

Kvantekos

August Arnstad

Høstsemester 2020, NTNU

1 Introduction

Yes da dure vi på med en del formela som kan vær nyttig

2 Plancks strålingslov

Plancks strålingslov går ut på at intensiteten i varmestråling fra svarte legemer med en viss temperatur ikke kan gå mot uendelig, og derfor må ha et toppunkt. Dette stemte ikke overens med de klassiske resultatene, der det i teorien ville gitt uendelig energi. Det var slik Plancks konstant ble til og i grafen under ser man intensiteten plottet i klassisk og kvantemekanisk resultat.

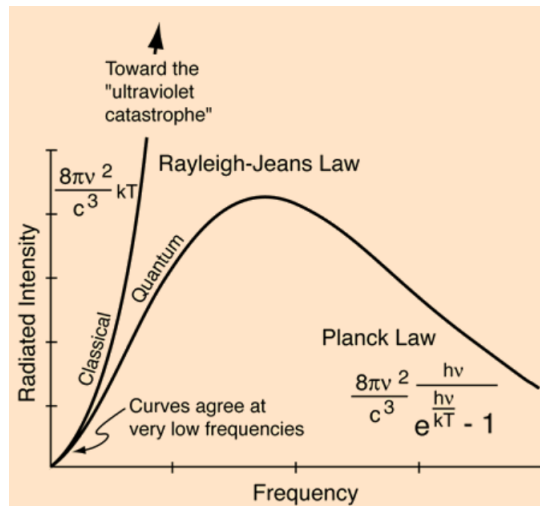


Figure 1:

Plancks strålingslov lyder:

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

Der den totale energistrømmen blir

$$J(T) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\nu, T) d\nu \quad (2)$$

3 Den fotoelektrisk effekt

Einstein bygget videre på på Plancks strålingslov og til slutt fant man at energien er kvantisert på formen

$$E_n = h\nu n; \quad n = 0, 1, 2, 3... \quad (3)$$

Videre fant man at elektroner i metaller kan rives løs av et elektrisk felt. Det som overrasket var at det ikke var intensiteten på lyset, men frekvensen på strålingen som var avgjørende for hvor stor kinetisk energi elektronene fikk. Dette er fordi elektroner absorberer energien til fotoner og øker sin kinetiske energi med $h\nu$. Man fant så at

$$E_{kin} = h\nu - W \quad (4)$$

der W er frigjøringsarbeidet som kreves for å løsne elektronet.

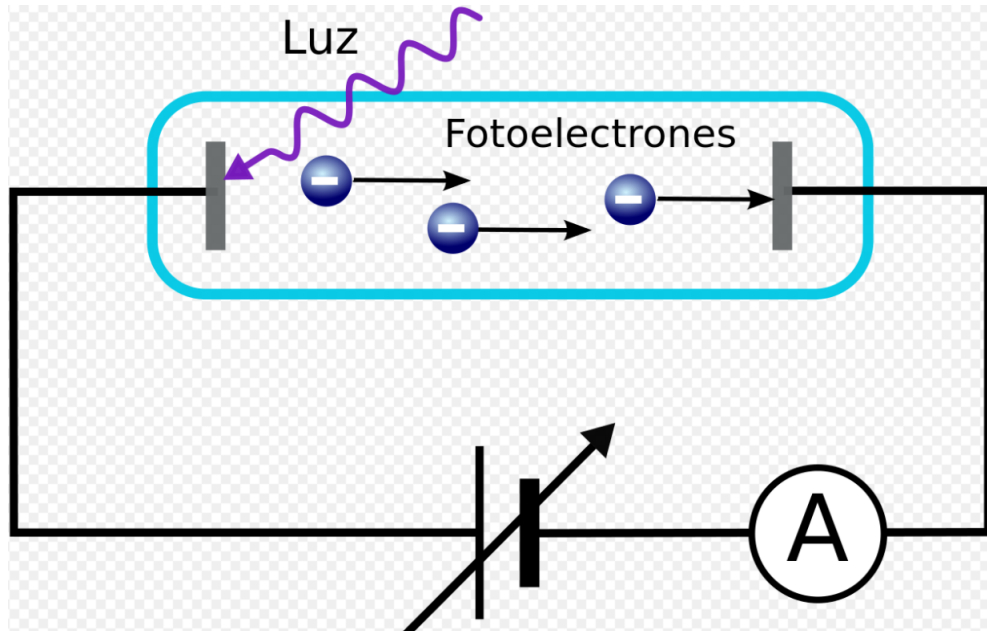


Figure 2:

4 Straight Outta Compton effekten

Compton effekten er det som tydeligst vist partikkelnaturen til EM-stråling. Her ble stråling med en viss frekvens sendt gjennom folie, og noe av strålingen forandre frekvens med et beløp som avhenger av retningen på den spredte strålingen. Dette førte til formelen

$$p = \frac{h\nu}{c} \quad (5)$$

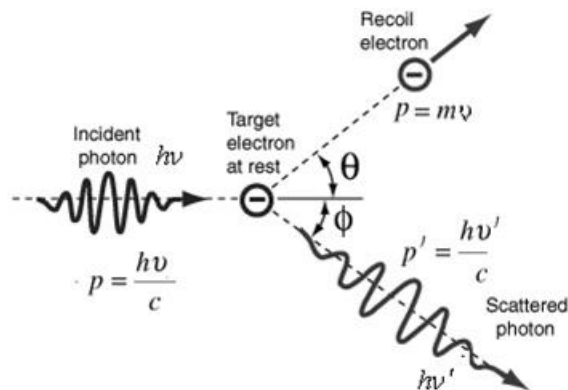


Figure 3:

5 Impulsoperatoren

Impulsoperatoren er sentral i kvantemekanikken. Impulsoperatoren deriverer en gang, og behandler da lineær impuls.

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (6)$$

6 Hamilton operatoren

Hamilton operatoren er, i likhet med impulsoperatoren, sentral i kvantemekanikken. Den brukes på funksjoner og deriverer to ganger med hensyn på de variablene funksjonen er avhengig av og legger til potensialet.

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (7)$$

7 Hermetiske operatorer

Det er veldig viktig i behandlingen av uttrykk i kvantemekanikken, at operatorene som brukes er hermetiske. Dette kommer fra at måleresultater må være

reelle.

$$\langle F \rangle = \langle F \rangle^* \quad (8)$$

En definisjon av en hermetisk operator kan gis ved

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1^*) \quad (9)$$

Dette gjør at operatorer kan flyttes enklere i ligninger, for å kunne bevise/komme frem til resultater enklere.

8 Normering

Ettersom sannsynligheten for å finne partikkelen et sted i rommet, må være lik 1, er det viktig at vi normerer bølgefunksjonen slik at

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1 \quad (10)$$

Dette kan gjøres ved normeringskonstanter som settes foran de ulike stasjonære tilstandene bølgefunksjonen er satt sammen av, slik at dette stemmer. Derfor kan en superposisjon av flere Ψ ofte ha rare konstanter.

Videre er da forventningsverdien til en observerbarstørrelse F gitt ved

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau \quad (11)$$

9 Kommutatorer

En annen ting som er viktig er rekkefølgen på kvantemekaniske operatorer. For to operaterer \hat{A} og \hat{B} er dette slik de kommuterer. Produktet her kalles da kommutatoren av de to operatorene

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (12)$$

For eksempel er kommutatoren av $x\hat{p} = i\hbar$. Viktig å huske at kommutatorer brukes *på funksjoner*. slik at når man skal finne en kommutator, bør man skrive

$$[\hat{p}, r]f(x, y, z) = (\hat{p}\hat{r} - \hat{r}\hat{p})f(x, y, z). \quad (13)$$

Husk også hvordan kjerneregelen vil brukes, for å komme frem til kommutatoren. Det som til slutt står foran $f(x, y, z)$ vil være kommutatoren.

10 Kronecker Delta

En viktig og fin liten sak er et Kronecker delta. Dette er gjør en hel del regning veldig enkelt. Et kronecker delta er en funksjon som enten er null eller en og beskriver ortogonale funksjoner. Kan enklest se ved denne forventningsverdien

$$\langle \Psi_n, \Psi_m \rangle = \int \Psi_n^* \Psi_m = \delta_{nm} \quad (14)$$

Denne funksjonen er altså lik 0 når $n \neq m$ fordi Ψ_n og Ψ_m er ortogonale lineærkombinasjoner av hverandre. Når $n = m$ er $\delta_{nn} = 1$ fordi de må være normerte.

11 Egenfunksjoner og egenverdier

Om denne relasjonen kan oppfylles

$$\hat{F}\phi_n = f_n\phi_n \quad (15)$$

Som vil si at $\hat{F}\phi$ er proporsjonal med ϕ og f_n er en konstant tallfaktor, er ϕ_n en egenfunksjon for operatoren \hat{F} og f_n er en egenverdi til \hat{F} . Denne er svært viktig for den tidsuavhengige Schrödinger ligningen.

En eksamensoppgave sett flere steder er spørsmål som dette:

Til hvilke operatore er $\Psi(x, y, z) = \sin(kx + kz)\cos(ky)$ en egenfunksjon?

Her får man flere operatore å velge mellom. Husk at for sinus og cosinus må det deriveres to ganger for å komme tilbake til sinus og cosinus. Ta for eksempel Hamilton operatoren:

$$\hat{H}\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2(\Psi) = \frac{-\hbar^2}{2m}(-k^2\sin(kx+kz)\cos(ky) - k^2\sin(kx+kz)\cos(ky) - k^2\sin(kx+kz)\cos(ky)) = \frac{3\hbar^2k^2}{2m}\Psi \quad (16)$$

Husk alltid at det må være en konstant! Hvis ikke vil det ikke være en egenfunksjon.

12 Utvikling etter egenfunksjoner

Det antas at en egenfunksjon til en hermetisk operator danner et fullstendig sett. Dvs at en tilstrekkelig regulær og kvadratisk integrerbar funksjon, les Ψ , kan representeres som summen av egenfunksjoner.

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad (17)$$

som videre gir en meget beilelig måte å finne denne konstanten c_n fordi ved å multiplisere med Ψ_m^* får man:

$$\int \Psi_m^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})d^3r = \sum_n c_n \int \Psi_m^* \psi_n d^3r = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m \quad (18)$$

Videre kan man beskrive bølgefunksjonen som lineærkombinasjonen av dette

$$= \sum_n c_n \Psi_n \quad (19)$$

Det som er så flott her er at disse da står ortogonalt på hverandre og at det derfor blir et Kronecker Delta.

Man kan også si at om operatoren F er en størrelse, vil man få

$$\langle F \rangle = \sum_n |c_n|^2 f_n \quad (20)$$

Følgende setning kan da trekkes frem

Sannsynligheten for at en måling av F gir resultat f_n , når systemtilstanden er Ψ er $|c_n|^2 = |\int \Psi_n^* \Psi d\tau|^2$

13 Sannsynlighetsstrømtettheten

Et vanskelig ord. Det betyr i bunn og grunn at i et bestemt volum V er sannsynligheten for å finne en partikkel noe. Hvis denne sannsynligheten endres, må det bety at det er en strøm av sannsynlighet inn i volumet.

Dette er svært sammenlignbart med fluks og volumstrøm fra elmag og fluid.

Et tenkt volum V med tversnitt A med strømtetthet \mathbf{j} kan tenkes å ha en sannsynlighetsstrøm beskrevet av

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} \right] d^3r = 0 \quad (21)$$

Her vil den observante leser merke seg at det gir

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (22)$$

. Altså bevarelse av sannsynlighet, som kan vises men det tar jeg ikke med nå fordi jeg ikke gidder. En sammenheng alle oppegående studenter husker fra Elmag(ladning) og Fluid(masse). Som da gir et uttrykk for sannsynlighetstettheten:

$$\mathbf{j} = Re(\Psi^* \frac{\hbar}{mi} \nabla \Psi) \quad (23)$$

For situasjoner med dynamisk utvikling vil strømtettheten bli null og det som da er litt fett er at man trenger komplekse bølgefunksjoner :O

14 Schrödinger ligningen for partikkel i felt

Schrödinger ligningen er egentlig en beskrivelse av en bølgepakke. Denne bølgepakken kan være i et felt eller ikke, den eneste forskjellen er at feltet vil ha et potensial V

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi \quad (24)$$

15 TUSL

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (25)$$

E er en konstant, uavhengig av x

16 Stasjonære tilstander

kan beskrive en fri partikkel slik at $E = K, V(x) = 0$.

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \quad (26)$$

Ettersom en bølgefunksjon $\Psi(x, t)$ er satt sammen som en superposisjon av flere basis vektorer:

$\sum c_n \psi_n$ der n er antall basisvektorer ψ

og at ψ er symmetrisk om midtpunktet til integrasjonsintervallet for $n=1, 3, 5\ldots$

og antisymmetrisk for $n=2, 4, 6\ldots$ ser man at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_2 dx = 0 \quad (27)$$

fordi ψ_1 og ψ_2 er ortogonale.

Det er også verdt å merke seg at en superposisjon av to stasjonære tilstander gir en ikke-stasjonær tilstand.

17 Partikkel i boks/uendelig potensialbrønn

$$V(x) = 0, 0 < x < L; \quad V(x) = \infty, -L < x < L \quad (28)$$

Her får man bølgeligningen ved å løse

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (29)$$

slik at med grensebetingelsene $\psi(0) = 0$ og $\psi(L) = 0$ detter det en fin, saftig analytisk løsning

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right); \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2; \quad n = 0, 1, 2, 3\ldots \quad (30)$$

bare sånn i tilfelle

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{mv^2}{2} \quad (31)$$

for å finne fart...

sannsynligheten for å finne en partikkel i en stasjonær energitilstand n er gitt ved $|c_n|^2$ der $|c_n|^2$ igjen er gitt ved

$$|c_n| = \int \psi_n(x) * \Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \Psi(x, 0) dx \quad (32)$$

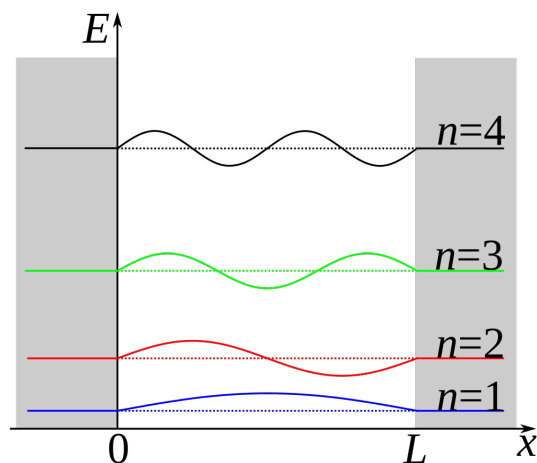


Figure 4:

Fikk en oppgave der man skulle finne romlig del. Da kan det være en fordel å huske at bølgelikningen må være null i endene, og være obs på om intervallet er fra $x = 0, x = L$ eller $x = -\frac{L}{2}, x = \frac{L}{2}$. Videre er det bare å sette inn i både cosinus og sinus og se hvilken som passer for den aktuelle situasjonen. Man vil typisk kunne bestemme den romlige delen ut ifra dette og hvilken eksiterte tilstand partikkelen er i, da man får n fra dette.

Sannsynligheten for å finne en partikkel innenfor et visst rom, blir da integralet av sannsynlighetstettheten over det rommet.

Summen av kvadratet av alle koeffisienter skal være lik 1. Dermed blir $P(E_n) = c_n^2$

18 En endelig potensialbrønn

$$V(x) = 0, \text{abs}(x) < L \quad V(x) = V_0, \text{abs}(x) > l \quad (33)$$

Her får man løsninger som avhenger av energien og potensialet som vist nedenfor.

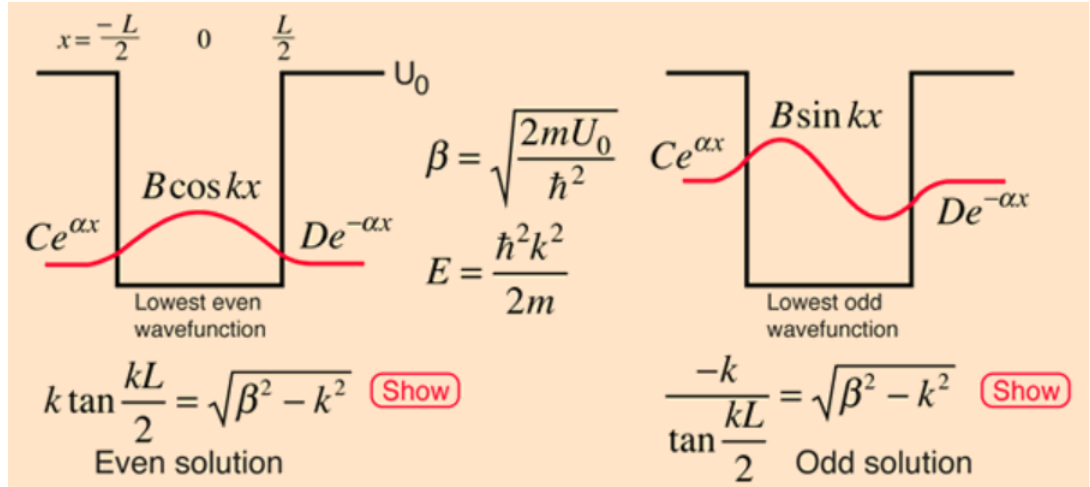


Figure 5:

Viktig å merke seg at Ψ er symmetrisk/antisymmetrisk omkring midten av brønnen. Det er hensiktsmessig å skalere slik at man har symmetripunktet som midtpunktet i integrasjonsintervallet. Vi ser at de klassisk tillatte områdene er innenfor brønnen med løsning på sinus/cosinus form, mens de utenfor dette området har eksponentielle løsninger. Ψ'' krummer inn mot x-aksen i brønnen og bort fra x-aksen utenfor og divergerer derfor ikke når x går mot uendelig.

Ser først på det klassisk tillatte området;

Her har vi $E > V_0$ bruker TUSL ($\hat{H}\Psi = E\Psi$) og får differensial ligningen

$$\Psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi = -k^2\Psi \quad (34)$$

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V)} \quad (35)$$

Som har generell løsning

$$\Psi = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad (36)$$

Så det klassisk forbudte:

$$\Psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\Psi = \kappa^2\Psi \quad (37)$$

$$\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V - E)} \quad (38)$$

Som har generell løsning

$$\Psi = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} \quad (39)$$

Så har vi kun et tilfelle til, der $E = V$ som gir $\Psi'' = 0$ og dermed $\Psi = Ax + B$. Det er svært komplisert å utlede videre her, så det gjør jeg ikke men det kan finnes på side 45-47 i PC Hemmer eller forelesningsnotater fra uke 7. Husk fra numerisk øving 1 at det over brønnen vil være et kontinuerlig spekter av energinivåer som stammer fra at det her er ubundne tilstander (les $E > V_0$). Legger ikke med plott fra oppgaven med flere brønner men det vil også her være et kontinuerlig energispekter over brønnene og såkalte 'kvasikontinuerlige energibånd' nede i brønnene. Dette er ikke lett å forstå men spør gjerne studass og tenk på krystallstruktur.

18.0.1 To eller flere brønner

Hvis man har to eller flere brønner etter hverandre, vil flere elektroner inngå i en og samme bundne tilstand.

I realiteten skal en brønn skildre et atom. For eksempel kan et to-brønn-system forestille N_2 gass, der hver brønn svarer til et elektron. Om man da skal bruke forrige avsnitt til å pønske, kommer man kanskje frem til at hver brønn kan ha to elektroner i hver bundne tilstand. Ettersom det er to atomer, vil det være hele 4 elektroner med samme energi. Dette for eksempel fordi det er plass til to elektroner i den laveste energitilstanden, i hvert atom.

Viktige punkter for oppgaveløsning 2-10ish brønner

- Her er det uansett hva, 2 elektroner i hvert bånd, hvis det er partall antall elektroner. Grunntilstand er nederst og det bygger seg opp.
- Elektroner kan være i et bånd som er utenfor den laveste brønnen. Den fysiske tolkningen blir at foreksempel klor nesten tar helt over et elektron fra hydrogen.

Mange, mange brønner:

- Antall brønner gir antall orbitaler i hvert bånd. 2 elektroner per romlige orbital. Antall brønner gir også antall tilstander per bånd.

19 Deltafunksjon-potensialet

Her har vi en ekstrem dypt og ekstremt smalt potensial (les brønn), som vi approksimerer til en Deltafunksjon fordi denne har et tydelig hopp der verdien av deltafunksjonen er uendelig. Altså går x mot null og V mot uendelig. Det er praktisk for ting som ladningstetthet, massetetthet, kraft i kollisjoner og andre scenario der ting skjer fort og ingenting skjer etterpå.

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \quad (40)$$

der alfa er positiv. Utenfor brønnen, altså der $x \neq 0$ får Schrödinger-likningen

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi(x) - \alpha\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (41)$$

eksponentielle løsninger for $E < 0$

$$\psi(x) = \psi(0)e^{\sqrt{-2mE}x/\hbar} \quad x < 0 \quad (42)$$

$$\psi(x) = \psi(0)e^{-\sqrt{-2mE}x/\hbar} \quad x > 0 \quad (43)$$

og for $E > 0$

$$\psi(x) = \psi(0)e^{\sqrt{2mE}x/\hbar} \quad x < 0 \quad (44)$$

$$\psi(x) = \psi(0)e^{-\sqrt{2mE}x/\hbar} \quad x > 0 \quad (45)$$

Integrer over x og finner energien (bedre utledning nedenfor under spredningskapittel)

$$E_\delta = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (46)$$

Her har potensialet en og kun en bunden tilstand uansett potensialets styrke. Dette gir mening fordi x blir så liten. Bølgefunksjonen for $E < 0$ blir

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} \quad (47)$$

Ganske komplisert for $E \geq V_0$ fordi da innebærer det refleksjon og transmisjon som vi ikke skal se på enda.

20 1D Harmonisk oscillator

Her står det mye dritt i boka. Det man kan ta med seg videre er hvordan Hamilton, bølgefunk og energinivåene funksjonen ser ut

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \quad (48)$$

Bølgefunksjonen vil ha kompliserte verdier, og inneholde Hermite-polynomene. Vi nøyer oss med grunntilstand og den generelle formelen.

$$\psi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-m\omega q^2/2\hbar} \quad (49)$$

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-m\omega q^2/2\hbar} H_n(q\sqrt{m\omega/\hbar}) \quad (50)$$

Der H_n betegner hvilket Hermite polynom vi setter inn. Vi ser at utenfor det klassisk tillatte området vil sannsynlighetstettheten avta eksponentielt.

Det generelle uttrykket, dimensjonsløst er

$$\psi(x) = (\text{polynom av } x) e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad (51)$$

der $x = \frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}}$

En oppgave der man får oppgitt at sannsynlighetstettheten avtar eksponentielt med faktoren $\frac{-x^2}{\xi^2}$ og lurte dermed på hva ξ var. Der var korrekt svar $\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Videre er energinivåene noe enklere...

$$E = (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (52)$$

I en oppgave for en 2D harmosc($\psi_{n_x n_y}$) ble det spurt om dreieimpuls. Først, hva er dreieimpulsens absolutte verdi for ψ_{01} ?

Først av alt. Dette er et 2D problem, så dreieimpulsen må være rettet ut av xy-planet. Her vet vi at ettersom n_x er null vil denne bølgefunksjonen ikke være proporsjonal med x . Men $n_y = 1$ gir at bølgefunksjonen her vil være proporsjonal med H_n som for $n = 1$ gir et førstegradspolynom av y . Dette kan vi da bruke. Ettersom vi bruker kulekoordinater vil $y = r \sin\theta \sin\phi$. Som nevnt er det kun normalt på planet som vil ha en innvirkning. Da står vi igjen med $\psi_{01} \propto y \propto \sin\phi = e^{i\phi} - e^{-i\phi}$. Dette er dermed en lineær kombinasjon av de to vinkelfunksjonene. Hvis man så ser på dreieimpulsen (i andre seff) i kulekoordinater, vil denne reduseres til

$$\hat{L}^2 = \frac{-\hbar^2}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \quad (53)$$

Videre kan vi se at $\theta = \frac{\pi}{2}$ fordi dreieimpulsen er normalt på xy-planet. Derfra kan vi bruke dreieimpulsoperatoren og vi får

$$\hat{L}^2 \psi_{01} = \frac{-\hbar^2}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} (e^{i\phi} - e^{-i\phi}) = \hbar^2 \psi_{01} \rightarrow |L| = \sqrt{L^2} = \hbar \quad (54)$$

Da er det lett å si noe om L_x, L_y, L_z . Dreieimpulsen kan kun være opp og ned z-aksen, dermed er $L_x = L_y = 0$. Videre er absoluttverdien forskjellig fra null, og dermed må L_z være USKARP. Vi kan si at L_z har verdien \hbar eller $-\hbar$ ettersom ψ er en lineærkombinasjon av de to vinklene. Det vil være like stor sannsynlighet for hver verdi, slik at forventningsverdien er null. Merk at det i oppgaven spørres om absoluttverdi og det er den vi kan si noe konkret om. Det at L_z har to mulige verdier kommer fra symmetrien, og gjør at vi kan si noe om forventningsverdien. Vi kan ikke si noe om L_z fordi den er uskarp.

21 Hydrogenatomet

Fra før bør man huske at

$$E = K + V, \quad E_1 = -13.6 \text{ eV} \quad (55)$$

I Bohrs hydrogenmodell er følgende viktig:

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad E_n = \frac{E_1}{n^2} = \frac{E_1}{(l+1+n_r)^2}, \quad E_1 = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 \quad (56)$$

der n som svarer til n i uttrykket

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (57)$$

og

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar c} \quad (58)$$

Viktig at her benyttes m som heltall, *ikke* som masse! Her har jeg brent med på å prøve å sette inn for n_r . Prøv helst med $\frac{E_1}{n^2}$, der n beskriver vilken tilstand elektronet er i. Hent n fra første tallet i R_{nl} . Skal prøve å beskrive dette bedre detaljert. Også verdt å merke seg konstanten

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{m\alpha} \quad (59)$$

Verdt å merke seg at $\psi \propto e^{\frac{-r}{a_0}}$ slik at sannsynlighetstetthetens maksimumspunkt ved å derivere $\rho = |\psi|^2$ For å finne der sannsynlighetstettheten er størst kan det være gunstig å bare sette inn for r av de ulike svaralternativene du har fått.

Radialtettheten for et kulesymmetrisk vil være sannsynligheten pr radialenhet. Det gir oss at $P(rad)dr = 4\pi r^2 \psi^2 dr$ som vi kan normere ved å integrere fra 0 til ∞ siden radiusen alltid må være større enn null. Maksimum finnes også her ved å derivere. Det er også praktisk at for kulesymmetri vil sannsynlighetstettheten være størst omkring sentrum, $r = 0$.

OBS! kan noen ganger være vanskelig å skille mellom når radialtettheten er $(r\psi)^2$ og når den er $4\pi r^2 \psi^2$ men tror det her er tryggest å forholde seg til kulesymmetri og det siste uttrykket. Når man skal finne maksimum o.l. vil dette uansett bli likt.

OBS OBS! Sannsynlighetstettheten er størst i null. Men denne radielle tettheten er ikke det. Dette er fordi selv om sannsynlighetstettheten er størst i null, vil et kuleskall nær origo være svært lite, og det er derfor lite sannsynlig at elektronet befinner seg der. Derimot om man beveger seg litt utover, vil kuleskallet bli større og selv om det er mindre sannsynlighetstetthet, vil arealet sørge for at den radielle tettheten blir større. Se tegning under.

Skal nå gi et eksempel som kan spare mye tid, når man skal finne maksimalpunktet til radialtettheten. Si at du får en $P_{rad} = (rR_{20})^2$. Dette uttrykket er svært stort og blir veldig knotete å derivere. Da bruker SME fra statistikk, og hukser at $\ln(f)$ har samme makspunkt som f .

$$(rR_{20})^2 = r^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}a_0^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{\frac{-r}{2a_0}} \right)^2 \quad (60)$$

tar logaritmen

$$\ln(r^2) - \ln(\sqrt{2}a_0^{\frac{3}{2}}) + \ln\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 - \frac{2r}{2a_0} \quad (61)$$

Deriverer mhp r , setter lik null og løser for r . Det blir kanskje to mulige svar her. Da kan du grafe funksjonen i Geogebra og se hva som er makspunktet, og hvilket punkt det matcher med av løsningene du har fått.

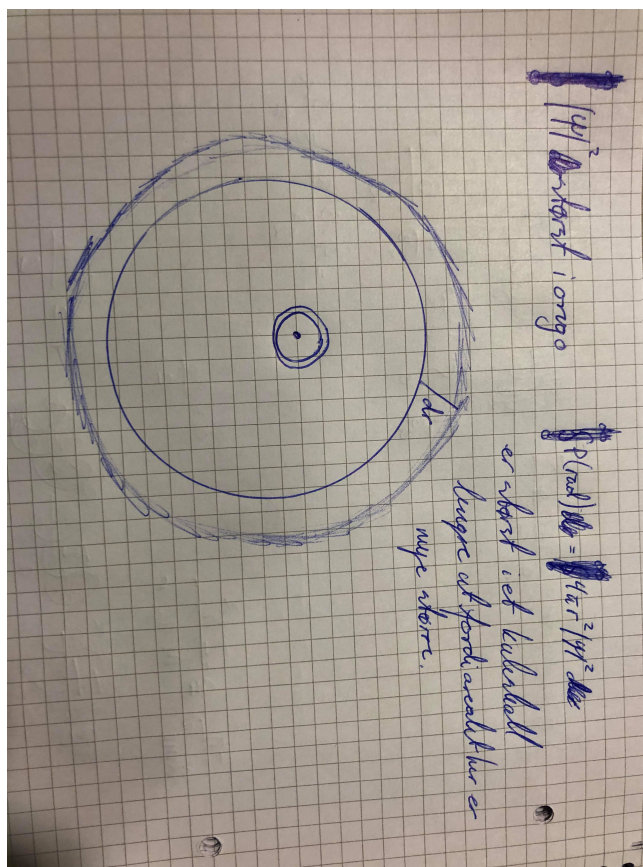


Figure 6: Yeboi

Noteres også at Bohr-radien, a_0 , er 0.529\AA og at 2-s tilstanden til hydrogen gir svært lang levetid. Det siste skyldes dreieimpulsbevarelse, fordi fotoner er en spinn-1-tilstand, er det forbudt å gå ned til 1s, og det koster mye å gå et hakk opp.

21.0.1 Oppgaver

Oppgave om vinkel mellom L -vektor og z -akse fra eksamen 2020 dro meg langt tilbake inn i matte2. Først må du gjøre om til KULEKOORDINATER. Så bruker man at L_z svarer til z i koordinatsystemet og total L svarer til radiusen.

Man får så oppgitt verdier for l og m som gjør at man kan finne verdien til L_z og L . Så kan man bruke

$$L_z = m\hbar = z = r\cos\theta \quad L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = r \rightarrow \cos\theta = \frac{z}{r} = \frac{L_z}{L} \quad (62)$$

og løser for θ . Tidligere har jeg vært litt fast bestemt på at θ ligger i xy-planet... Det er selvfølgelig feil i dette tilfellet. Sjekk alltid hvordan z er definert og se for deg vinklene, før du antar slike ting. Husk så at vinkelen som går fra topp til bunn av z -akse ligger $0 \leq \theta \leq \pi$ og at vinkelen i xy-planet naturlig nok $0 \leq \phi \leq 2\pi$

Vekting av tyngdepunkt Dette er litt tricky. Man har på formelarket, mange nyttige formler som ofte kan gi svaret bare ved observasjon. Her kommer litt begrunnelse: La oss si du skal finne tyngdepunktet til tilstanden

$$\psi_{200} + \frac{1}{\sqrt{2}}[(i+1)\psi_{21-1} + (i-1)\psi_{211}] \quad (63)$$

Det kan virke umulig. Men, bruk proporsjonalitet. Vi kan se at den radielle funksjonen $R(r)$ ikke vil spille noen rolle fordi den er symmetrisk om origo og bare avhengig av r . Dermed faller ψ_{200} helt ut av beregningene. En annen observasjon er at $\frac{1}{\sqrt{2}}$ leddet forteller oss at begge disse to tilstandene er like sannsynlige.

Vi kan så konsentrere oss om Y_{lm} og se fra formelarket at

$$Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi} \quad (64)$$

Dette gir oss at tilstanden vi har fått oppgitt er proporsjonal med følgende:

$$(i+1)\psi_{21-1} + (i-1)\psi_{211} \rightarrow iY_{1-1} + Y_{1-1} + iY_{11} - Y_{11} \quad (65)$$

$$iY_{1-1} + Y_{1-1} + iY_{11} - Y_{11} \propto i\sin\theta e^{-i\phi} + \sin\theta e^{-i\phi} - (i\sin\theta e^{i\phi} - \sin\theta e^{i\phi}) \quad (66)$$

Som ved litt omskriving gir oss

$$2\sin\theta\sin\phi + 2\sin\theta\cos\phi = 2\frac{y}{r} + 2\frac{x}{r} \quad (67)$$

Videre har vi jo notert at konstanten $\frac{1}{\sqrt{2}} = c_1 = c_2$ slik at det er lik sannsynlighet for x som for y . Dette gjør at tyngdepunktet må ligge på linjen $y = x$ i xy-planet.

Det bør være klart at dette kan svares på mye fortere ved hjelp av formelarket som blir utgitt, der de kartesiske komponentene av Y_{lm} er oppgitt, og det da bare blir litt addering osv. Men! Key-takeaway er at proporsjonalitet er gull.

21.0.2 Coloumbpotensialet

Et potensial mellom en ladning Ze som er fast i origo (nukleus) og et bevegelig elektron med ladning $-e$ er definert som

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 a} \quad (68)$$

der a er avstanden mellom ladningene(radius). Dette gir opphav til Coloumbkraften som er lik sentripetalakselerasjonen:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 a^2} = \frac{m_e^2 v^2}{\mu a} \quad (69)$$

Fra antagelsen til Bohr om at dreieimpulsen var kvantisert får vi

$$mva = l(l+1)\hbar \quad (70)$$

som gjør at vi kan løse for farten eller radiusen.

21.0.3 Hydrogenliknende system

Man kan tillate seg å approksimere Bohrs atommodell til hydrogenliknende system. For eksempel et atom med kun et elektron i bane rundt seg. Da vil det selvfølgelig være visse endringer, og som spurt på eksamen i 2020, ville man vite radien til ulike system. Generelt vil svaret være, som utledet i øving 9/10, dette:

$$a = \frac{n^2 a_0}{Z} \frac{m_e}{\mu} \quad (71)$$

der a er radien i det hydrogenliknende systemet, a_0 er Bohr-radien, Z er antall protoner i det hydrogenliknende atomet(atomnummer), n er tilstanden og μ er den reduserte massen. Siden massen til atomkjernen gjerne er mye større, kan til og med dette forenkles...

$$a = \frac{n^2 a_0}{Z} \quad (72)$$

fordi den reduserte massen blir tilnærmet lik den minste massen i topartikkel-systemet.

Videre er farten av interesse. Med litt triksing av ulike formler ovenfor, ender man til slutt opp med en digg uttrykk for farten også:

$$v = \frac{\hbar n}{m_e a} = \frac{\hbar Z}{m_e n a_0} \quad (73)$$

Ved å bruke Schrödingerlikningen følger en helt grusom utledning av energinivåene. De blir som følger:

$$E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{Z^2 e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} \approx -\frac{m_e}{2\hbar^2} \frac{Z^2 e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} \quad (74)$$

Vi vet jo at $E_1 = -13.6\text{eV}$ og derfor gir det mening at alle energinivåer er negative. Dette følger av integrasjon av kraften fra $V_0 \rightarrow V_\infty$ der man antar at $V_\infty = 0$. Energien er et mål på hvor mye energi som kreves for å bryte bindingen mellom elektronet og nukleusen. Husk å sjekk om man kan approksimere $\mu = \frac{Mm_e}{M+m_e} \approx m_e$, fordi for systemer der elektronet er i kontakt med f.eks et positron som har samme masse, vil dette bli en helt feil antakelse. For mer se Hydrogen liknende systemer klikk her :p

Her er det gjort en rekke approksimasjoner er gjort, men det er sånn det er å være fysiker :)

Perturbation theory...

22 Isotrop 3D oscillator

Hamilton operatoren tar formen

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}^2 \quad (75)$$

Energien er lik som for oscillator i 1D, men her får man bidrag fra alle dimensjoner

$$E = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega + (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega \quad (76)$$

Man vil her få energiegentilstander på formen $\psi_{n_x, n_y, n_z} = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$ som alle vil ha en egen energieigenverdi, for eksempel tilsvarer $\psi_{n_x}(x)$ en egenenergi i 1D oscillator. Dette gjør at man får tre forskjellige energieigenverdier for samme ψ , altså degenerert.

Antall degenerasjonsnivå, altså antall tilstander med energi E_N

$$g_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2} \quad (77)$$

For å finne degenerasjonsgraden bør man finne ut hvilke tall n_x, n_y, n_z kan være, og hvor mange kombinasjoner av disse man kan lage! I en oppgave var spørsmålet for en 2D harmosc hvilken romlig degenerasjon som svarte til energinivået $E = 13\hbar\omega$. Korrekt fremgangsmetode her blir å se at $E = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega = 13\hbar\omega$ slik at $n_x + n_y = 12$ dette gir mulige kombinasjoner $(0, 12)(1, 11)(2, 10)(3, 9)(4, 8)(5, 7)(6, 6)(7, 5)(8, 4)(9, 3)(10, 2)(11, 1)(12, 0)$. som er 13 muligheter, slik at man har romlig degenerasjonsgrad 13. Dette tilsvarer antall romlige orbitaler. Da må man huske at to elektroner med motsatt spinn kan befinne seg i samme orbital, slik at total degenerasjonsgrad blir $13 * 2 = 26$.

Degenerasjonsgraden er ikke lik g_N . Dette vil være nivået.

Blir man spurt om antall energiegentilstander i en oppgave, må man legge sammen alle g_N fra de ulike N . Dvs er $N \leq 4$ må man finne antall energiegentilstander for $N = 0, N = 1, N = 2, N = 3, N = 4$.

Hva blir et systems totale energi, med 10 ikke vekselvirkende elektroner, når systemet inntar lavest mulig energi?

Her har hver romlig tilstand to elektroner fordi et vil ha spinn opp og det andre ned. Det gir:

- $(0, 0, 0)$ her kan det være to elektroner med ulik spinn
- $(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)$ her kan det være seks elektroner, altså to i hver posisjon med ulik spinn
- $(1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1)$ Her vil de resterende 2 elektronene fordele seg.

Slik at vi får energibidrag:

$$2(0 + \frac{3}{2})\hbar\omega + 6(1 + \frac{3}{2})\hbar\omega + 2(2 + \frac{3}{2})\hbar\omega = 25\hbar\omega \quad (78)$$

OBS Dette var for harmonisk oscillator i $3D$, for eksempel i en boks, vil de romlige tilstandene starte i 1. de blir $(111), (112)/(121)/(211)$ og energinivåene vil være $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$.

23 Tilstandstetthet

Se for deg et rom med n_x, n_y, n_z langs aksene. Det vil da ha en kvantetilstand pr volumenhet. Dermed kan man utlede tilstandstettheten. Dette gir et nyttig resultat fordi antall tilstander med energi lavere enn $E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2})$ vil da betegne volumet til dette rommet i den positive oktant. For å utlede det hele, brukes en huskeregel. Et volum beskrevet av d^3rd^3p har et antall d^3rd^3p/h^3 tilstander. Husk, $p = \sqrt{2mE}$. Ved å integrere får man at $\int d^3r = V$ og at $\int d^3p = 4\pi \int p^2 dp$ som gir $N(E)$, altså antall tilstander med lavere energi enn E . Tettheten finnes da ved å derivere $N(E)$ og man får dette uttrykket:

$$g(E) = N'(E) = 2\pi(\frac{2m}{\hbar^2})^{\frac{3}{2}}VE^{\frac{1}{2}} \quad (79)$$

Generelt kan tilstandstettheten sies å være proporsjonale med $g(E) \propto E^{\frac{1}{2}D-1}$ der D er antall dimensjoner.

24 Ehrenfests teorem

Forbinder kvantemekanikkens mikroskopiske tilnærming til klassisk mekanikk makroskopiske. Går til grenseflatene i begge grenene for å sjekke at de stemmer. Dette gir noen kjekke formler:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V \quad (80)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (81)$$

25 Sfæriske harmoniske

Skal ikke gå så veldig inn på det da eksamensoppgavene ikke er så vanskelige, men det kan være greit. De sfæriske harmoniske, beskriver vinkelavhengighet til bølgefunksjonen. De er egenfunksjonene til vinkeldelen Y_{lm} og vil utgjøre et fullstendig sett av ortonormale vektorer. De vil være nyttige for å løse diffligninger, og her kommer et bilde fra forelesningsnotatene for litt intuisjon av hvordan tallene l, m svarer til plot.

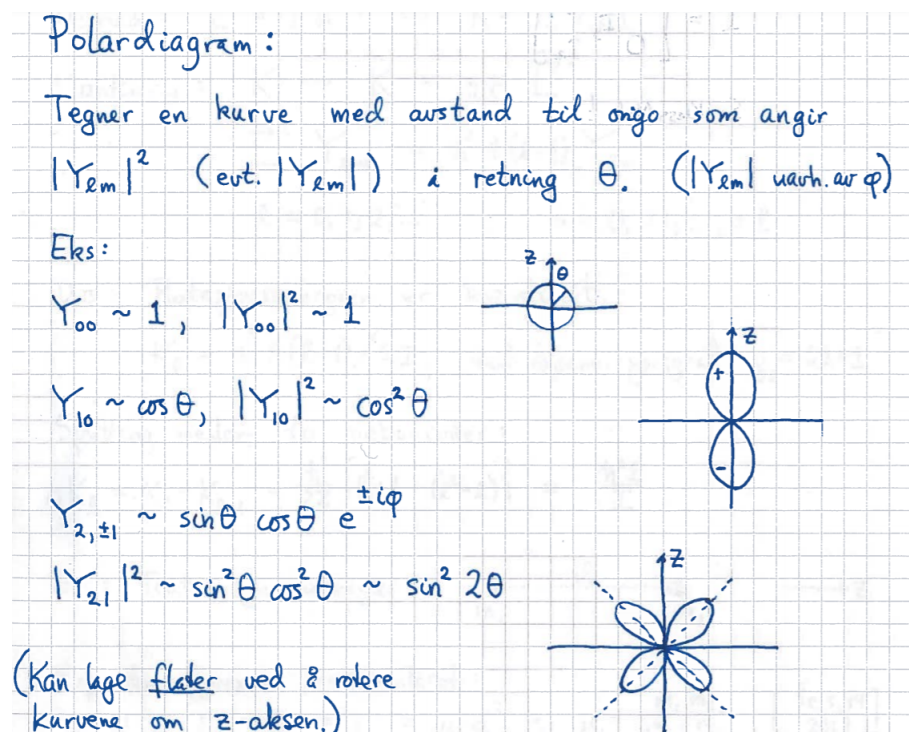


Figure 7: vagina

En oppgave fra en øving, gikk ut på å bestemme hvor mange mulige orbitaler med $n = 3$ som kunne eksistere et foton ned til tilstand ψ_{211} . Dvs vi skal fra tilstand ψ_{3lm} til ψ_{211} med betingelsene $\Delta l = \pm 1$ og $\Delta m = 0, \pm 1$. Da må man bare addere og subtrahere selvfølgelig. $\psi_{2+1,1\pm 1,1+0/\pm 1}$ som gir følgende muligheter: $\psi_{300}, \psi_{320}, \psi_{321}, \psi_{322}$ altså totalt 4 muligheter.

26 Dreieimpuls

En kulesymmetrisk bølgefunksjon svarer til en tilstand med null dreieimpuls. Det som avgjør størrelsen på dreieimpulsen er variasjonen i vinkelretningen. Som man kan se nedenfor avhenger kvadratet av dreieimpulsen kun av vinklene. Det betyr at $[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{L}}^2]$ og $[\widehat{H}, \widehat{L}_z]$ kommuterer. Det er svært viktig at man husker moralen bak dreieimpuls. Den er at størrelsen til dreieimpulsen, $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $|L|$, kan ha skarpe verdier med energien. Dette følger av kommutasjon med Hamilton-operatoren. Videre kan også \widehat{L}_z ha skarpe verdier med energien fra kommutasjon. Derimot kommuterer ikke observablene L_x, L_y, L_z slik at de ikke kan være skarpe samtidige, foruten når (størrelsen til) dreieimpulsen er null.

Det vil si at dreieimpulsen-operatoren \widehat{L} ikke har noen egenfunksjoner og partikkelen kan ikke ha en veldefinert dreieimpuls med skarp retning. \widehat{L} kan ikke måles skarpt, bare en komponent kan være skarp samtidig.

Ettersom dreieimpulsen i de ulike retningene x, y, z ikke kommuterer, kan de ikke være skarpe samtidige. Men siden størrelsen av dreieimpulsen, $\widehat{\mathbf{L}}^2$, kommuterer med retningsdreieimpulsene, kan en av retningene og størrelsen ha skarpe verdier samtidig.

Merk at dette altså gjelder for isotropt potensial, som er det vi forholder oss til i innføring til kvante.

Nedenfor følger mange formler...

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (82)$$

$$\widehat{L}_z = \widehat{x}\widehat{p}_y - \widehat{y}\widehat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (83)$$

$$\widehat{L}_x = \widehat{y}\widehat{p}_z - \widehat{z}\widehat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (84)$$

$$\widehat{L}_y = \widehat{z}\widehat{p}_x - \widehat{x}\widehat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (85)$$

$$[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{L}_{x/y/z}] = 0 \quad (86)$$

$$[\widehat{L}_z, \widehat{L}_y] = i\hbar \widehat{L}_x, \quad [\widehat{L}_x, \widehat{L}_y] = i\hbar \widehat{L}_z, \quad [\widehat{L}_z, \widehat{L}_x] = i\hbar \widehat{L}_y \quad (87)$$

En fin måte å skrive om Hamilton-operatoren i et kulesymmetrisk potensial er

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\widehat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r) = \widehat{K}_r + \widehat{K}_L + V(r) \quad (88)$$

dvs

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\widehat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (89)$$

Vi sier at dreieimpulsen er kvantisert og egenfunksjonene samt energieigenverdiene til $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og \widehat{L}_z er

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 Y_{l,m}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (90)$$

$$\widehat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad l \leq m \leq l \quad (91)$$

Nå kommer en fin observasjon fra en oppgave om dreieimpuls jeg gjorde. La oss si vi har en partikkel i et isotropt potensial, med dreieimpuls $L^2 = 2\hbar^2$. Den Vi har tidligere funnet det klassisk tillatte området, ved å sette $E \geq V$. I dette tilfellet, vil dreieimpulsen gi et bidrag til potentialet, og gi et effektivt potensial

$$V_{eff} = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (92)$$

Dette kommer av utledningen for $u(r) = rR(r)$, PC Hemmer s.100. Den fysiske tolkningen er at om en partikkel har en dreieimpuls, vil denne gi en sentripetalkraft, som hindrer partikkelen i å komme helt inn i orgio.

Her kommer oppgaven: Isotropt potensial $V = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$, $L^2 = 2\hbar^2$ som gir $l = 1$. Får oppgitt at $E = \frac{5\hbar\omega}{2}$ og $L_z = 0$ betyr at dreieimpulsen ligger i xy-planet. Hva er da klassisk tillatt område $r_i < r < r_y$? Den løses slik: Vi ser da at vi får en dreieimpuls i xy-planet, som vil ligge mellom to sirkler med r_i og r_y . Vi vet at det er klassisk tillatt når $E \geq V$, og med $l = 1$ får vi at

$$V_{eff} = \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{\hbar^2}{mr^2} \quad (93)$$

Så setter vi opp ulikheten og løser andregradslikningen for r^2 . Svaret skulle komme i enheter av $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ og da gjelder det bare å trikse litt.

26.1 Paritet

$$\widehat{P} Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}$$

27 Orbitaler

En orbital tilsvarer et rom som elektroner kan befinne seg i, ut fra energien til elektronene. Siden elektron har spinn kan to elektroner okkupere samme orbital, når de har motsatt spinn. Hver orbital er definert fra tre kvantetall, n, l, m .

- n - det prinsipale tallet. Det forteller oss hvilken energitilstand vi er i.

- l - det asimultane tallet. Det bestemmer formen på orbitalen, og gir oss derfor dreieimpulsen.
- m - det magnetiske tallet. Det bestemmer hvor mange orbitaler vi har og deres form. Dette tallet avhenger av l .
- det kan være greit å merke seg denne sammenhengen: $l=0 \rightarrow m=0$ $l=1 \rightarrow m=-1, 0, 1$ $l=2 \rightarrow m=-2, -1, 0, 1, 2$ Det finnes en utvalgsregel for energitilstander. Hvis et hydrogenatom er i en tilstand med l og m , vil det ikke være mulig å endre l med det samme, eller så forblir m den samme verdien.

27.1 Paritet

Paritet vil speile bølgefunksjonen om origo. Hvis funksjonen er like vil den forbli den samme, men hvis funksjonen er odde vil den bli motsatt. Det gjelder også for egenverdiene.

28 Erigert rotator

Enhver person med seg selv vet at den klassiske rotasjonsenergien til et stivt legeme er gitt ved

$$K = \frac{1}{2} I \omega^2 \quad (94)$$

og at dreieimpulsen er

$$\mathbf{L} = I \omega \quad (95)$$

Dette kan så løses for å finne

$$K = \frac{L^2}{2I} \quad (96)$$

som betyr at rotasjonsenergien er kvantisert. Det følger fra

$$\mathbf{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \quad (97)$$

som igjen fører til at

$$\mathbf{K} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad (98)$$

og en degenrasjonsgrad $g_l = 2l + 1$ Verdt å merke seg at

$$\Delta K = K_l - K_{l-1} = \frac{\hbar^2}{2I} ((l^2 + l) - ((l-1)^2 + (l-1))) = \frac{\hbar^2 l}{I} \quad (99)$$

Det kan være verdt å huske, siden du er så glemsk, at man for toatomige molekyler bruker den reduserte masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ i treghetsmomentet. På tross av dette funker det tydeligvis å bare bruke hver enkelt masse og summere opp $I = \sum_i m_i r_i^2$. Videre vil jeg si at slik vi husker fra termisk, vil rotasjonsenergi ved romtemp være så stor at den vil tas med i beregning av varmekapasitet.

Dette sjekkes lett ved å sammenligne verdien for K med $k_B T$ ved romtemperatur. Sist og minst, vil $l = 0$ i den laveste energitilstanden.

For en dimer vil som regel treghetsmomentet være

$$I_0 = \mu d^2 \quad (100)$$

der d er bindingslengden, ikke forveksle med radius.

29 Dr. Morse-potensial

I et morse potensial er det rimelig å anta små utsving slik at $V(x)$ kan forenkles. Samtidig er dette tilnærmet lik et harmonisk potensial $\frac{1}{2}m\omega^2(x-d)^2$ der m er molekylets reduserte masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. Det er ganske greie oppgaver men hold tunga rett i munnen. Husk at $(x-d)$ er utsvinget fra likevekt og at det derfor kan strykes mot det tilsvarende harmoniske potensialet som vil ha samme utsving.

OBS! Ikke la deg lure ved tricky notasjon! Typisk vil κ skrives slik

$$\kappa = 21.6 nm^{-1} = 21.6 * 10^9 m^{-1} \quad (101)$$

og det er lett å tro det er motsatt. Skriv om dette ved starten av oppgaven.

30 Pauliprinsippet og energinivåer

I et tenkt område, typisk boks eller flate, med lengde L , vil elektroner ha energinivåer $E = \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2}$. Da vil man finne antall elektroner på flaten, ved å gange tettheten med arealet. Derfra vet man at siden elektroner kan ha spinn opp eller ned, vil man ha halvparten så mange romlige tilstander som elektroner. Antall romlige tilstander tilsvarer $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = n^2$ og vil fordele seg likt. Dette gir da en jevnt fordelt, sirkelsymmetrisk elektronflate med radius n . Arealet av denne er lik antall romlige tilstander, og man kan da løse for å finne n^2 , som igjen kan gi energinivået i den høyeste tilstanden. Merk her at det også kan være en sirkel. Samme prinsipp men antall elektroner må finnes ved å bruke formler for areal av kuleflat $A = 4\pi r^2$

31 Spredning av ben og Tunneleffekt

Her sendes en bølge inn mot en potensialbrønn/barriere. Noe vil transmitteres noe vil reflekteres. Energinivåene kan betraktes som en partikkel i boks og situasjonen er ganske lik. Det kan være en barriere eller flere.

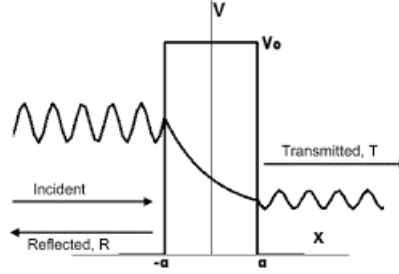


Figure 8: Homo

Alle stråler, bortsett fra innfallende har retning bort fra potensialet. Her, hvis ikke $V(x)$ har et sprang, må $\psi, \psi' = \frac{d\psi}{dx}$ begge være kontinuerlige overalt. Vi ser kun på stasjonære spredninger. Partiklene oppfører seg som frie, slik at vi får Schrødingelikningen:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi(x) \quad (102)$$

med energier

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (103)$$

der k er bølgetallet som kan finnes ved innsetting av grensebetingelser. Det gir

$$\Psi(x, t) = A_{\pm} e^{i(\pm kx - \hbar k^2 t / 2m)} \quad (104)$$

fra den klassiske

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - Et/\hbar)} \quad (105)$$

Vi er så interesserte i forholdet mellom den transmitterte og innfallende strømtettheten, samt den reflekterte og innfallende. Dvs:

$$T = \frac{j_t}{j_i}, \quad R = \frac{j_r}{j_i}, \quad T + R = 1 \quad (106)$$

der

$$j_{\pm} = \pm \frac{\hbar k}{m} |A_{\pm}|^2 \quad (107)$$

og

$$T = |t|^2, \quad R = |r|^2 \quad (108)$$

der $|t|^2$ og $|r|^2$ er sannsynligheten for hhv transmisjon og refleksjon.

Løsningen for Schrødingelikningen over en potensialbrønn er som følger:

$$e^{ikx} + r e^{-ikx}, \quad x < 0 \quad (109)$$

$$a e^{iqx} + b e^{-iqx}, \quad 0 < x < L \quad (110)$$

$$te^{ikx}, x > L \quad (111)$$

der

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad q = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \quad (112)$$

Positivt ikx legg gir retning mot høyre. Man kan finne de ulike konstantene ved grensebetingelsene

$$1 + r = a + b \quad (113)$$

$$ik - ikr = iqa - iqb \quad (114)$$

$$ae^{iqL} + be^{-iqL} = te^{ikL} \quad (115)$$

$$iqae^{iqL} - iqbe^{-iqL} = ikte^{ikL} \quad (116)$$

Der disse fremkommer som resultat av at man må sjekke kontinuitet av Ψ i $x = 0, x = L$ og av $\frac{d\Psi}{dx}$ i $x = 0, x = L$ som er et krav til Ψ .

For en potensialbarriere blir det endringer i eksponentene, som er rimelig enkle å komme frem til om man setter opp Schrödingerligningen. Da får man en PDE slik:

$$\psi'' = -k^2\psi \quad (117)$$

med løsningene

$$\psi = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad (118)$$

eller

$$\psi'' = k^2\psi \quad (119)$$

med løsningene

$$\psi = Ae^{kx} + Be^{-kx} \quad (120)$$

Avhengig hhv om $E > V_0$ (klassisk tillatt) eller $E < V_0$ (klassisk forbudt).

Vi skal nå se på transmisjonssannsynlighet. Når $E \geq V_0$ vil fortsatt partikkelen ha en sannsynlighet for å reflekteres. Dette vil ikke skje i klassisk mekanikk, og kalles anti-tunnelering. Det samme gjelder motsatt, noe vil alltid trenge gjennom, altså tunnelere.

Transmisjonskoeffisienten er ofte forenklet slik

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)^2 \sin^2(qL)} \quad (121)$$

der

$$q = \frac{\sqrt{2m_e(E - V_0)}}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar} \quad (122)$$

Derfra er det visse situasjoner som er aktuelle;

- Når $E = V_0$ vil altså $q = 0$. Det er da lett å tro at $T = 1$. Dette er ikke tilfellet fordi man får dette uttrykket i nevneren.

$$1 + \frac{1}{4} \frac{k^2}{q^2} \sin^2(qL) \quad (123)$$

Som når q går mot null vil ble grenseverdien

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{\sin^2(qL)}{q^2} \quad (124)$$

som man kan derivere to ganger for å få lik L^2 . Derfra vil man finne $T = \frac{1}{1 + \frac{k^2 L^2}{4}}$.

- Man har dog situasjoner når $T = 1$. Vi ser at for at dette skal stemme må

$$\frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right)^2 \sin^2(qL) = 0 \quad (125)$$

slik at $qL = n\pi$. Her er det ikke vits i å løse for $(\frac{q}{k} - \frac{k}{q})^2 = 0$ da dette gir V_0 som ikke er relevant her.

$qL = n\pi$ gir altså helt bestemte energier der $T = 1$ og de energiene er gitt ved

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} \pm V_0, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad +V_0 \text{ for potensialbarriere} \quad (126)$$

Ved $E < V_0$ er transmisjonskoeffisienten forenklet slik:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right)^2 \sinh^2(\kappa L)} \quad (127)$$

med motsatt fra ista:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m_e(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar} \quad (128)$$

Her er det vanskeligere enn når $E \geq V_0$ så vi ser på grenser. Når $E \ll V_0$ vil altså $\frac{k}{\kappa} = 0$ som er den første forenklingen. Videre når $\kappa L \gg 1$ vil

$$\sinh^2(\kappa L) = \left(\frac{e^{\kappa L} - e^{-\kappa L}}{2} \right)^2 = \left(\frac{e^{\kappa L}}{2} \right)^2 = \frac{e^{2\kappa L}}{4} \quad (129)$$

Det gir etter mye grensesetting og ved å huske at $\kappa \gg k$ en T slik

$$T \approx \frac{16k^2}{\kappa^2 e^{2\kappa L}} = \frac{16k^2 e^{-2\kappa L}}{\kappa^2} \quad (130)$$

Dette er svært gunstig, fordi da vil $T \propto e^{-\frac{L}{\xi}}$ og man finner ξ ved å løse

$$2\kappa L = \frac{L}{\xi} \quad (131)$$

Videre kan vi ved la L gå mot null samtidig som V_0 og la $\beta = V_0 L$ få et deltapotensial $V(x) = \beta\delta(x)$. Som sett på tidligere kan vi sette opp Schrödinger og få

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi''(x) - \beta\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (132)$$

Her er ikke $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ kontinuerlig i $x = 0$. Problematisk... Husk så at et sprang i den deriverte av bølgefunksjonen, tilsvarer deltafunksjonen. Vi setter så en $\pm\epsilon$ som går mot null som våre integrasjonsgrenser. (Vi basically bare integrerer begge sidene)

$$\frac{-\hbar^2}{2m}[\psi(+\epsilon)' - \psi(-\epsilon)'] = \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \beta\delta(x)\psi dx + E_\delta \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi dx \quad (133)$$

Husk så at Dirac-Delta funksjonen er lik 0 overalt, foruten $x=0$, der den er uendelig. Vi vet også at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1 \quad (134)$$

og at

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0) \quad (135)$$

Energi-integralet blir null og ved å derivere fra bølgefunksjonen gitt tidligere får man

$$\frac{-\hbar^2}{2m}[\psi(0)' - \psi(0)'] = \beta\psi(0) = \frac{-\hbar^2}{2m}[(-\sqrt{2mE_\delta}\frac{x}{\hbar}\psi(0)) - (\sqrt{2mE_\delta}\frac{x}{\hbar}\psi(0))] \quad (136)$$

Deler på $\psi(0)$ og står igjen med at

$$\beta = \frac{2\hbar^2\sqrt{2mE_\delta}}{2m\hbar} \quad (137)$$

Som løses for E og får dermed at

$$E_\delta = \frac{m\beta^2}{2\hbar^2} \quad (138)$$

Transmisjonssannsynligheten i deltapotensial gitt ved

$$T = 1 - R = \frac{1}{1 + \frac{m_e\beta^2}{2\hbar^2 E}} \quad (139)$$

og refleksjonssannsynlighet

$$R = 1 - T = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m_e\beta^2}} \quad (140)$$

Ved oppgaver som omhandler flere barrierer slipper man å regne mye. Her er energinivåene likt som for partikkel i boks og kan brukes på samme måte. Det kan også forekomme resonnans ved enkelte energier som gir $T = 1$. Den laveste resonnansenergien tilsvarer dermed $n = 1$, og resonnansenergien vil øke kvadratisk med n . Bruk intuisjon når du løser oppgaver her, som for eksempel antall nullpunkt gir tilstand, nest laveste resonnansnivå vil være $4RE1$ og ved en øvre grense vil antall resonnansnivåer være $n^2 R_{E1}$

32 Usikkerhet, forventningsverdier og angst

Den viktige, generelle uskarphetsrelasjonen er

$$\Delta F \Delta G \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{F}, \hat{G}] \rangle| \quad (141)$$

Som gir oss den deilige uskarphetsrelasjonen

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (142)$$

Kan være kjekt å huske at for en partikkel i et visst intervall L er $\Delta x_{max} = \frac{L}{2}$ hvis man skal si noe generelt om Δp

For en Ψ som er symmetrisk om midtpunktet vil:

$$\langle x \rangle = 0; \quad \Delta x = Std x = \sigma; \quad \langle p \rangle = 0; \quad \langle p_x^2 \rangle \geq \langle p_x \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} \quad (143)$$

Generelt kan usikkerhetene/standard avviket til x og p skrives

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \quad (144)$$

Hvor man generelt kan finne forventningsverdien til en vilkårlig operator F ved å gjøre slik:

$$\int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau, \quad (145)$$

der det integreres over aktuell variabel.

Forventningsverdien til en normert tilstand er

$$\Sigma |c_n|^2 E_n. \quad (146)$$

Det er dog fint å merke seg at om en måling av en partikkel foretas vet man at partikkelen har denne energien og forventningsverdien endres til målt verdi.

Merk at sannsynligheten for en normert tilstand er lik $|c_1|^2$.

En liten funfact er at forventningsverdier til hermetiske operatorer alltid må være reelle fordi de korresponderer til målbare verdier. Alle målbare størrelser er reelle.

33 Kjemiske reaksjoner

Typisk vil man få gitt en energifunksjon og skal derfra finne energimaksime og minima. Da deriveres funksjonen og settes lik null for å finne verdier, og deriveres en gang til for å sjekke om det er negativ krumning(maksima) eller positiv(minimum). Reaksjonen vil gå fra et lokalt minimum, til et lokalt maksimum(transisjonstilstand) før det ender i et globalt minimum. Reaksjonsenergien som kreves er da forskjellen mellom lokalt minimum og lokalt maksimum. Det er lett å tro at x følger tiden og derfor sette feil verdi for start og slutt, vær obs. Finn absolutt minimum ved å sjekke krumningen og sette inn verdier i energifunksjonen.

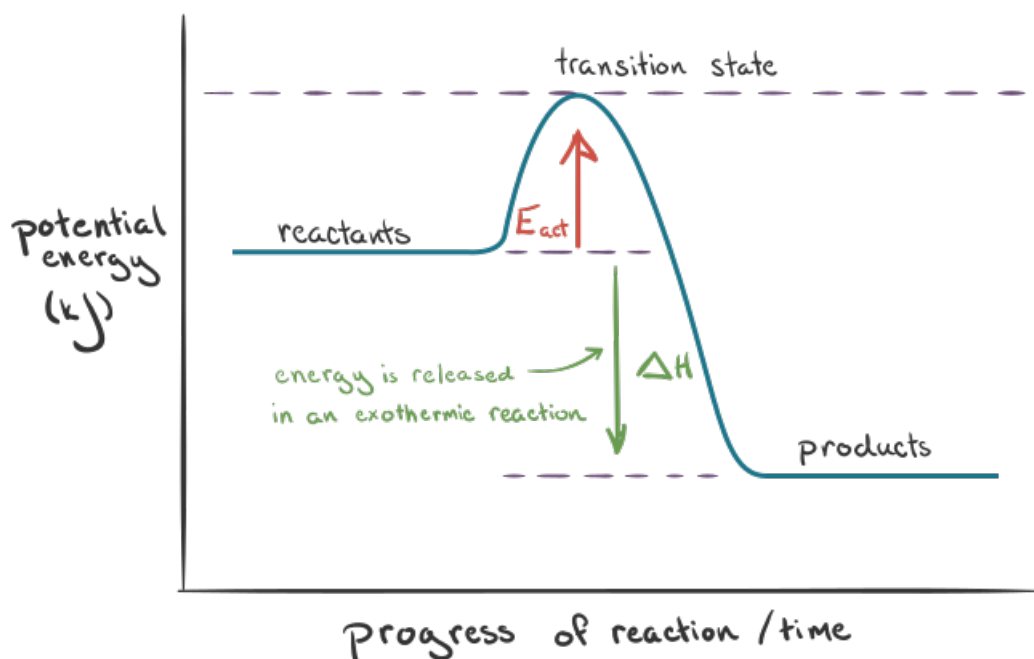


Figure 9: Penis

34 Spinnoperatorer

Du får oppgitt en god del i formelarket, som for eksempel

$$A\chi^\dagger A\chi = A^2(|a|^2 + |b|^2) = 1 \quad (147)$$

som er grei når man skal finne normeringskonstanten A.
Men de virkelige essensielle for slike oppgaver er

$$\langle S_x \rangle = |A|^2 \hbar \text{Re}(a^* b) \rightarrow \Delta S_x = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 - (2|A|^2 \text{Re}(a^* b))^2} \quad (148)$$

$$\langle S_y \rangle = |A|^2 \hbar \text{Im}(a^* b) \rightarrow \Delta S_y = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 - (2|A|^2 \text{Im}(a^* b))^2} \quad (149)$$

$$\langle S_z \rangle = |A|^2 \frac{\hbar}{2} (|a|^2 - |b|^2) \rightarrow \Delta S_z = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 - (|A|^2 (|a|^2 - |b|^2))^2} \quad (150)$$

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y \quad (151)$$

35 Kjekke formler å ha

Ettersom Hamilton operatorer deriverer Ψ to ganger, kan det være lurt å merke seg følgende:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin(kx) = -k^2 \sin(kx) \quad (152)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \cos(kx) = -k^2 \cos(kx) \quad (153)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{(-\kappa x)} = \kappa^2 e^{-\kappa x} \quad (154)$$

Disse ligningene gir nemlig løsningen på diffiligningene som oppstår i potensialbrønner, der sinus og cosinus løsningene er de klassisk tillatte, mens e løsningene er de klassisk ulovlige. Løsningene med e må alltid ha den verdien av x, enten positiv eller negativ, som gjør at den ikke divergerer når x går mot ∞ .

35.1 Gauss integraler

Det kjekke trikset variabel bytte er velkjent og kan ofte brukes når man har x^n og x^{n-1} slik at den ene vil strykes når den andre deriveres. Dersom man ikke har det kan man se om det å få ned like røtter fra et Gauss integral fungerer. Demonstrert her er først et Gauss integral som enkelt kan bevises med bruk av polarkoordinater. Videre deriverer man begge sider med hensyn på α og slik får man ut de andre integralene. Veldig nyttige i termisk/kvante.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (155)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{d}{d\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (156)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{d^2}{d\alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{d}{d\alpha} \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^2 \sqrt{\alpha}} \quad (157)$$

Mer generelt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{(2n)! \sqrt{\pi}}{2^{2n} n! \alpha^{n+\frac{1}{2}}} \quad (158)$$

35.2 Odde funksjoner

Om det her integreres fra $-\infty - \infty$ er integralet helt enkelt null. For fartsfordelinger vil dog disse integralene bli fra $0 - \infty$. Typisk vil et integral se slik ut og det har en veldig fin løsning. Er lov å regne det ut ved variabelbytte siden det er FETTE SATISFYING

$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}} \quad (159)$$

Et eksempel på hvordan man løser det ved variabelbytte er

$$\begin{aligned} \int_0^\infty x^5 e^{-\alpha x^2} &= \int_0^\infty x^5 e^{-\alpha u} \frac{du}{2x} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty x^4 e^{-\alpha u} du = \frac{1}{2} \int_0^\infty u^2 e^{-\alpha u} du \\ &= \left. \frac{-u^2 e^{-\alpha u}}{2\alpha} \right|_0^\infty + \frac{1}{2\alpha} \int_0^\infty 2ue^{-\alpha u} du \\ &= \left. \frac{-ue^{-\alpha u}}{\alpha^2} \right|_0^\infty + \int_0^\infty \frac{e^{-\alpha u}}{\alpha^2} = \frac{1}{\alpha^3} \end{aligned} \quad (160)$$

35.3 Rekkeutvikling

OOOOkey, faen mæ på tide å lær sæ herre. Taylorutvikling er en tilnærming av en funksjon ved polynomer. Dette gjøres ved å derivere en funksjon for å tilnærme den. Taylorutvikling foregår fra et bestemt punkt, og vil ligne på funksjonen rundt det punktet. Dermed:

$$j(z + dz, t) = j(z_0, t) + \frac{\partial j(z_0, t)}{\partial z} (z + dz - z_0) + \frac{\partial^2 j(z_0, t)}{2! \partial z^2} (z + dz - z_0)^2 \quad (161)$$

For at denne skal bli nøyaktig må z_0 være svært nærme z og avstanden mellom de er faktisk dz . Dermed kan man si $z - z_0 \approx 0$ og siden dz er svært liten kan man sette $O(z)^2 \approx 0$. Da står man igjen med:

$$j(z + dz, t) = j(z, t) + \frac{\partial j(z, t)}{\partial z} dz \quad (162)$$

35.4 Trig Integral

I termisk (og kvante?) får man bruk for

$$I = \int_0^{\pi/2} \cos^n(v) \sin(v) dv = \frac{1}{n+1} [-\cos^{n+1}(v)]_0^{\pi/2} = \frac{1}{n+1} \quad (163)$$

Og av symmetrigrunner er integralet null om det integreres til π når n er odde, eller dobbelt så stort om n er like

35.5 Trigonometriske identiteter

$$\begin{aligned}\cosh(ix) &= \frac{1}{2} (e^{ix} + e^{-ix}) = \cos x \\ \sinh(ix) &= \frac{1}{2} (e^{ix} - e^{-ix}) = i \sin x \\ \cosh(x + iy) &= \cosh(x) \cos(y) + i \sinh(x) \sin(y) \\ \sinh(x + iy) &= \sinh(x) \cos(y) + i \cosh(x) \sin(y) \\ \tanh(ix) &= i \tan x \\ \cosh x &= \cos(ix) \\ \sinh x &= -i \sin(ix) \\ \tanh x &= -i \tan(ix)\end{aligned}$$

36 Eksamensnotater

36.0.1 Generelt

For fri partikkel gjelder

$$E_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2 k^2}{2m}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (164)$$

$$E = \hbar\omega \quad (165)$$

$$p = \sqrt{2m_e E_k} = mv \quad (166)$$

Som de viktigste formlene. Kan eventuelt regnes med relativistiske formler hvis E_K er høy.

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2, \quad E = E_0 + E_K \quad (167)$$

En fri partikkel vil som regel ha

$$e^{ikx} e^{i\omega t} \quad (168)$$

som bølgefunksjon.

For et foton gjelder

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (169)$$

Husk alltid at hvis det fins et konkret uttrykk for impuls vil posisjon være helt ubestemt, og motsatt.

For en partikkel i et potensial vil det klassisk tillatte området være der

$$E \geq V(r), \quad (170)$$

løs så for r for å finne radien.

Ved en oppgitt Ψ som er en sum av ulike c_n , $\psi(x)$ og $e^{-iE_nt/\hbar}$, vil sannsynlighetstettheten $\rho(x, t)$ variere harmonisk med tiden. Dette er lik absoluttkvadratet, $|\Psi(x, t)|^2$ som vi vet hvordan vi finner. Det vil da oppstå kryssledd som blir proporsjonale med $E_n - E_{n-1}$.

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi\hbar}{\Delta E} = \frac{2\pi\hbar}{(E_n - E_{n-1})} \quad (171)$$

Litt fra Termisk:

$$U = \frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2}k_B T \quad (172)$$

Litt fra MekFys:

$$\omega = 2\pi f = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (173)$$

Litt fra Matte2:

$$x = r \sin\theta \cos\phi \quad y = r \sin\theta \sin\phi \quad z = r \cos\theta \quad (174)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (175)$$

$0 \leq \theta \leq \pi$ er vinkelen som går fra positiv z-akse til negativ z-akse mens $0 \leq \phi \leq 2\pi$ er vinkelen som ligger i xy-planet.

36.0.2 Tips n tricks

- Sjekk alltid hvor stor et elektrons energi er i forhold til hvileenergien $E = m_e c^2$ for om det er nødvendig å regne relativistisk. Du bør få et nokså plausibelt svar uansett.
- For treghetsmoment bør det også i forhold til oppgaven gi et plausibelt svar av å regne treghetsmoment uten å bruke den reduserte massen μ .

36.1 Observasjon av figurer

Det er flere ting her verdt å merke seg. Plottet av Ψ vil fortelle oss:

- Antall nullpunkt forteller oss hvilken tilstand vi har. Ingen nullpunkt er grunntilstand, et er første eksiterte, osv.
- Er $\psi'' = 0$ vil $E = V_0$, kan også sies som at, hvis ψ'' krummer bort fra akse vil $E < V_0$.
- En måte å finne energien til partikkelen fra et plot er hvis $\psi \approx C$ som betyr at $E = V_0$

- En annen er at antall bølgelengder tilstanden har i ulike potensialer, kan brukes sammen med

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (176)$$

der

$$k = \frac{n\pi}{L} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (177)$$

til å finne energien uttrykt ved V_0 . Man kan da sette

$$\frac{E - 0}{E - V_0} = \frac{k^2, V = 0}{k^2, V = V_0} = \frac{\lambda^2, V = V_0}{\lambda^2, V = 0} \quad (178)$$

og løse for E og sette inn observerbare tall for antall bølgelengder på et intervall L .

- Dette kan også brukes for å løse energiproblemer ved tunnelering. Da får man oppgitt en likning for R/T med q og k som løses ved å huske at $E \propto k^2$ og $E - V_0 \propto q^2$ som da gir en likning med to ukjente som løses på samme måte.
- Antall brønner svarer til antall bølger i hver bundne tilstand. To brønner gir E_0, E_1 i laveste energibånd osv
- Obs på forskjell mellom romlig tilstand og antall elektroner. Hvis man har to brønner med ulik høyde, vil hvert bånd som kun ligger i den ene brønnen, svare til en energitilstand. Mens når båndet ligger i begge brønnene vil brønnene kapre to energitilstander pr bånd.

37 Spørsmålstime med Støvneng

I hydrogen og fluor binding vil hvert av de 10 elektronene bevege seg i et potensial som skapes av kjernene og de 9 andre elektronene. I bindinger som dette kan man ikke snakke om separate enpartikkel tilstander, men må betrakte hele molekylet som et, og se etter hvilke tilstander man kan ha innad i molekylet.

38 SPØRSMÅL FØR EKSAMEN

- Eksamen vår 2017, oppgave 17
- Hvorfor perioden til to bølgefunksjoner er proporsjonal med \sin og ikke \cos
- siste oppgave på eksamen vår 2016
- Eksamen vår 2017, oppgave 29, $\frac{1}{2} * \text{amplitude} * \text{lengde}$
- $l = 0$ i laveste energitilstand?

- Hvordan funker dobbelbarriere tunnelering?
- Når bruker man V_{eff} ?
- når er radialtetthet $r^2\psi^2$ og når er det $4\pi r^2\psi^2$
- Hva er forskjell på sannsynlighetstetthet og radialtetthet for kulesymmetri?
- oppgave 14 kontekstamen 2017, hvorfor forsvinner \cos^2, \sin^2 leddene?