

Fra 1. samling:

de Broglie: $\lambda = h/p$, $f = E/h$ (partikkels bølgeegenskaper)Fotoner: $E = hf = pc$ (Planck, Einstein)

Bohr-modellen:

Newtons 2. lov ($F = ma$), Coulombs lov ($F = e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$) og stående bølger à la de Broglie for elektronet ($2\pi r = n\lambda = nh/mv$) gir

$$E_n = - (me^4 / 32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2) \cdot \frac{1}{n^2} \approx - \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} ; n = 1, 2, 3, \dots ; \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

for energien til elektronet i hydrogenatomet; i sirkulære baner rundt kjernen, med radius $r_n = n^2 \cdot a_0$; $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2 \approx 0.529 \text{ Å} = \text{Bohr-radien}$ Klassisk bølge ligning: $d^2y/dx^2 = (1/v^2) d^2y/dt^2$ (lyd, lys etc)

Schrödingerligningen: [E. Schrödinger, 1925, NP 1933]

$$i\hbar \frac{d^2\Psi}{dx^2} = H\Psi ; i = \sqrt{-1} ; \Psi = \text{bølgefunksjonen for partikler}$$

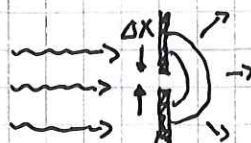
 H = hamiltonoperatoren = energiooperatoren = $K + V$

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} = \text{operator for kinetisk energi}$$

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = \text{operator for bevegelsesmengden}$$

 V = potensiell energi
 $|\Psi(x,t)|^2 \cdot dx$ = sannsynligheten for å måle partikkelenes posisjon mellom x og $x+dx$ ved tidspunkt t
Heisenbergs uskarphetsrelasjon: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ som betyr at en partikkel ikke kan ha skarpt definert posisjon x og bevegelsesmengde p samtidig.

Klassisk analogi: Diffraksjon.

Liten $\Delta x \Rightarrow$ stor usikkerhet i fotonenes $\vec{p}$ (dvs retningen!)

(2)

Stasjonære løsninger av Schrödingerligningen:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} \quad \left[\begin{array}{l} \text{stor: } \Psi \\ \text{liken: } \psi \end{array} \right]$$

Da er

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = i\hbar \cdot \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = E\Psi$$

og vi får ligningen

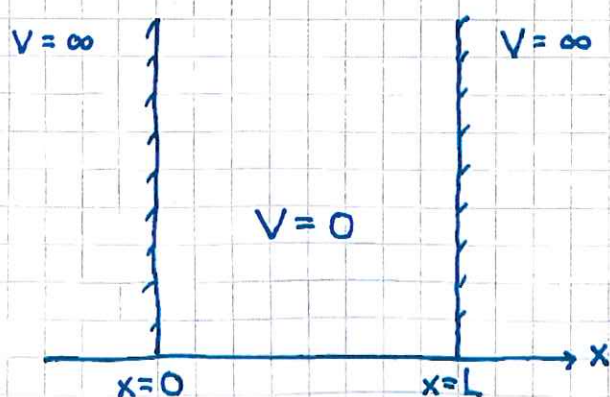
$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad ; \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

som er den tidsuavhengige Schrödingerligningen. ("TUSL")

Løsninger av TUSL for ulike potensialer $V(x)$, evt $V(\vec{r})$ i tre dimensjoner, fastlegger systemets mulige energier E og tilhørende bølgefunksjoner $\psi(x)$, dvs sannsynlighetstettheten $|\psi(x)|^2$.

Eksempler og anvendelser

Partikkel i boks



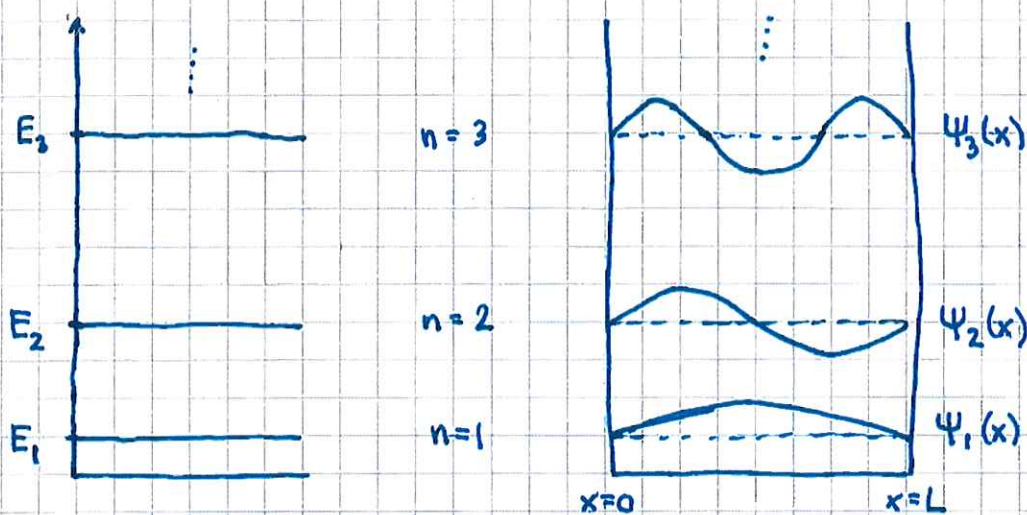
Løsning av TUSL gir:

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

($n=1, 2, 3, \dots$)

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

③



- Kravet $\psi(0) = \psi(L) = 0$ (grensebetingelser; null sannsynlighet for å finne partikkelen der $V \rightarrow \infty$) gir stående bølger med bølgelengde $\lambda_n = 2L/n$, helt analogt til stående bølger på en instrumentstreng som er fastspennet i begge ender!

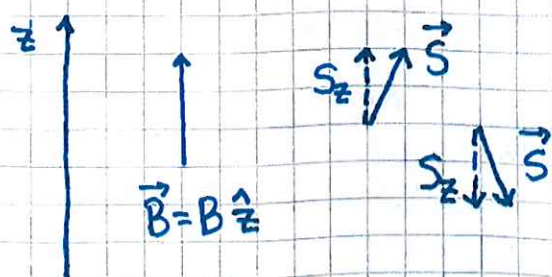
- 3D boks, f.eks. kubisk med volum L^3 (lettere å se for seg?):

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) ; \quad n_i = 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

disse stående bølger, med $\psi = 0$ på alle "vegger" av boksen

- Spin: Elektronet har en slags "indre dreieimpuls", som om det roterer om sin egen akse. Spinnet er en vektorstørrelse, $\vec{S}$, med absoluttverdi $S = |\vec{S}| = \sqrt{3/4} \hbar$ for elektronet. Med et magnetfelt $\vec{B}$ kan man måle komponenten av $\vec{S}$ langs $\vec{B}$:



Får da alltid enten $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$ eller $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$.

Vi sier da at elektronet er i en spinnstilstand, enten med spin "opp" eller spin "ned".

- Pauliprinsippet: Det kan ikke være mer enn ett elektron i en gitt tilstand. En rømlig bølgefunksjon $\psi(x,y,z)$, en orbital, kan kombineres med de to spinn-mulighetene $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$, slik at det kan være inntil to elektroner i hver orbital, et med spinn opp ($S_z = +\hbar/2$) og et med spinn ned ($S_z = -\hbar/2$). ④

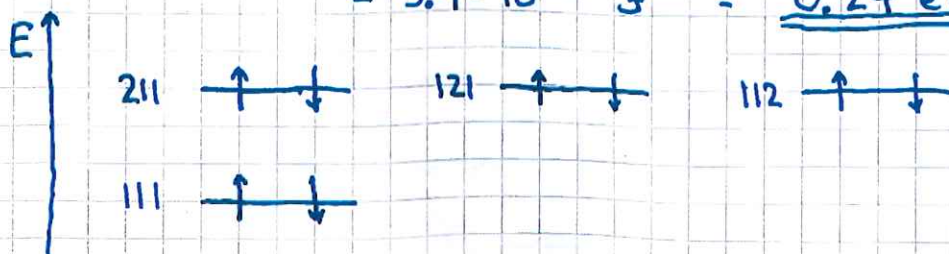
Eks: Anta at du har 8 elektroner avgrenset til et kubisk område med sidekanter 8.0 nm, og at potensialet er konstant i dette området, og der vi velger $V=0$. Utenfor "boksen" er $V \gg 0$. Anta dessuten at vi kan neglisjere vekselvirkning (påvirkning innbyrdes) mellom de 8 elektronene. Anta at systemets temperatur er svært lav, $T \approx 0$ K. Bestem total (kinetisk, siden $V=0$) energi for de 8 elektronene.

Løsn: Elektronene vil "okkupere" de 4 orbitalene som tilsværer lavest energi, 2 i hver orbital, 1 med spinn opp og 1 med spinn ned.

$$E_{111} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} (1^2 + 1^2 + 1^2) = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2m L^2}$$

$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} (2^2 + 1^2 + 1^2) = \frac{6\pi^2 \hbar^2}{2m L^2}$$

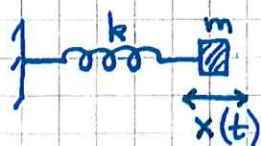
$$\begin{aligned} \Rightarrow E_{\text{TOTAL}} &= 2E_{111} + 2E_{211} + 2E_{121} + 2E_{112} \\ &= (2 \cdot 3 + 6 \cdot 6) \cdot \pi^2 \hbar^2 / 2m L^2 \\ &= 21 \pi^2 \hbar^2 / m L^2 \\ &= 21 \pi^2 \cdot (1.05 \cdot 10^{-34})^2 / 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot (8.0 \cdot 10^{-9})^2 \\ &= 3.9 \cdot 10^{-20} \text{ J} = \underline{\underline{0.24 \text{ eV}}} \end{aligned}$$



Harmonisk oscillator

(5)

Først klassisk:



Newtons 2. lov: $-kx = ma = m \frac{d^2x}{dt^2}$

$$\Rightarrow x(t) = x_0 \cos \omega t \quad ; \quad \omega = \sqrt{k/m}$$

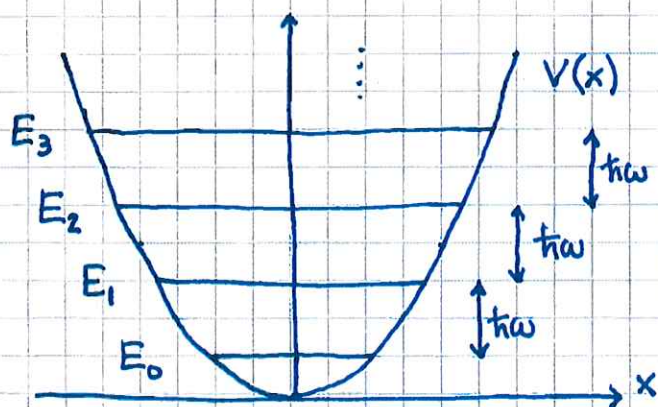
$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$K = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} m (dx/dt)^2$$

$$E = V + K = \frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2 (\underbrace{\cos^2 \omega t + \sin^2 \omega t}_{=1}) \\ = \frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2$$

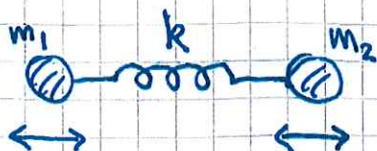
TUSL, $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi = E\psi$, gir løsninger med kvantiserte energinivåer,

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



Ekvidistante energinivåer

Relevans: Vibrasjon av atomer i molekyler og krystaller



"Fjærkonstanten" k bestemmes av bindingsstyrken.

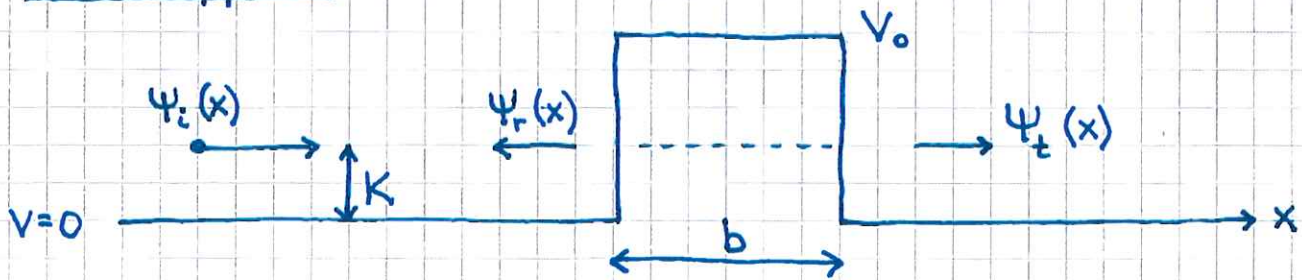
$$\omega = \sqrt{k/\mu} \quad ; \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

μ = "redusert" masse

Vibrasjons-spektroskopi: Molekyløt kan kun absorbere (og emittere) fotoner med energi $N \cdot \hbar\omega$; typisk i IR-området.

Tunneleffekt

⑥



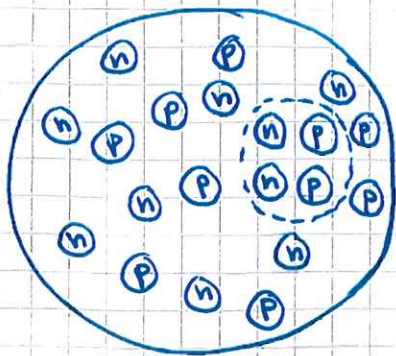
Klassisk vil en innkommende partikkel (fra venstre) med kinetisk energi $K < V_0$ (= høyden på potensialbarrieren) helt sikkert bli reflektert tilbake.

Kvantemekanisk (dvs løsning av TUSL) har partikkelen en viss sannsynlighet for å tunnelere gjennom barrieren!

Relevans:

- Kjernereaksjoner

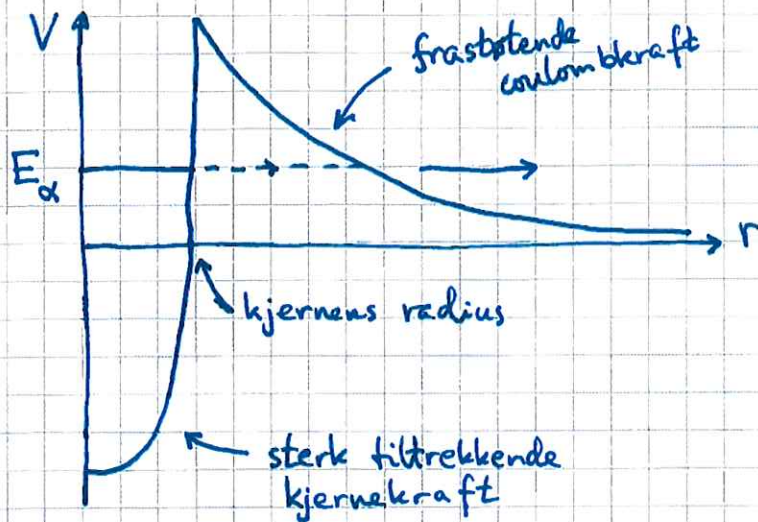
I f.eks. ${}^{238}_{92}\text{U}$ kan vi se for oss at 2 protoner og 2 nøytroner slår seg sammen inne i atomkjernen og danner en α -partikkel, ${}^4_2\text{He}^{2+}$:



To ulike typer krefter virker her:

- sterke tiltrekkende kjernekrefter
- svakere frastøtende coulombkrefter

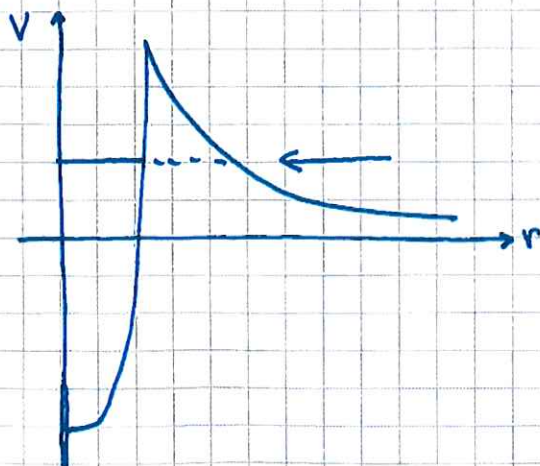
Kan beskrives med dette potensialet :



Dvs, α -partikkelen, med energi E_α , har en viss sannsynlighet for å tunnelere gjennom potensialbarrieren og ut av kjernen :

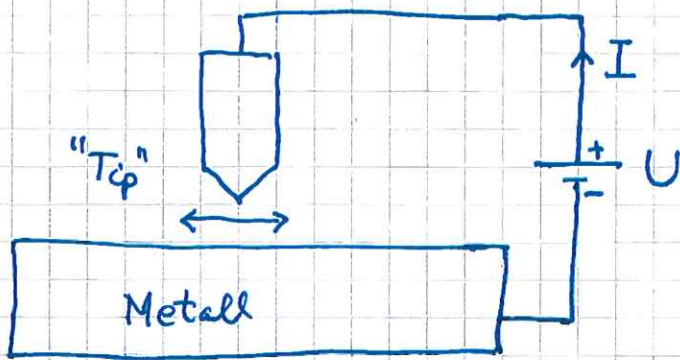


Fusjon er essensielt en omvendt prosess :



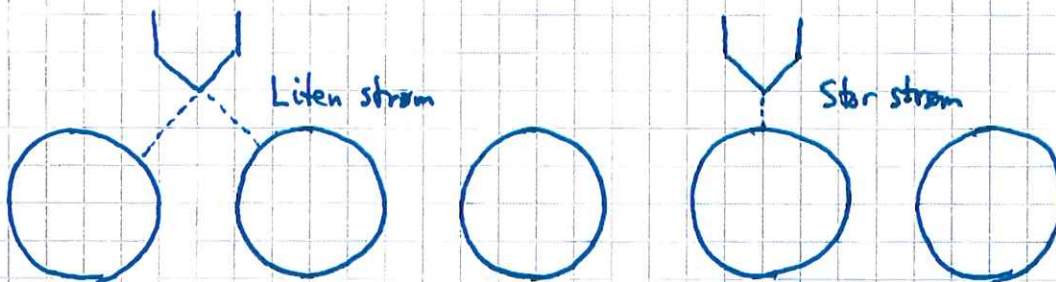
• Tunnel - mikroskop (STM; scanning tunneling microscope)

8



En strøm I kan gå i kretsen, fordi elektroner kan tunnere fra metalloverflaten gjennom luftgapet (evt. en annen isolator) og inn i "tipen" (som også er metallisk).

Strømmen I er svært følsom for endring i minste avstand fra metalloverflate til tip:



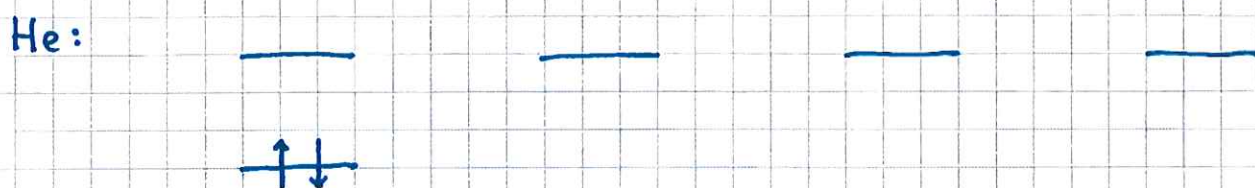
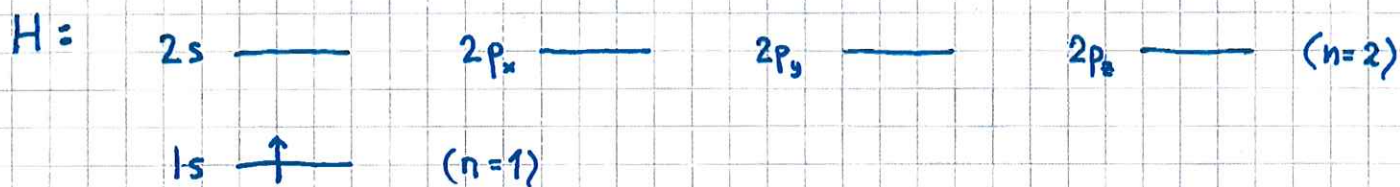
Gir opplysning med atomær oppløsning!

(NP 1986; Binnig & Rohrer, IBM Zürich)

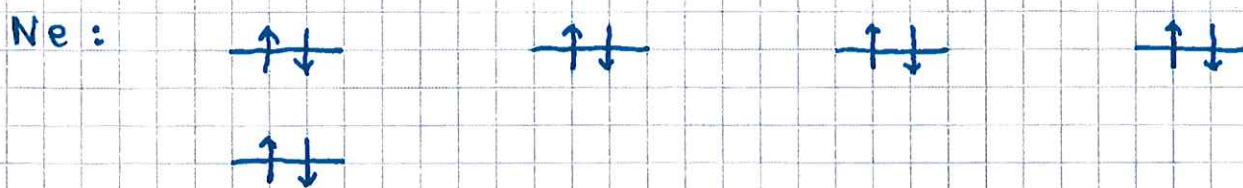
Fra atom til krystall

⑨

Atom: TUSL gir bestemte ("krantiserte") energinivåer for elektronene i atomet. Disse energinivåene okkuperes av elektroner, i tråd med Pauliprinsippet.



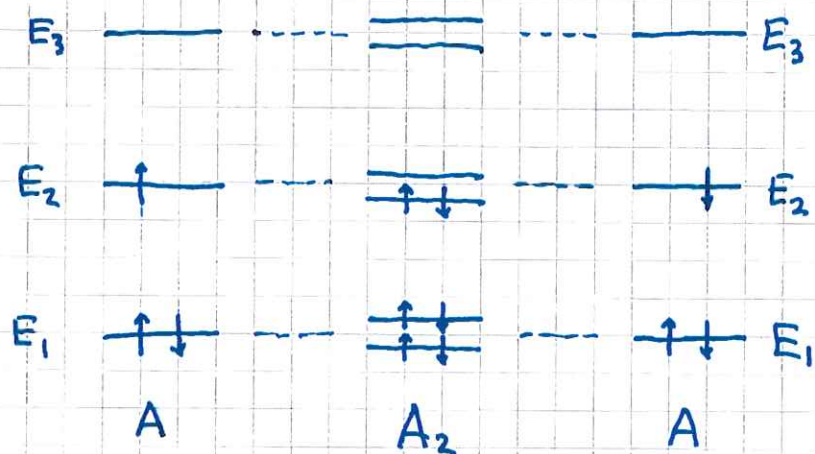
⋮



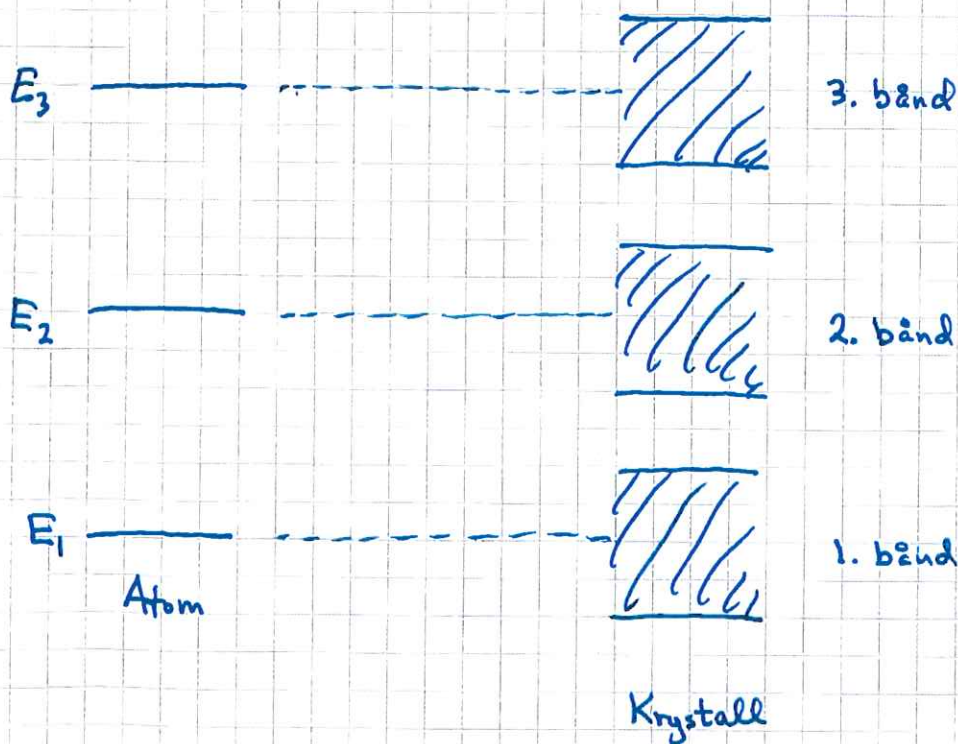
⋮

[Kvantisert dreieimpuls: Klassisk kan elektronet ha alle mulige verdier for $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Kvantemekanisk er $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$; $L = |\vec{L}|$; $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. Standard notasjon: s, p, d, f, g, ... for hhv $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$]

Molekyl: Se på $A + A \rightarrow A_2$. TUSL gir da som resultat dobbelt så mange energinivåer i A_2 som i A . Hvert nivå i A gir to relativt tettliggende nivåer i A_2 . (10)

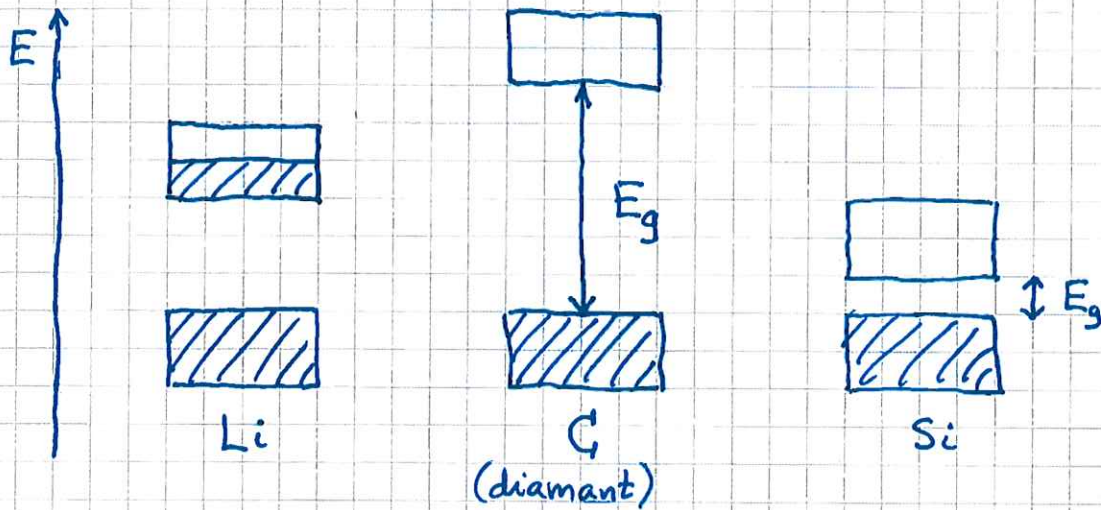


Krystall: Med N atomer gir TUSL N tettliggende energinivåer for hvert nivå i atomet. Med stor N , dvs $N \approx \infty$, ligger energinivåene i krystallen "uendelig tett", og vi får såkalte energibånd.



Eksempler på ulike krystaller:

(11)



Li: Fullt valensbånd, , halrfullt ledningsbånd,
 $\Rightarrow$ Metall

C (diamant): Fullt valensbånd, tomt ledningsbånd, ,
stort båndgap ($E_g = 5.5 \text{ eV}$) $\Rightarrow$ Isolator

Si: Fullt valensbånd, tomt ledningsbånd, lite båndgap
($E_g = 1.1 \text{ eV}$) $\Rightarrow$ Halvleder

