^{(a)} \pm \psi_1^{(b)})$$

Gir $\phi_1^S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^{(a)} + \psi_1^{(b)})$; symm. ; ingen nullpkt.

og $\phi_1^{AS} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^{(a)} - \psi_1^{(b)})$; antisymm. ; 1 nullpkt.

med (praktisk talt) lik sanns.tetthet,

$$|\phi_1^S|^2 \approx |\phi_1^{AS}|^2$$

og omtrent lik energi,

$$E_1^S \lesssim E_1^{AS}$$

Tilsvarende for neste bundne tilstand:

$$\phi_2^S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_2^{(a)} + \psi_2^{(b)})$$

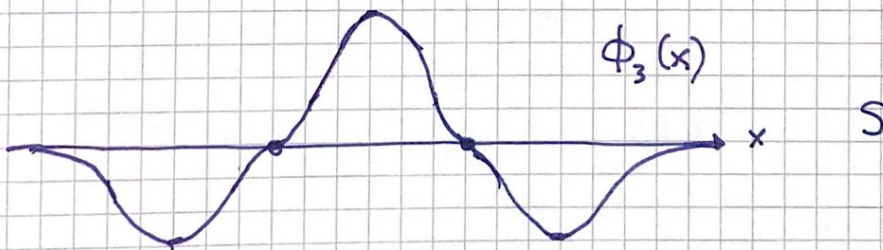
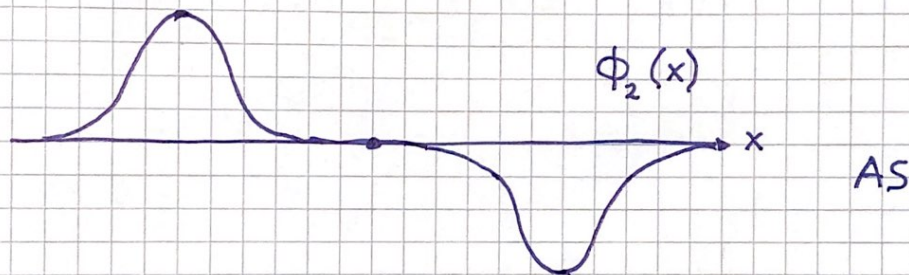
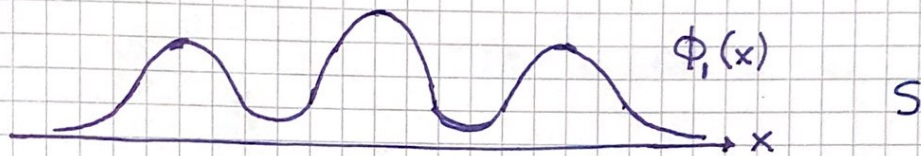
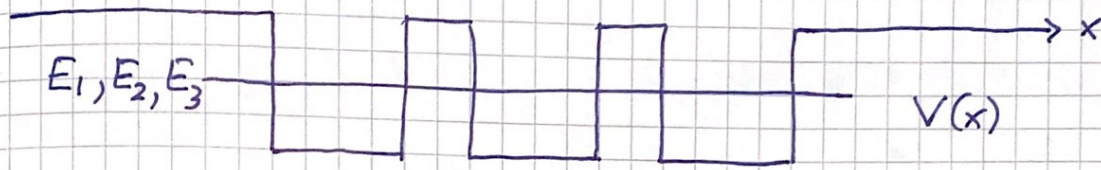
$$\phi_2^{AS} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_2^{(a)} - \psi_2^{(b)})$$

med $E_2^S \lesssim E_2^{AS}$.

Omr, hvis det er flere bundne tilst. pr brønn.

Med flere brønner, N , og slik at $V(x)$ er symmetrisk, (61')
 får vi N tilstander med omtrent lik energi for
 hver bundne tilstand i en enkelt brønn. Bølgefunksjonene
 blir vekselvis symmetriske og antisymmetriske, med økende
 antall nullpunkter.

Med $N = 3$:

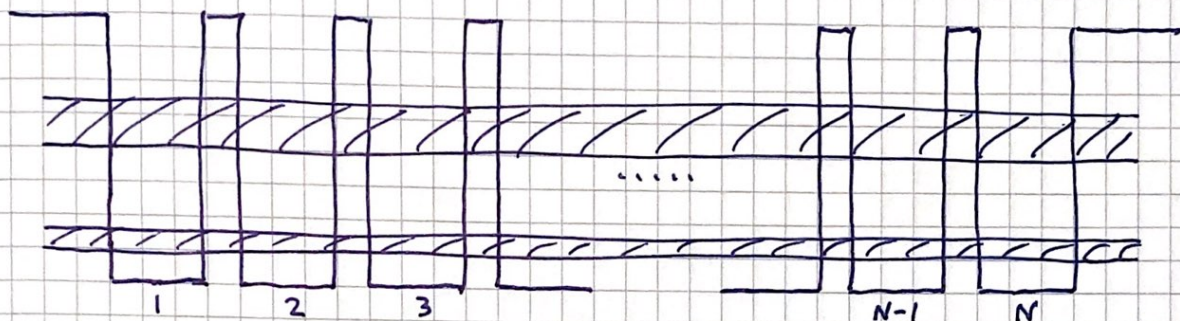


$$E_1 \lesssim E_2 \lesssim E_3$$

(Se multiplewells.py)

Med $N \gg 1$ brønner får vi tilnærmet et
kontinuerlig energibånd med N energiverdier
omkring energien til den bundne tilstanden i
en enkelt brønn:

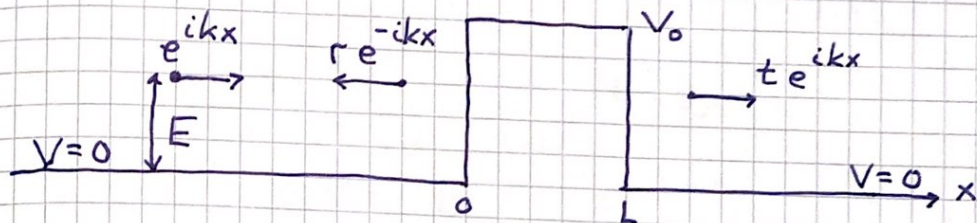
(62)



Som ventet: Dette er jo en 1D modell av en
krystall.

Tunneleffekt

(63)



Antar partikkel med skarp impuls $p = \hbar k$ inn fra venstre, energi $E = K = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$:

$$\psi_i(x) = e^{ikx} \quad (x < 0)$$

To mulige utfall:

Refleksjon, med sanns. R . Transmisjon med sanns. $T = 1 - R$, slik at $R + T = 1$.

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

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

Bølgefunksjon i barriereområdet $0 < x < L$:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} & ; E < V_0 ; \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \\ a e^{iqx} + b e^{-iqx} & ; E > V_0 ; q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \end{cases}$$

Krav om kontinuerlig ψ og $d\psi/dx$ i $x=0$ og $x=L$ gir 4 ligninger som fastlegger A, B, r, t for $E < V_0$ og a, b, r, t for $E > V_0$.

Deretter vil prinsippet om beværing av sannsynlighet vise at $R = |r|^2$ og $T = |t|^2$.

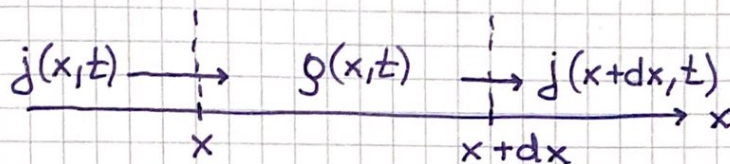
(64)

Sannsynlighetsstrøm og bevaring av sannsynlighet

Fra før: $g(x,t) = \frac{dP}{dx} = |\Psi(x,t)|^2$

= sanns. pr lengdeenhet

Hvis g forandres et sted, skyldes dette en netto strøm j av sanns., inn eller ut:



$$\underbrace{j(x,t) - j(x+dx,t)}_{\text{netto sanns. strøm inn på } dx} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \{g(x,t) dx\}}_{\text{sanns. endring pr tidsenhet på } dx}$$

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

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0} \quad \text{Kontinuitetslign. for sannsynlighet.}$$

Nå kan et generelt uttrykk for j utledes ved å skrive om

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \{\Psi^* \Psi\} \quad \text{til} \quad - \frac{\partial}{\partial x} \{\text{uttrykk}\}. \quad \text{Dette gjøres}$$

i praksis ved å bruke SL, i.e. $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$.

Vi identifiserer dermed "uttrykk" som j .

Resultat:

$$j = \text{Re} \left\{ \Psi^* \frac{\hat{p}}{m} \Psi \right\} \quad ; \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Pga bevaring av sannsynlighet må vi ha:

(65)

$$j_i = |j_r| + |j_t| \quad (j_r < 0)$$

Vi regner ut:

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

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

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

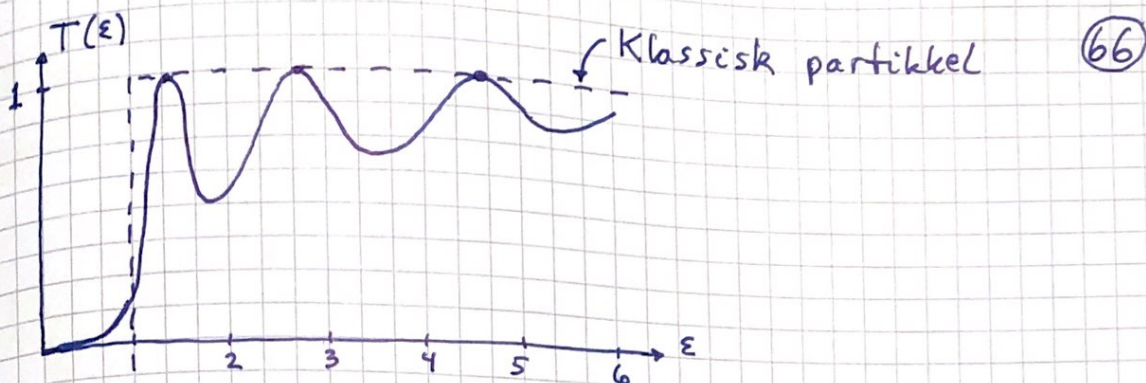
Dvs, $|r|^2$ og $|t|^2$ er hhv andel reflektert og andel transmittert sannsynlighet, slik at

$$R = |r|^2, \quad T = |t|^2, \quad R + T = 1$$

For firkantbarrieren med bredde L og høyde V_0 :

Vi definerer $\epsilon = E/V_0$ og $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$.

$$T = \begin{cases} \left[1 + \frac{\sinh(k_0 L \sqrt{1-\epsilon})}{4\epsilon(1-\epsilon)} \right]^{-1} & \text{for } \epsilon < 1 \\ \left[1 + \frac{\sin^2(k_0 L \sqrt{\epsilon-1})}{4\epsilon(\epsilon-1)} \right]^{-1} & \text{for } \epsilon > 1 \end{cases}$$

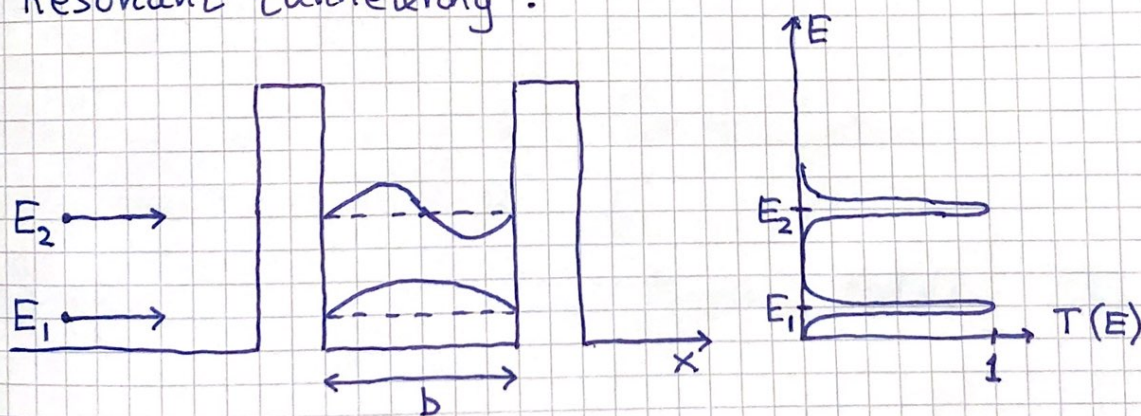


- Tunneleffekt: $T > 0$ for $E < V_0$ ($\epsilon < 1$). Dessuten $R > 0$ for $E > V_0$.
- $T = 1$ når $\sin(k_0 L \sqrt{E-1}) = 0$, dvs $k_0 L \sqrt{E-1} = n\pi$ og dermed

$$E - V_0 = K = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

som er energinivåene for partikkel i boks;
dvs stående bølger med $\lambda_n = 2L/n$ ($n=1,2,3,\dots$)

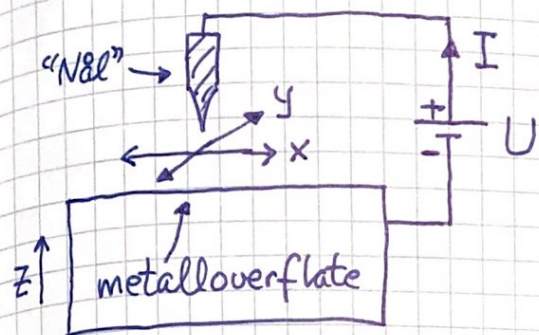
- Resonant tunnelering:



Resonans og stående bølger mellom de to barrierene gir $T=1$ når

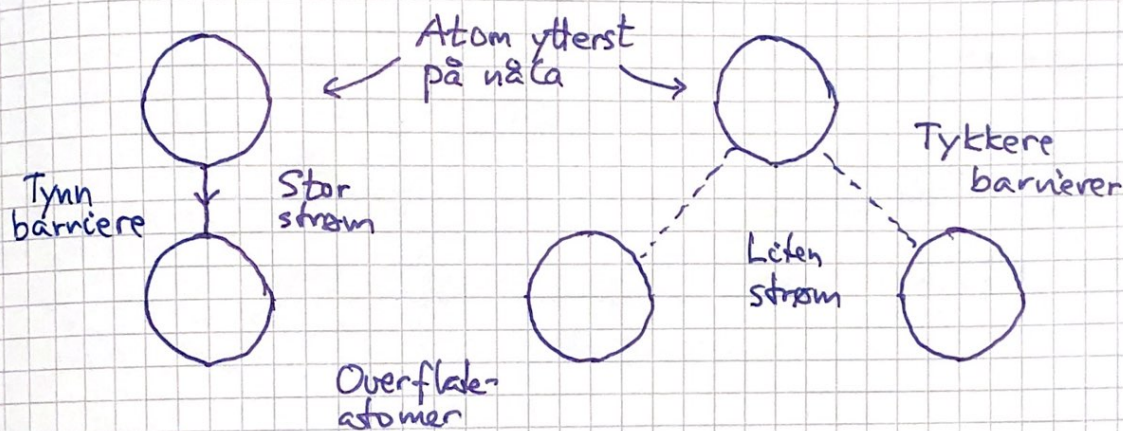
$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m b^2} ; \lambda_n = \frac{2b}{n} ; n=1,2,\dots$$

STM : Scanning Tunneling Microscopy



Nåla scanner metalloverflaten og strømmen $I(x,y)$ måles. Elektronene må tunnelere mellom nåla og overflaten.

På atomær skala:



$I(x,y)$ gir avbildning av overflaten med atomær oppløsning.

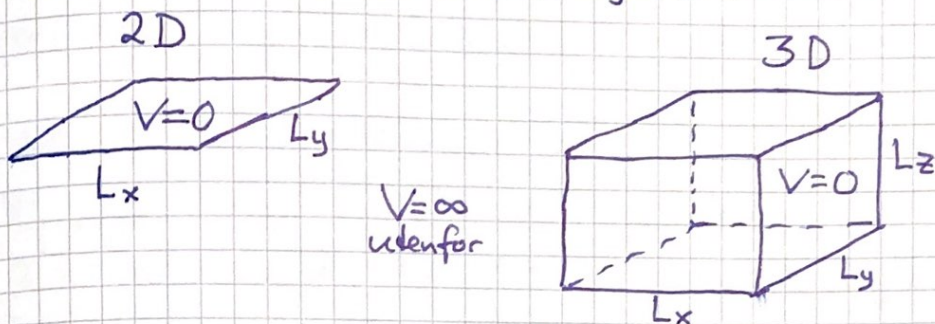
Binnig og Rohrer, IBM Zürich, Nobelpriis 1986

Se youtube:

"A boy and his atom"

"Moving atoms: Making the world's smallest movie"

Partikkel i boks i 2D og 3D



TUSL separerer i hhv 2 og 3 uavh. ligninger, og løsningene er på produktform. Med $\psi=0$ på de 4 kantene evt. 6 grenseflatene:

$$\psi_{n_x n_y}(x, y) = \sqrt{\frac{2^2}{L_x L_y}} \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \quad (2D)$$

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

$$E_{n_x n_y n_z} = (\pi^2 \hbar^2 / 2m) (n_x^2 / L_x^2 + n_y^2 / L_y^2 + n_z^2 / L_z^2) \quad (3D)$$

med $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, 4, \dots$

Degenerasjon: Med kvadratisk evt kubisk boks, $L_x = L_y (= L_z) = L$, blir det mulig med flere bølgefunksjoner som tilsvarende samme energi. Degenerasjonsgraden g = antall ulike tilstander som alle gir en gitt energi.

Eks: Kubisk boks, $L_x = L_y = L_z$

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

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

$$E_{123} = E_{132} = E_{213} = E_{231} = E_{312} = E_{321} = 14\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2 ; g = 6$$

Eks 1: Hva er total energi for 10 ikke-vekselvirkende ⁽⁶⁹⁾elektroner i grunntilstanden i en boks med sidekanter 3nm ?

Løsn 1: Pga spindegenerasjon $g_s=2$ for hver orbital $\psi_{n_x n_y n_z}$ har 2 av elektronene energi $3\pi^2\hbar^2/2mL^2$, 2·3 har energi $6\pi^2\hbar^2/2mL^2$, og de 2 gjenværende har energi $9\pi^2\hbar^2/2mL^2$.

$$E_{\text{tot}} = (6+36+18)\pi^2\hbar^2/2mL^2 = 30\pi^2\hbar^2/mL^2 = \underline{\underline{2.49\text{eV}}}$$

Eks 2: Omtrent hvor tett ligger energinivåene for elektroner i en boks med $L = 1\text{mm}$?

Løsn 2: ΔE er av størrelsesorden $\pi^2\hbar^2/2mL^2$, som med $L=10^{-3}\text{m}$ blir $3.7\cdot 10^{-13}\text{eV}$.

Med andre ord, praktisk talt et kontinuerlig spektrum.

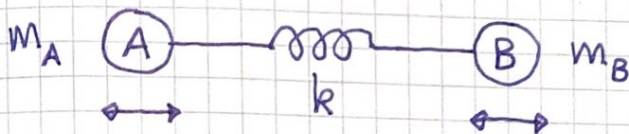
Molekylers vibrasjonsbevegelse

[OS 7.5, 9.2]

[YF 40.5, 42.2]

(70)

Enklest med toatomig molekyl:



Tilnærmet harmonisk oscillator med potensial

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

Her er

x = avviket fra molekylets bindingslengde

m = molekylets reduserte masse, bestemt ved

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$

Det er atomenes relative bevegelse som beskrives av x , og Newtons 2. lov anvendt på A og B resulterer i ligningen $-kx = m d^2x/dt^2$ med $m = (m_A^{-1} + m_B^{-1})^{-1}$.

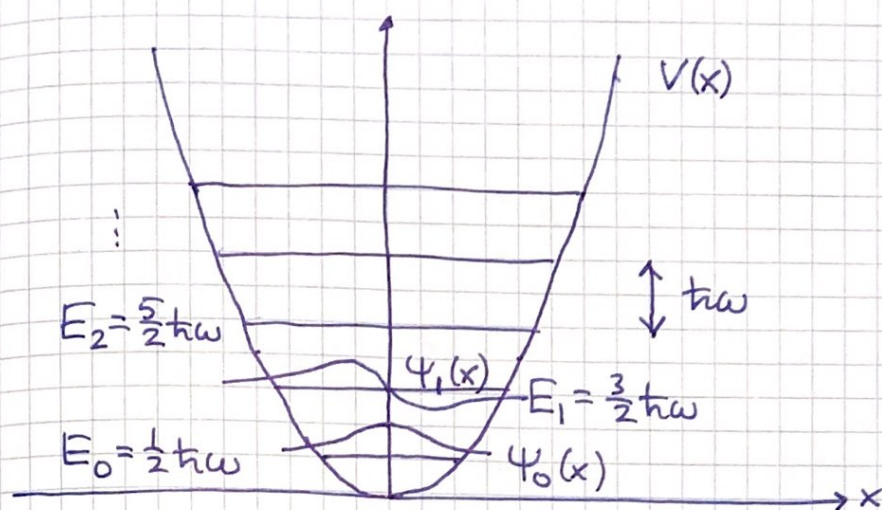
Klassisk er oscillatorens energi avhengig av utsvingssamplituden (maksverdi for x), som kan være hva som helst.

Kvantemekanisk må vi løse TUSL,

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

som gir kvantiserte energiverdier

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



Vibrasjonsfrihetsgrader og normale moder:

Et molekyl med N atomer har $3N$ frihetsgrader tilgjengelig for de ulike typer bevegelse.

Translasjon: 3 (U_x, U_y, U_z)

Rotasjon: 3 (rotasjon om 3 uavh. akser)

eller 2 (lineære molekyler; rotasjon om de 2 aksene som står normalt på molekyls akse)

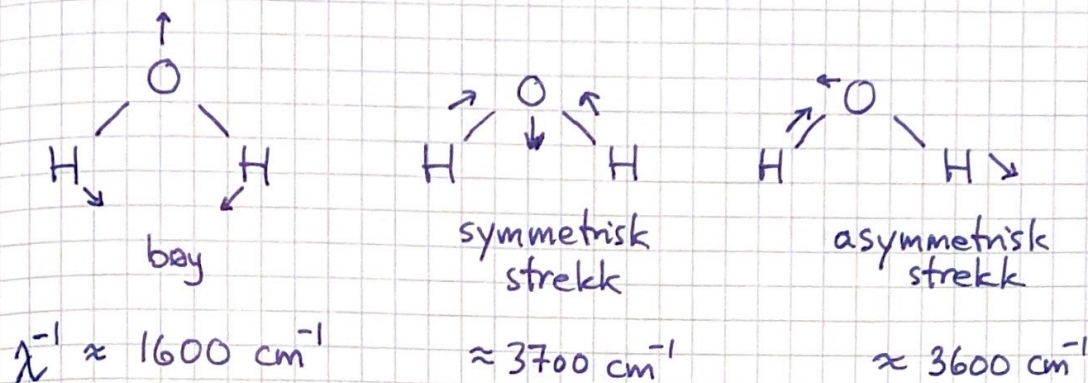
$\Rightarrow$ Vibrasjon: $3N - 6$, evt $3N - 5$ for lineære molekyler

Med $N=2$ atomer: 1 vibrasjonsfrihetsgrad, strekk/kompresjon langs molekyls akse.

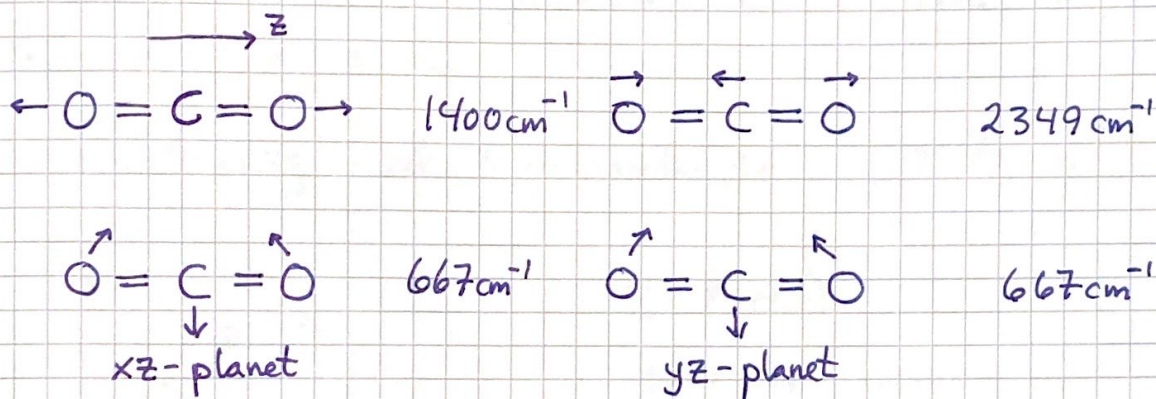
Med $N \geq 3$ atomer kan molekyls atomer vibrere i $3N - 6$ (evt $3N - 5$) såkalte normale moder, der vibrasjonsbevegelsene på sett og vis er ortogonale.

Eks: H_2O , $N=3$, $3N-6=3$ normale moder

(72)

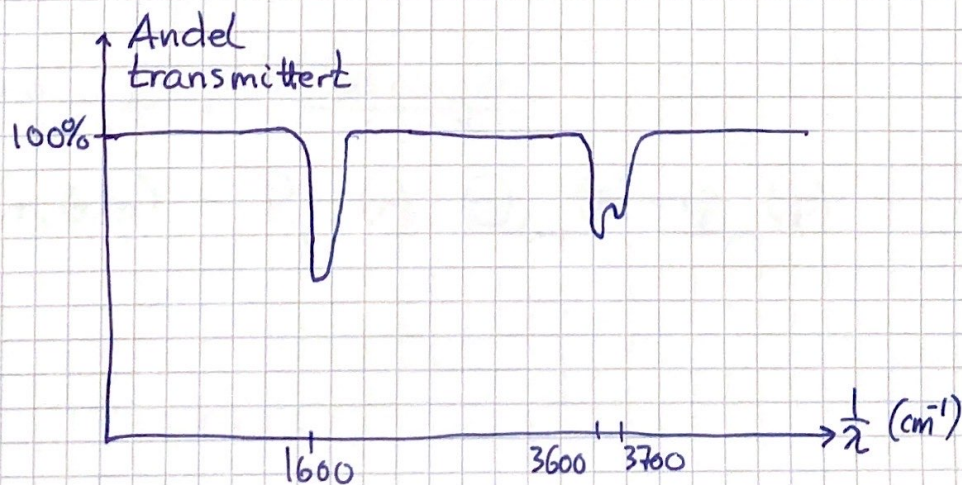


CO_2 , $3N-5=4$ normale moder



Vibrasjonsspektroskopi: Send fotoner gjennom gass av molekyler. Hvis fotonets energi $h\nu$ er lik $\Delta E_{\text{vib}} = \hbar\omega$, ~~vil~~ vil gassen i stor grad absorbere strålingsenergien.

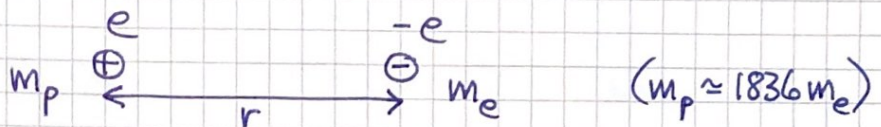
Eks, H_2O :



Coulombpotensialet [OS 8.1; YF 41.3]

(73)

H-atomet:



$$(m_p \approx 1836 m_e)$$

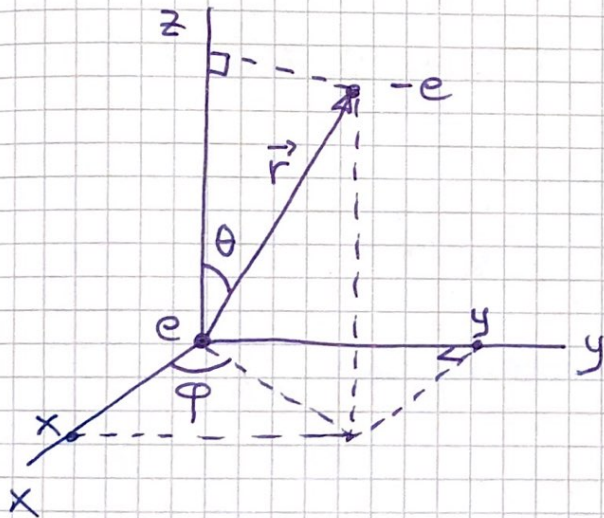
$$V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} ; \text{ kulesymmetrisk}$$

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

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

Vi antar at kjernen er praktisk talt i ro; dette er OK fordi $m_p \gg m_e$.

Hensiktsmessig med kulekoordinater: r, θ, φ



$$z = r \cos \theta$$

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

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

TUSL har produktløsninger

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

$$R_{nl}(r) = e^{-r/n \cdot a_0} \cdot \left\{ \text{polynom i } \frac{r}{a_0} \right\}$$

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

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$$

Tre kvantetall:

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

$$l = 0, 1, \dots, n-1 = \text{dreieimpulskvantetallet}$$

$$m = 0, \pm 1, \dots, \pm l = \text{det magnetiske kvantetallet}$$

Energiverdier:

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

Det samme som i Bohrs atommodell!

Kvantisert dreieimpuls:

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

Kvantiserte dreieimpulskomponenter:

$$L_z = m \hbar$$

Bare en komponent av $\vec{L}$ kan være skarp (veldefinert) om gangen:

Hvis L_z er skarp, er L_x og L_y uskarpe.

— " — L_x — " —, er L_y og L_z — " —.

— " — L_y — " —, er L_x og L_z — " —.

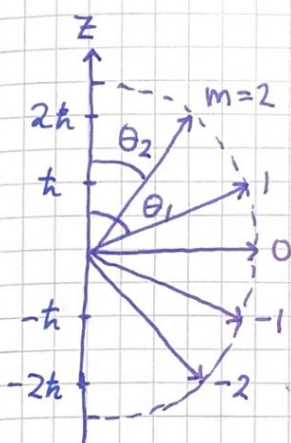
Dvs: $\vec{L}$ er alltid uskarp! (Unntak: $L=0$)

Eks: Anta at $l = 2$. Hva er da de mulige vinklene mellom $\vec{L}$ og L_z ?
(z-aksen)

Løsn: $m = 0, \pm 1, \pm 2$

$$L = \sqrt{2 \cdot 3} \hbar = \sqrt{6} \hbar$$

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



$$L_z/L = \cos \theta$$

$$\Rightarrow \theta = \arccos \left(\frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} \right)$$

$$\theta_0 = 90^\circ$$

$$\theta_1 = 66^\circ$$

$$\theta_2 = 35^\circ$$

Notasjon for "skall" og orbitaler:

n	1	2	3	4
skall	K	L	M	N

Skallenes utstrekning:

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^{-1} = n^2 a_0 \quad (\text{som i Bohrs atommodell})$$

Dreieimpulsnotasjon:

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

Arv fra 1800-tallets spektroskopister:

sharp, principal, diffuse, fundamental

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

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

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

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

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

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

Degenerasjonsgrad:

$g_n =$ antall ulike ψ_{nlm} med samme energi E_n

$g_1 = 1, g_2 = 4, g_3 = 9, \dots$, dvs $g_n = n^2$

Utvælgsregler for strålingsoverganger [os 8.5; YF 41.4]

Fotonet har spinn $\pm \hbar$ i bevegelsesretningen.

Total dreieimpuls er bevart når et atom absorberer eller emitterer et foton.

Tillatte strålingsoverganger for atomet oppfyller utvælgsreglene $\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$. Dvs:

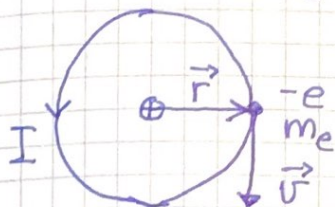
$s \leftrightarrow p, p \leftrightarrow d, d \leftrightarrow f, \dots$ er tillatt.

Lyman-serien: $n > 1 \leftrightarrow n = 1$ (UV)

Balmer - " - : $n > 2 \leftrightarrow n = 2$ (synlig)

Paschen - " - : $n > 3 \leftrightarrow n = 3$ (IR)

Dreieimpuls og magnetfelt. Spinn [OS 8.2, 8.3; YF 41.4, 41.5] 77



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

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

Magnetisk dipolmoment:

$$\mu = I \cdot A = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{1}{2} e v r$$

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

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

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

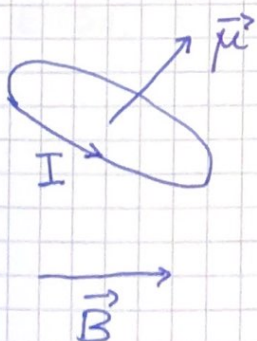
$$\Rightarrow \mu = n \cdot \frac{e\hbar}{2m_e} = n \cdot \mu_B$$

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

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

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

Magnetisk dipol i ytre felt $\vec{B}$: (se FY6017)



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

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

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

Hvis uniformt $\vec{B}$ -felt: $\vec{F} = 0$

[OS 8.2; YF 41.4]

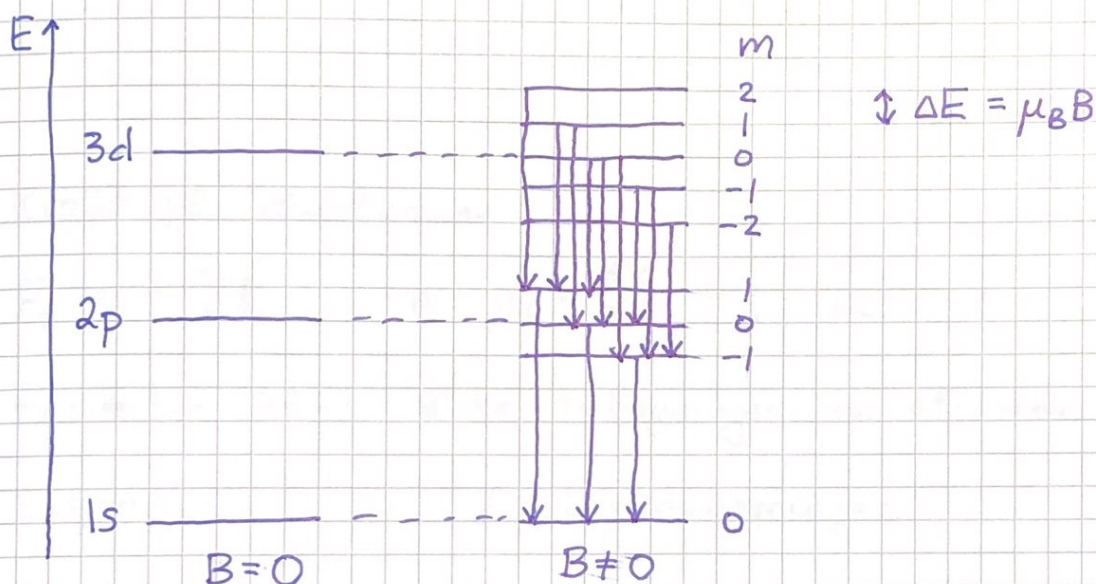
Zeeman-effekt (P. Zeeman 1897, NP 1902)

(78)

H-atom med $l > 0$ i magnetfelt $\vec{B} = B\hat{z}$ får et kvantisert tillegg til pot. energi:

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

Her er $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$. Dermed blir energinivåer med $l > 0$ splittet opp i flere tettliggende nivåer:



Med f.eks $B = 7T$: $\Delta E = 9.27 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T} \cdot 7T \approx$

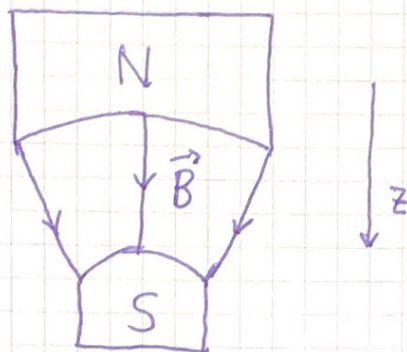
Til sammenligning:

$$E(3d) - E(2p) = 13.6 \text{ eV} \cdot \left(-\frac{1}{9} + \frac{1}{4}\right) \approx 2 \text{ eV}$$

Stern-Gerlach-eksperimentet. Spinn. [OS 8.3; YF 41.5]

(1922 ; O. Stern NP 1943)

Sendte sølvatomer (^{47}Ag) gjennom et inhomogent magnetfelt :



Kraft på sølvatomene :

$$F_z = - \frac{dV}{dz} = -m \cdot \mu_B \cdot \frac{dB}{dz} ; m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

Forventer $2l+1$ ulike avbøyninger av atomene.

Eksperimentet gav 2 ulike avbøyninger.

Goudsmit og Uhlenbeck foreslo i 1925 at elektronet har en indre dreieimpuls, et spinn $\vec{S}$, med et tilhørende magnetisk dipolmoment $\vec{\mu}_S$.

I analogi til at

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar ; L_z = m \hbar ; m = -l, \dots, 0, \dots, l$$

foreslo de at også elektronets spinn er kvantisert, med

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar ; S_z = m_s \hbar ; m_s = -s, \dots, s$$

De 2 avbøyningene i Stern-Gerlach-eksperimentet kan dermed forklares med at m_s bare har de 2 mulige verdiene $m_s = -\frac{1}{2}$ og $m_s = +\frac{1}{2}$; dermed er $s = \frac{1}{2}$.

I analogi til at $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$ for dreieimpulsen $\vec{L}$ kunne en forvente at $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e} \vec{S}$ for spinnet $\vec{S}$.

Det stemmer ikke: Eksperimenter gir $\vec{\mu}_s \approx -\frac{e}{m_e} \vec{S}$, i tråd med relativistisk QM (Dirac-ligningen).

Meget nøyaktige eksperimenter gir, med

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

tallverdien

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

i tråd med nøyaktig teori (kvanteelektrodynamikk, QED)

$$g_s = 2.00231930$$

Protonet og nøytronet er også spinn- $\frac{1}{2}$ -partikler, med $s = \frac{1}{2}$ og $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Disse partiklenes magnetiske dipolmoment er hhv

$$\vec{\mu}_p = g_p \cdot \frac{e}{2m_p} \cdot \vec{S}_p \quad ; \quad g_p = 5.58$$

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

Men ettersom både m_p og m_n er mye større enn m_e , blir atomenes magnetiske moment i hovedsak bestemt av elektronenes totale spinn og dreieimpuls.

Pauliprinsippet [OS 8.4; YF 41.6]

(81)

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

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

Her representerer 1 og 2 både posisjonsvektoren $\vec{r}$ og spinnkvantetallet m_s for hver elektron nr 1 og 2, dvs $1 = (\vec{r}_1, m_{s1})$; $2 = (\vec{r}_2, m_{s2})$.

Og $\Psi(1, 2)$ er en topartikkeltilstand.

Symmetrisk "topartikkeltilstands-sannsynlighetsfordeling" (ved ombytte av partiklene) gir to muligheter:

Bosoner: Symmetrisk Ψ , dvs $\Psi(1, 2) = \Psi(2, 1)$.
Eks: Fotoner

Fermioner: Antisymmetrisk Ψ , dvs $\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$
Eks: Elektroner, protoner, nøytroner

Et system med 2 elektroner kan da beskrives med bølgefunksjonen

$$\Psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_j(2) - \phi_i(2) \phi_j(1) \}$$

Her er ϕ_i og ϕ_j to vilkårlige enpartikkeltilstander, der i og j representerer kvantetallene til elektronene.

Ombytte $1 \leftrightarrow 2$ gir nå

$$\Psi(2, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(2) \phi_j(1) - \phi_i(1) \phi_j(2) \} = -\Psi(1, 2)$$

Nå ser vi at dersom de to elektronene befinner seg i samme enpartikkeltilstand, dvs hvis $\phi_i = \phi_j$, så blir

$$\Psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_i(2) - \phi_i(2) \phi_i(1) \} = 0$$

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

Dette er nettopp Pauliprinsippet!

Husk at

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

med romlig orbital $\psi_j(\vec{r})$ og spinntilstand χ_{m_s} .

For elektroner er $m_s = \pm 1/2$, slik at hver orbital $\psi_j(\vec{r})$ kan kombineres med $\chi_{1/2}$ og $\chi_{-1/2}$.

Vi kan dermed ha inntil 2 elektroner i hver orbital $\psi_j(\vec{r})$.

Atomer og det periodiske system [OS 8.4; YF 41.6]

Elektronkonfigurasjon for grunntilstanden i

H-atomet : $1s^1$ ($n=1$, $l=0$, $m=0$, $m_s = \frac{1}{2}$ eller $-\frac{1}{2}$)

Nummeriske løsninger av TUSL for andre grunnstoffer gir en lignende struktur som for hydrogen, med orbitaler med økende energi som regel slik:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d \dots$$

Dvs, energinivåene avhenger av både n og l .

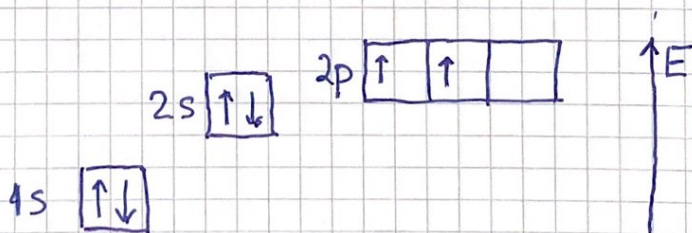
Atomets grunntilstand : Inntil 2 elektroner med motsatt spinn i orbitaler med lavest energi.

Hunds regel : Atomets totale spinn er størst mulig.

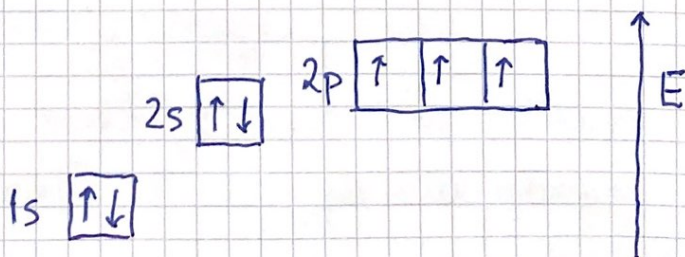
He : $1s^2$ Li : $1s^2 2s^1$ Be : $1s^2 2s^2$

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

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



N : $1s^2 2s^2 2p^3$



Edelgasser: He ($1s^2$), Ne ($1s^2 2s^2 2p^6$) osv.

Fylte skall. Stort energigap fra høyeste okkuperte til laveste ledige tilstand. Dermed lite reaktive.

Alkalimetaller (Li, $1s^2 2s^1$; Na, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ osv)

og halogener (F, $[He] 2s^2 2p^5$; Cl, $[Ne] 3s^2 3p^5$ osv)

har hhv et elektron for mye og et for lite for å oppnå edelgasskonfigurasjon med fylte skall.

Oppnås ved å slå seg sammen og danne stabile salter som NaCl, LiF osv.

Molekyler

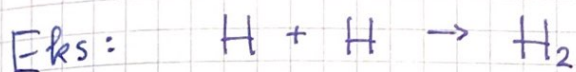
[OS9, YF42]

Molekylorbitaler (MO) for elektronene i et molekyl kan konstrueres som lineære kombinasjoner (LC) av atomære orbitaler (AO), såkalt LCAO:

$$\underset{\text{MO}}{\psi} = \sum_j c_j \underset{\text{AO}}{\phi_j}$$

Molekylets grunntilstand:

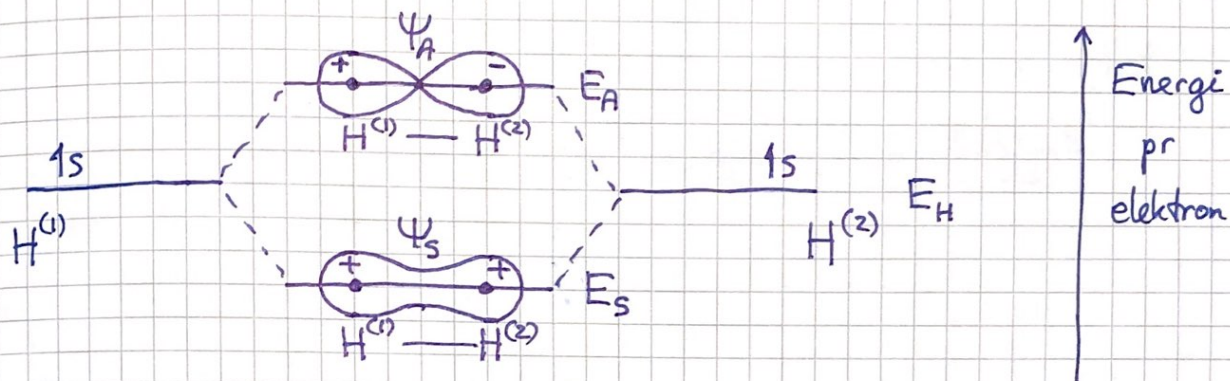
- Inntil 2 elektroner (med motsatt spinn) i MO med lavest mulig energi.
- Geometri, dvs bindingslengder og -vinkler slik at netto kraft $F=0$ på alle atomene.



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

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

Energidiagram:



ψ_s og ψ_A har hhv 0 og 1 nodeplan

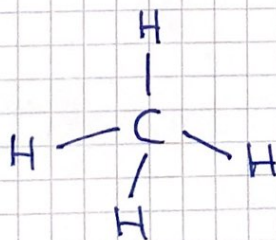
$$\Rightarrow E_s < E_A$$

Grunntilstanden i H_2 : 2 elektroner i ψ_s

Bindingsenergi:

$$\Delta E = E(H_2) - 2E(H) = 2E_s - 2E_H \approx -4.5 \text{ eV}$$

Eks 2: I f.eks. CH_4 (metan) kan tetraeder-geometrien beskrives med såkalt sp^3 -hybridisering, dvs lineærkombinasjoner av karbonets 2s-orbital og tre 2p-orbitaler.



Molekylers rotasjonsberegelse

Løsning av TUSL for H-atomet viste at dreieimpulsen er kvantisert:

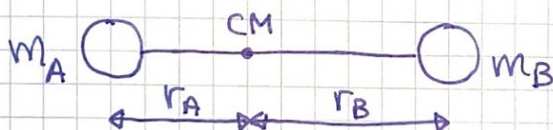
$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Da må rotasjonsenergien til et molekyl være kvantisert:

$L = I \cdot \omega$; I = treghetsmoment, ω = vinkelhastighet

$$K_{\text{rot}} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} I \cdot \left(\frac{L}{I}\right)^2 = \frac{1}{2I} \cdot L^2 = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

For toatomig molekyl:



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

Eks: CO ; $\hbar^2/2I \approx 0.24 \text{ meV}$

$$\Rightarrow K_{\text{rot}} = \begin{matrix} 0, & 0.48 \text{ meV}, & 1.44 \text{ meV}, & \dots \\ (l=0) & (l=1) & (l=2) \end{matrix}$$

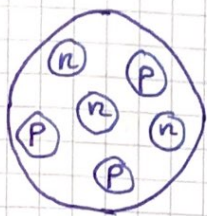
Utrålsregel ved absorpsjon/emisjon av foton:

$$\Delta l = \pm 1$$

Fotonenergier av størrelsesorden 1 meV tilsvarer bølgelengder av størrelsesorden

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1.6 \cdot 10^{-22}} \text{ m} = 1.2 \text{ mm}$$

dvs langt inne i IR-området.



p = proton
n = nøytron

$$R = R_0 \cdot A^{1/3} = \text{kjernens radius}$$

$$R_0 \approx 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 1.2 \text{ fm} \quad (\text{fm} = \text{femtometer} = \text{fermi})$$

$$A = Z + N = \text{antall nukleoner}$$

$$Z = \text{antall protoner} = \text{atomnummeret}$$

$$N = \text{antall nøytroner}$$

$$\text{Volum: } V = \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{4}{3} \pi R_0^3 \cdot A$$

$$\text{Masse: } m \approx A \cdot u ; \quad 1u \approx 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\text{Massetetthet: } \rho = m/V = 3u/4\pi R_0^3 \approx 2.3 \cdot 10^{17} \text{ kg/m}^3$$

omtrent den samme for alle kjerner

Nuklide : kjerne med gitt Z og N

Isotoper : samme Z, ulik N;

notasjon ${}^A_Z X$ (X = atomsymbolet)

Eks: ${}^{12}_6 \text{C}$, ${}^{13}_6 \text{C}$, ${}^{14}_6 \text{C}$

Spin: Både p og n er fermioner med $s = 1/2$

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} S &= |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar \\ S_z &= m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar \end{aligned} \right\} \text{ som elektronet}$$

Banedreieimpuls: $L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar ; \quad l = 0, 1, 2, \dots$
 $L_z = m \hbar ; \quad m = -l, \dots, l$

Total dreieimpuls: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Kjerne med A nukleoner: $\vec{J} = \sum_{i=1}^A \vec{J}_i$

Som $\vec{L}$ og $\vec{S}$ er også $\vec{J}$ kvantisert:

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

$$J_z = m_j \hbar ; \quad m_j = -j, \dots, j$$

Magnetisk dipolmoment:

Kjernemagneton: $\mu_N \equiv \frac{e \hbar}{2m_p} \approx 5.05 \cdot 10^{-27} \text{ J/T}$

Protonet: $\mu_p = 2.7928 \mu_N$ ($\vec{\mu}_p$ og $\vec{S}_p$ parallelle)

Nøytronet: $\mu_n = -1.9135 \mu_N$ ($\vec{\mu}_n$ og $\vec{S}_n$ antiparallele)

Skyldes at p og n har en indre struktur; de er ikke elementærpartikler men består av tre kvarker.

For de fleste kjerner er $|\vec{\mu}|$ av størrelsesorden noen få μ_N .

NMR : Nuclear Magnetic Resonance

MRI : Magnetic Resonance Imaging

Potensiell energi for kjerne med magnetisk dipolmoment $\vec{\mu}$ i et ytre magnetfelt $\vec{B} = B \hat{z}$:

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

som med kvantisert μ_z gir kvantiserte energinivåer.

Eks: Proton, dvs ^1H i tilstand med $l=0$ og $s=1/2$

$$\Rightarrow V \approx \pm 2.79 \mu_N B$$

$\Rightarrow$ Fotoner med energi $h\nu = 2 \cdot 2.79 \mu_N B$ kan absorberes og emitteres av slike kjerner ;
vi har da resonans.

Med f.eks. $B = 6\text{T}$:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{2 \cdot 2.79 \mu_N \cdot B} \approx 1.2\text{ m}$$

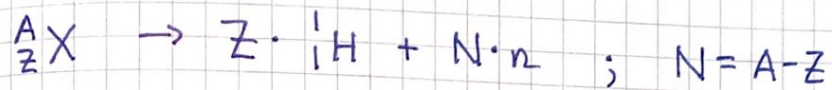
dvs radiobølger.

Prinsipp for NMR og MRI :

Protonenes omgivelser påvirker verdien av B som protonet "ser". Gir resonans for ulike fotonbølglengder λ , avhengig av omgivelsene.
Dermed blir avbildning mulig.

(90)

Bindingsenergi: Endringen i hvileenergi når
atomet ${}^A_Z X$ tenkes oppdelt i Z hydrogenatomer ${}^1_1 H$
og N nøytroner. Dvs:



$$E_B = \{ Z \cdot M_H + N \cdot m_n - M_X \} \cdot c^2$$

Eks: Deuterium. ${}^2_1 H$. Masse 2.014102 u. $E_B = ?$

$$M_H = 1.007825 \text{ u}, \quad m_n = 1.008665 \text{ u}$$

$$\begin{aligned} \text{Løsn: } E_B &= c^2 \cdot u \cdot \{ 1.007825 + 1.008665 - 2.014102 \} \\ &= 0.002388 c^2 u \approx 3.6 \cdot 10^{-13} \text{ J} \approx \underline{\underline{2.2 \text{ MeV}}} \end{aligned}$$

$$(1 u \cdot c^2 \approx 931.494 \text{ MeV})$$

Eks: ${}^{62}_{28} \text{Ni}$. Masse 61.928349 u.

$$\begin{aligned} \Rightarrow E_B &= 931.494 \text{ MeV} \cdot \{ 28 \cdot 1.007825 + 34 \cdot 1.008665 \\ &\quad - 61.928349 \} \\ &\approx 545 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Pr nukleon: ca 8.8 MeV (høyeste kjente E_B/A)

Empiriske modeller for kjerners bindingsenergi:

- Væskedråpmodellen
- Skallmodellen

(les selv om disse; ikke pensum.)

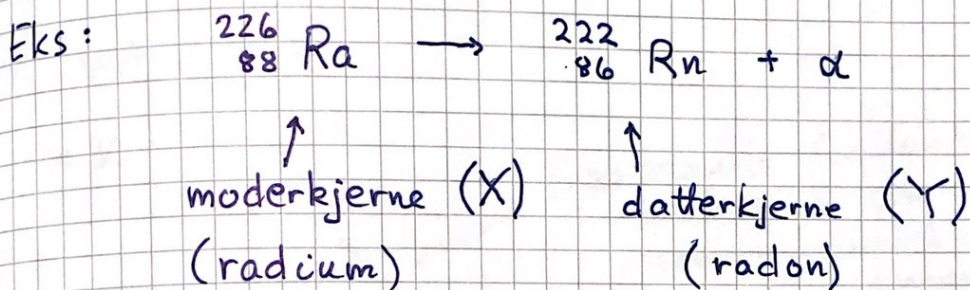
Radioaktivitet

(91)

- Av ca 2500 kjente nuklider er færre enn 300 stabile.
- Ustabile kjerner spaltes ("decay") med utsending av partikler (massive) eller fotoner.
- Levetider varierer fra mindre enn $1 \mu\text{s}$ til milliarder av år.

α -decay

${}^4_2\text{He}$ -kjerne emitteres spontant



Frigjort kinetisk energi $Q = \text{Tap i hvileenergi} :$

$$\begin{aligned} Q &= (M_X - M_Y - M_\alpha) c^2 \\ &= (226.025410 \text{ u} - 222.017578 \text{ u} - 4.002603 \text{ u}) \cdot \\ &\quad \cdot 931.494 \frac{\text{MeV}}{\text{u}} \\ &= 0.005229 \text{ u} \cdot 931.494 \text{ MeV/u} \\ &= 4.87 \text{ MeV} \end{aligned}$$

$$Q = \frac{1}{2} M_Y v_Y^2 + \frac{1}{2} M_\alpha v_\alpha^2 = \frac{1}{2} M_Y v_Y^2 + K_\alpha$$

$$0 = M_Y v_Y - M_\alpha v_\alpha \quad (\text{impulsbevarelse})$$

$$\Rightarrow v_Y = M_\alpha v_\alpha / M_Y$$

$$\Rightarrow Q = \frac{1}{2} M_Y \cdot \left(\frac{M_\alpha v_\alpha}{M_Y} \right)^2 + \frac{1}{2} M_\alpha v_\alpha^2 \quad (92)$$

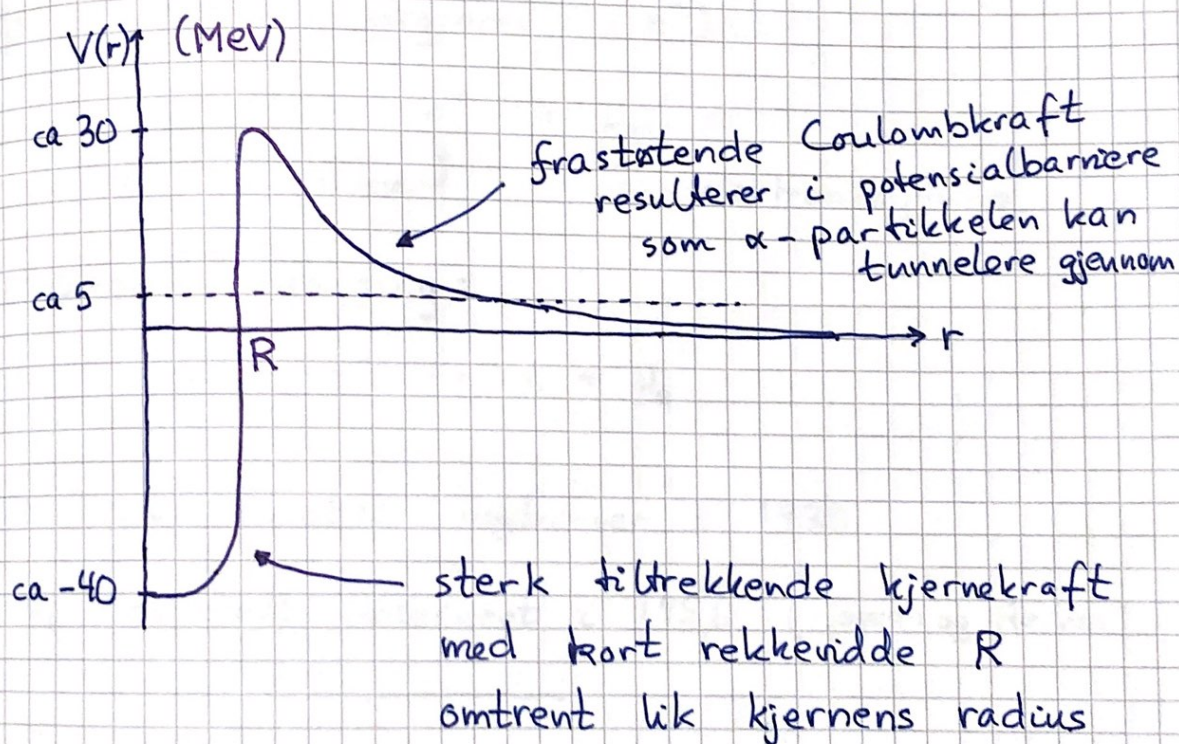
$$= \frac{1}{2} M_\alpha v_\alpha^2 \left(\frac{M_\alpha}{M_Y} + 1 \right) = K_\alpha \left(\frac{M_\alpha + M_Y}{M_Y} \right)$$

$$\Rightarrow \underline{K_\alpha = Q \cdot \left(\frac{M_Y}{M_\alpha + M_Y} \right)}$$

Her er $Q = 4.87 \text{ MeV}$, $M_Y = 222u$, $M_\alpha \approx 4u$

$$\Rightarrow K_\alpha = 4.87 \text{ MeV} \cdot 222/226 = \underline{\underline{4.78 \text{ MeV}}}$$

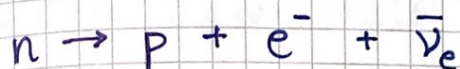
α -decay kan beskrives som tunneling:



β -decay

(93)

β^- : Elektron frigjøres (e^-)



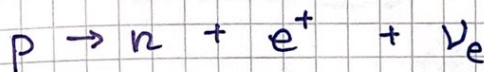
↑ antielektronnøytrino

Bevaring av spinn og ladning

$\Rightarrow \bar{\nu}_e$ har spinn $s=1/2$ og ladning $q=0$.

Massen er trolig mindre enn (ca) $0.1 \text{ eV}/c^2$

β^+ : Positron frigjøres (e^+)



↑ positron

↑ elektronnøytrino

Elektron - innfangning:

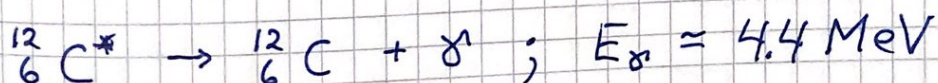
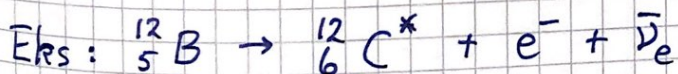


W. Pauli forutsa nøytrinoer i 1930.

ν_e ble først observert i 1956 (Cowan og Reines).

γ -decay

Utsendelse av foton med høy energi når α - eller β -decay resulterer i datterkjerne i eksitert tilstand.



Aktivitet og halveringstid

(94)

Rimelig å anta at antall kjerner som spaltes pr tidsenhet er proporsjonalt med antall radioaktive kjerner som er igjen:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda \cdot N$$

$$\Rightarrow \int_{N(0)}^{N(t)} \frac{dN}{N} = -\lambda \int_0^t dt \Rightarrow \ln \frac{N(t)}{N(0)} = -\lambda t$$

$$\Rightarrow \boxed{N(t) = N(0) e^{-\lambda t}}$$

Halveringstid $T_{1/2}$: $\frac{N(t+T_{1/2})}{N(t)} = \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow e^{-\lambda T_{1/2}} = \frac{1}{2} \Rightarrow \boxed{T_{1/2} = \frac{1}{\lambda} \ln 2}$$

Enheter for radioaktivitet:

1 Bq (becquerel) = 1 spaltning pr sekund

1 Ci (curie) = $3.70 \cdot 10^{10}$ spaltninger pr sekund

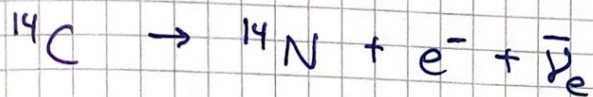
(ca decay-raten for 1g radium, Ra)

Radiologisk datering

(95)

Atmosfærens isotopfordeling av karbon er den samme som i levende organismer pga CO_2 inn/ut.

Opptak av CO_2 stanser ved død, og andel ^{14}C avtar pga β -decay,

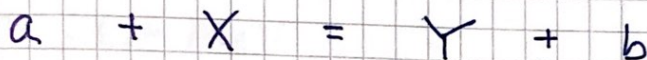
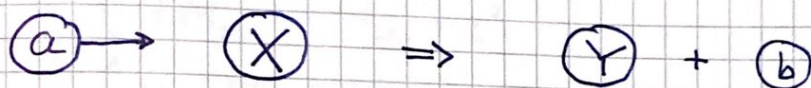


med $T_{1/2} = 5730$ år.

⇒ Med kjent $[^{14}\text{C}]$ i atmosfæren (over tid) kan forløpt tid fra organismens død beregnes.

Kjernerreaksjoner

(96)



Reaksjonsenergi: $Q = (M_a + M_X - M_Y - M_b)c^2$

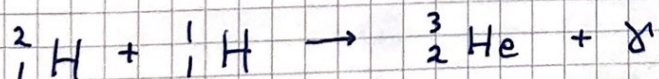
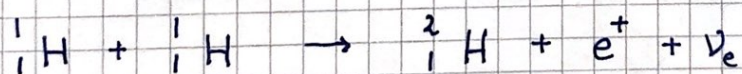
$Q > 0$: Eksoterm reaksjon. Masse (hvileenergi) omdannes til kinetisk energi

$Q < 0$: Endoterm reaksjon. Kinetisk energi omdannes til masse.

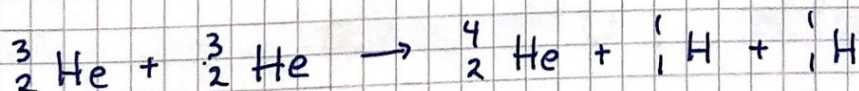
Terskelenergi: For å få endoterm reaksjon til å gå må reaktantene ha kinetisk energi minst lik $|Q|$.

Fusjon: To kjerner kombineres til en.

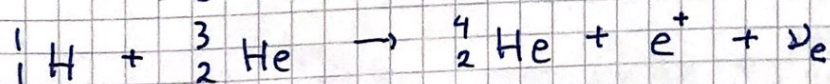
I sola (og andre stjerner) dannes helium av hydrogen.



Deretter



eller fusjon av ${}_1^1\text{H}$ og ${}_2^3\text{He}$,



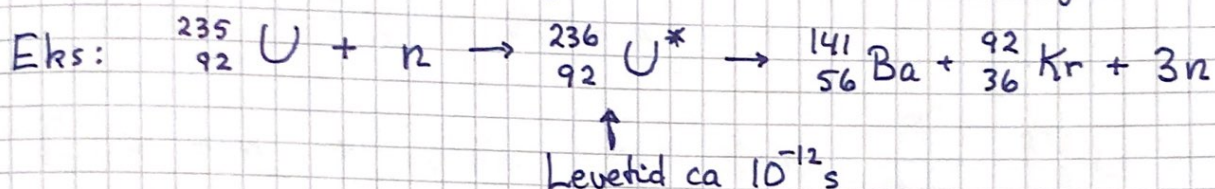
Netto omdannes 4 stk ${}^1_1\text{H}$ til 1 stk ${}^4_2\text{He}$.

(97)

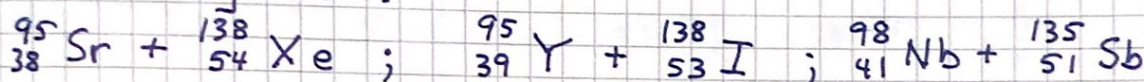
$$\begin{aligned}\Rightarrow Q &= (4M_{\text{H}} - M_{\text{He}}) \cdot c^2 \\ &= (4 \cdot 1.007825 \text{ u} - 4.002603 \text{ u}) \cdot 931.494 \frac{\text{MeV}}{\text{u}} \\ &= 26.7 \text{ MeV}\end{aligned}$$

Fordeles som kinetisk energi på de produserte partiklene (${}^4_2\text{He}$, e^+ , ν_e , γ).

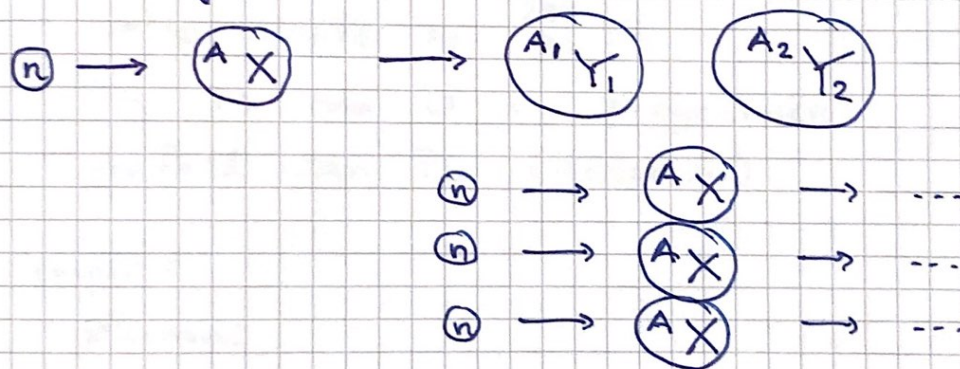
Fisjon: En (tung) kjerne deles i to mindre kjerner.



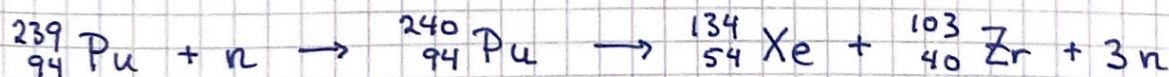
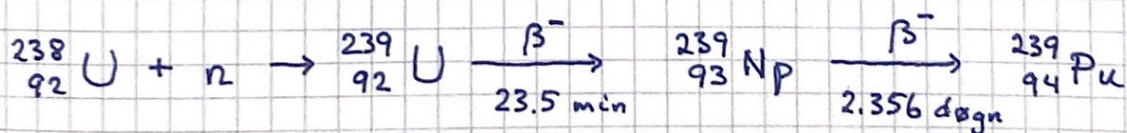
Andre muligheter:



Kjedereaksjon:



Naturlig uran: 0.7% ${}^{235}\text{U}$, 99.3% ${}^{238}\text{U}$



Q-verdi for $^{235}_{92}\text{U} + n \rightarrow ^{141}_{54}\text{Ba} + ^{92}_{36}\text{Kr} + 3n$: (98)

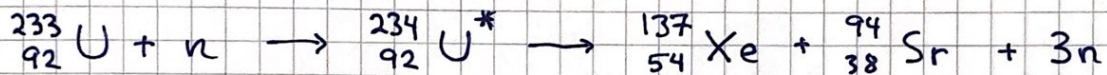
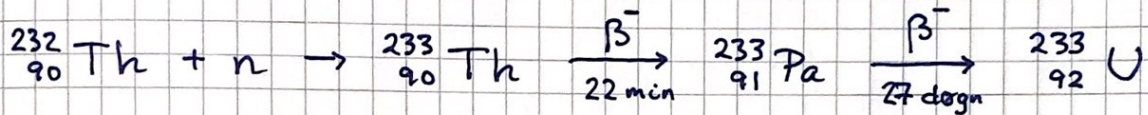
$$Q = 931.494 \text{ MeV} \cdot \{ 235.043930 - 140.914411 - 91.926156 - 2 \cdot 1.008665 \}$$

$$\approx \underline{173 \text{ MeV}}$$

Kjernekraft med thorium:

$$^{232}_{90}\text{Th} : T_{1/2} = 14 \cdot 10^9 \text{ år}$$

$$^{233}_{90}\text{Th} : T_{1/2} = 22 \text{ min.}$$



Noen fordeler med thorium:

- Nesten 100% er $^{232}_{90}\text{Th}$
- Mer Th enn U i berggrunnen
- Avfall uten Pu (plutonium)

Ulemper:

- Økonomi
- Teknologi