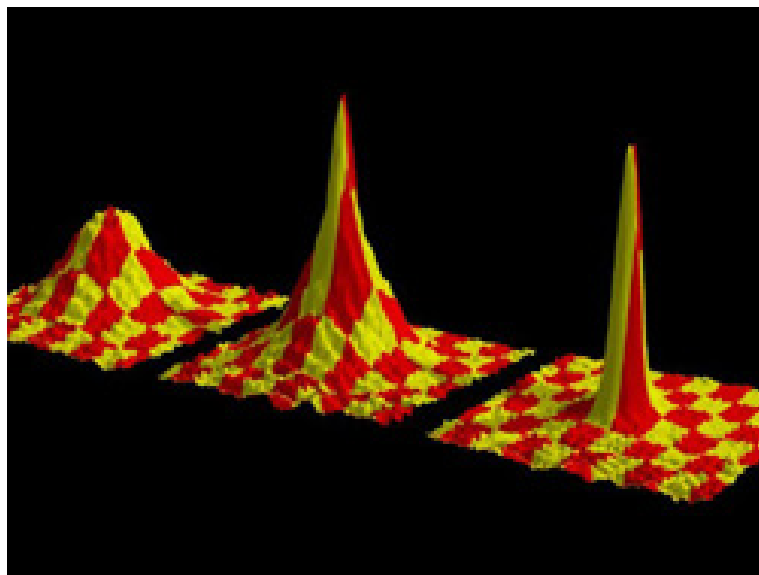

Kvantefysikk

T. Engeland og M. Hjorth-Jensen



Fysisk Institutt, Universitetet i Oslo, 2004

Forord

Kursets struktur

Kurset er delt inn i tre hoveddeler:

- Første del tar for seg den historiske utviklingen fra slutten av det nittende århundre til begynnelsen av forrige århundre. I denne tidsperioden vokste erkjennelsen av at klassisk fysikk (Newtons lover m.m.) ikke kunne beskrive resultater fra flere nye eksperimenter, bla. flerespektroskopiske data. Denne utviklingen førte fram til den nye kvanteteorien i 1925. De nye begrepene som ble innført var bla. **materieegenskapen til stråling, bølgeegenskapene til materien og kvantiseringen av fysiske størrelser som f.eks. energien eller banespinnet.**
- Andre del tar for seg en første introduksjon til kvantemekanikk, med hovedvekt på bølgemekanikk og en-partikkel problemer. Denne delen avsluttes med en kvantemekanisk beskrivelse av hydroge-
natomet.
- Tredje og siste del Undervises resten av semesteret. Her tar vi for oss ulike anvendelser fra kvantemekanikkens spede begynnelse med atomfysikk, til kjernefysikk, moderne partikkelfysikk og faste stoffers fysikk. Litt om kvantedatamaskiner.

Kursets innhold

- Første del.
 - Enheter og størrelser i FYS2140
 - Fordelingsfunksjoner
 - Svart legeme stråling og Plancks kvantiseringshypotese
 - Fotoelektrisk effekt
 - Röntgenstråling
 - Comptonspredning
 - Bohrs atommodell
 - Materiebølger og partikkel-bølge dualitet
 - Heisenbergs uskarphetsprinsipp
 - Litt bølgelære
 - Schrödingers katt paradokset og Entanglement
- Andre del.
 - Introduksjon til kvantemekanikk og enkle kvantemekaniske systemer
 - Kvantisering av banespinn
 - Hydrogen atomet
- Tredje del.
 - Atomfysikk, det periodiske systemet
 - Molekyler

-
- Kvantestatistikk og lasere
 - Kvantecomputere
 - Faste stoffers fysikk, Bose-Einstein kondensasjon og supraledning.
 - Kjernefysikk, strukturen til kjerner, stråling, dannelsen av elementene, fisjon og fusjon, kjernekrefter
 - Moderne partikkelfysikk, kvarker og leptoner

Til slutt en takk til alle som har kommet med kommentarer, trykkfeil m.m. om de ulike utkastene som har florert på kursets hjemmeside. I tillegg er vi svært takknemlige for hjelpen Simen Kvaal ga oss i utviklingen av flere av de numeriske oppgavene.

Innhold

I	VEIEN FRAM TIL SCHRÖDINGERS LIKNING	1
1	BRUDDET MED KLASSISK FYSIKK	3
1.1	Introduksjon	3
1.1.1	Hva er kvantemekanikk?	4
1.1.2	Hvorfor er kvantemekanikk spennende?	5
1.2	Enheter i kvantefysikk	6
1.3	Plancks kvantiseringshypotese	11
1.3.1	Maxwells hastighets og energifordeling, klassisk	14
1.3.2	Plancks hypotese	16
1.4	Fotoelektrisk effekt	18
1.5	Röntgen stråling	21
1.6	Compton spredning	23
1.7	Oppgaver	29
1.7.1	Analytiske oppgaver	29
2	BOHRS ATOMMODELL	35
2.1	Introduksjon	35
2.2	Bohrs postulat og hydrogenatomet	37
2.2.1	Første postulat	38
2.2.2	Tredje postulat	40
2.2.3	Fjerde postulat	40
2.2.4	Tyngdepunktskorreksjon	41
2.2.5	Korrespondanseprinsippet	43
2.2.6	Franck-Hertz eksperimentet	44
2.2.7	Problemer med Bohrs atommodell	45
2.3	Oppgaver	46
2.3.1	Analytiske oppgaver	46
3	MATERIEBØLGER	49
3.1	Materiens bølge og partikkelnatur	50
3.2	De Broglies hypotese	52
3.3	Diffraksjon, fasehastighet og gruppehastighet	55
3.3.1	Bølgepakker, gruppe og fasehastighet	55
3.3.2	Interferens	59
3.3.3	Diffraksjon	61
3.3.4	Fourieranalyse og uskarphetsrelasjonen	64

3.4	Heisenbergs uskarphetsrelasjon	68
3.4.1	Partikkel-Bølge dualitet	69
3.4.2	Størrelsesorden estimer, leik med uskarphetsrelasjonen	71
3.4.3	Energi-tid uskarphetsrelasjonen	74
3.5	Oppgaver	74
3.5.1	Analytiske oppgaver	74
 II ENKLE KVANTEMEKANISKE SYSTEMER, FRA PARTIKKEL I BOKS TIL HYDROGENATOMET		79
4	INTRODUKSJON TIL KVANTEMEKANIKKEN	81
4.1	Schrödingers likning	81
4.2	Borns sannsynlighetstolkning	84
4.3	Egenfunksjoner og egenverdier	86
4.4	Schrödinger likning for et uendelig bokspotensial	88
4.4.1	Fri partikkel	88
4.4.2	Uendelig potensialbrønn	90
4.5	Endelig bokspotensial	94
4.6	Deuterium og endelig bokspotensial	99
4.6.1	Eksempel på løsning for harmonisk oscillator vha. Maple	101
4.6.2	Eksempel på løsning for harmonisk oscillator vha. Matlab	102
4.7	Harmonisk oscillator potensial	103
4.7.1	Eksempel på løsning for harmonisk oscillator vha. Maple	107
4.7.2	Eksempel på løsning for harmonisk oscillator vha. Matlab	109
4.7.3	Viktig lærdom	111
4.8	Tre-dimensjonalt bokspotensial	111
4.9	Oppgaver	113
4.9.1	Analytiske oppgaver	113
4.9.2	Numeriske oppgaver	121
5	KVANTEMEKANIKKENS FORMELLE GRUNNLAG	125
5.1	Viktige postulater	125
5.1.1	Første postulat	129
5.1.2	Andre postulat	129
5.1.3	Tredje postulat	130
5.1.4	Fjerde postulat	130
5.1.5	Kommutatorer	131
5.2	Forventningsverdier og operatorer	132
5.3	Oppgaver	135
5.3.1	Analytiske oppgaver	135
6	KVANTEMEKANISK TUNNELING	153
6.1	Klassisk spredning mot potensialbarriere	153
6.2	Kvantemekanisk barrierespredning	154
6.2.1	Område I: $-\infty < x < 0$	154
6.2.2	Område II: $0 < x < a$	155

6.2.3	Området III: $a < x < +\infty$	155
6.2.4	Det totale løsning.	156
6.3	Spesialtilfeller	156
6.3.1	Tilfellet $E < V_0$	156
6.3.2	Tilfellet $E > V_0$	157
6.3.3	Transmisjon gjennom hele barrieren for $E < V_0$	158
6.3.4	Transmisjon gjennom hele barrieren for $E > V_0$	159
6.4	Anvendelser	160
6.4.1	Henfall av α -partikler	160
6.5	Oppgaver	163
6.5.1	Analytiske oppgaver	163
7	KVANTISERING AV BANESPINN	173
7.1	Introduksjon og motivasjon	173
7.2	Kvantisering av banespinn	174
7.3	Den radielle Schrödinger likning	180
7.4	Kvantisering av banespinn i to dimensjoner	188
7.5	Oppgaver	192
7.5.1	Analytiske oppgaver	192
7.5.2	Numeriske oppgaver	200
8	HYDROGENATOMET	203
8.1	Elektronets spinn	203
8.1.1	Zeeman effekten	203
8.1.2	Elektronets spinn og den anomale Zeeman effekten	206
8.1.3	Totalt spinn	209
8.1.4	Spinn-bane vekselvirkningen	210
8.2	Energispekter for hydrogenatomet	214
8.3	Elektrisk dipol overgangsregler	219
8.4	Oppgaver	223
8.4.1	Analytiske oppgaver	223
III	ANVENDELSER	229
9	DET PERIODISKE SYSTEMET	231
9.1	Introduksjon	231
9.2	Heliumatomet, en første tilnærming	231
9.3	Identiske partikler og Paulis eksklusjonsprinsipp	234
9.4	Heliumatomet	238
9.5	System med mer enn to elektroner	242
9.6	Alkalimetallene	244
9.6.1	Litium atomet	246
9.6.2	Na atomet	247
9.7	Jordalkalimetaller	247
9.8	Zeeman effekten for atomer	248
9.9	Oppgaver	251

9.9.1	Analytiske oppgaver	251
9.9.2	Numeriske oppgaver	266
10	MOLEKYLER	273
10.1	Introduksjon	273
10.2	Rotasjon og vibrasjon	274
10.2.1	Rotasjon i molekyler	275
10.2.2	Vibrasjon i molekyler	279
10.2.3	Molekylspektra	280
10.3	Ionisk og kovalent binding	282
10.3.1	Ionisk binding	282
10.3.2	H_2^+ molekylet, kovalent binding og tunneling	284
10.3.3	H_2 molekylet	291
10.3.4	Ionisk eller kovalent binding?	292
10.4	Oppgaver	292
10.4.1	Analytiske oppgaver	292
11	KVANTESTATISTIKK	299
11.1	Uskilbarhet og kvantestatistikk	299
11.2	Emisjon, absorpsjon og stimulert emisjon	302
11.3	Helium-Neon laseren	306
12	KJERNE OG PARTIKKELFYSIKK	309
12.1	Kjernefysikk	309
12.2	Nukleosyntese	309
12.3	Partikkelfysikk	309
12.4	Kosmologi	309
12.5	Oppgaver	309
12.5.1	Analytiske oppgaver	309
13	FASTSTOFFFYSIKK	317
13.1	Halvledere og transistorer	317
13.2	Superledning og superfluiditet	317
13.3	Oppgaver	317
13.3.1	Analytiske oppgaver	317
14	KVANTEDATAMASKINER	319
14.1	Historisk tilbakeblikk og Moores lov	320
14.2	Superposisjon og qubits	322
14.2.1	Superposisjonsprinsippet	322
14.2.2	Qubits	322
14.3	Operasjoner på en qubit	324
14.4	Entanglement og to-qubit tilstander	325
14.5	Kvantemekaniske kretser	327
14.5.1	CNOT kretser	328
14.6	CNOT kretser og Schrödingers katt tilstander	329

Del I

**VEIEN FRAM TIL SCHRÖDINGERS
LIKNING**

Kapittel 1

BRUDDET MED KLASSISK FYSIKK

Quantum mechanics: Real black magic calculus. *Albert Einstein*

Anybody who is not shocked by quantum theory has not understood it. *Niels Bohr*

Kursets første del har som hensikt å gi dere en viss oversikt over den historiske utviklingen som førte til formuleringen av kvantemekanikken i 1925. Det er på ingen måte en fullstendig historisk oversikt. Vi vil kun ta for oss det vi anser som de viktigste bitene på denne vei, deriblant en beskrivelse av svart legeme stråling vha. Plancks kvantiseringshypotese, fotoelektrisk effekt, Compton spredning, Röntgen stråling, Bohrs atommodell, materiens partikkel og bølgeegenskaper samt om Heisenbergs uskarphetsrelasjon. I tillegg, vil vi også ta for oss litt bølgelære som er relevant for dette kurset. Men først en generell introduksjon.

1.1 Introduksjon

Ved starten av forrige århundre kan en kanskje beskrive situasjonen i Fysikk som Pandoras boks av eksperimentelle observasjoner som, med basis i veletablert klassisk fysikk, ikke lot seg forklare. Vår historie begynner dermed ved slutten og 188-tallet og starten av forrige århundre, nærmere bestemt 14 desember 1900, da Planck foreleste om sin teori for svart legeme stråling til det Tyske Fysiske selskap. En rekke fysiske fenomen, fotoelektrisk effekt, diskrete spektra fra ulike gasser, Röntgen stråling m.m., kunne ikke forklares vha. det vi idag kaller for klassisk fysikk, dvs. den tids bevegelseslover for naturen, uttrykt vha. Newtons og Maxwells likninger. Teorien resulterte i flere inkonsekvenser i forhold til eksperiment, slik som den såkalte 'ultrafiolette katastrofe', eller at elektroner kunne klappe sammen med kjernen.

I første omgang ble disse problemene løst vha. *ad hoc* hypoteser, slik som Plancks kvantiserings hypotese eller Bohrs atommodell. Den historiske gangen viser oss også klart at fysikk er et eksperimentelt fag, *teorier om naturen utvikles hånd i hånd med eksperiment.*

Etterhvert som en fikk større eksperimentell innsikt om både atomer og stråling, viste slike *ad hoc* forklaringer seg som utilstrekkelige. Krisen i klassisk fysikk kom til sin ende i 1925 med formuleringen av kvantemekanikken. Her følger noen viktige oppdagelser og teorier som var med å forme den første tida.

1898	Madam Curie	Radioaktiv polonium og radium
1900	Planck	Plancks kvantiserings hypotese og svart legeme stråling
1905	Einstein	Fotoelektrisk effekt
1911	Rutherford	Atommodell
1913	Bohr	Kvanteteori for atomspektra
1922	Compton	Spredning av fotoner på elektroner
1923	Goudsmit og Uhlenbeck	Elektronets egenspinn
1924	Pauli	Paulis eksklusjonsprinsipp
1925	De Broglie	Materiebølger
1926	Schrödinger	Bølgelikning og ny naturlov
1927	Heisenberg	Uskarphetsrelasjonen
1927	Davisson og Germer	Eksperiment som påviste materiens bølgeegenskaper
1927	Born	Tolkningen av bølgefunksjonen
1928	Dirac	Relativistisk kvantemekanikk og prediksjon av positronet

Kvantemekanikken har vært et unnværlig verktøy i vår søken etter å beskrive naturen, fra å forklare hvordan sola skinner, til studier av atomer og deres struktur og understrukturer, supraledning, kjernefusjon i stjerner, nøytronstjerner, strukturen til DNA molekylet, elementærpartiklene i naturen og m.m. Og kvantemekanikken ligger til grunn for store deler av vår nåværende og framtidige teknologiske utvikling. Fra et mer filosofisk ståsted kan vi si at dialektikken mellom eksperiment og teori var med å forme en ny naturvitenskapelig filosofi. Som basis for vår forståelse av naturen har vi erstatta den objektive determinismen gitt ved f.eks. Newtons lover med en subjektiv og sannsynlighetsbestemt determinisme.

1.1.1 Hva er kvantemekanikk?

Kvantemekanikk er et matematisk byggverk, et sett av regler for å lage fysiske teorier om naturen, en matematisk måte å uttrykke naturlover. Schrödingers likning er vår naturlov, både for mikroskopiske og makroskopiske systemer. Settet med regler inneholder også tolkninger av teorien samt ulike postulater, f.eks. hvordan en måling av en fysisk størrelsen skal defineres. Reglene er enkle men høyst ikke-trivielle i sine tolkninger, noe som har leda og leder til interessante kontroverser om naturens egenskaper og vår evne til å forstå den. Den kanskje mest kjente kritiker av kvantemekanikk er vel Einstein, som var, sammen med Planck, en av teoriens 'jordmødre.

I tillegg, og her er det viktig å skille mellom kvantemekanikken som teori og postulatene om naturen som resulterte i etableringen av kvantemekanikken. Kvantemekanikk som teori baserer seg på bla. flere viktige påstander om naturen. Det er fire viktige postulater som danner grunnlaget for kvantemekanikkens beskrivelse av naturen og Schrödingers likning som bevegelseslov og som dere kommer til å få presentert i dette kurset.

Disse fire postulatene har ingen klassisk analog, og utgjør et sett med påstander om naturen.

- Einsteins og Plancks postulat om energiens kvantisering

$$E = n h \nu,$$

hvor ν er frekvensen og h er Plancks konstant. Tallet n er et heltall og kalles for et kvantetall.

- De Broglie sitt postulat om materiens bølge og partikkel egenskaper. Det uttrykkes vha. relasjonene

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

hvor λ er bølgelengden og p bevegelsesmengden. Partikelegenskapene uttrykkes via energien og bevegelsesmengden, mens bølgelengden og frekvensen uttrykker bølgeegenskapene.

- Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

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

Klassisk er det slik at x og p er uavhengige størrelser. Kvantemekanisk har vi en avhengighet gitt ved Heisenbergs uskarphets relasjon. Dette impliserer igjen at vi ikke kan lokalisere en partikkel og samtidig bestemme dens bevegelsesmengde skarpt. En ytterligere konsekvens er at vi ikke kan i et bestemt eksperiment observere både partikkel og bølgeegenskaper samtidig.

- Paulis eksklusjonsprinsipp: den totale bølgefunksjonen for et system som består av identiske partikler med halvtallig spinn må være antisymmetrisk. Det har som følge at i en sentralfelt modell som anvendes i f.eks. atomfysikk, så kan ikke to eller flere elektroner ha samme sett kvantetall. Partikler med halvtallig spinn kalles for fermioner. Eksempler er elektroner, protoner, nøytroner, kvarker og nøytrinoer. For partikler med heltallig spinn må bølgefunksjonen være symmetrisk. Partikler med heltallig spinn kalles bosoner. Eksempler er fotoner, Helium atomer, ulike mesoner og gluoner.

1.1.2 Hvorfor er kvantemekanikk spennende?

Uten å ta munnen for full, dere som følger dette kurset har en utrolig spennende tid å se fram til! Hvorfor? Kvantefysikken inneholder altså en del postulatet med konsekvenser for vår forståelse av naturen som er høyst ikke-trivielle. Slik kvantemekanikken framstår idag, utgjør den vår beste forståelse av naturen. Schrödingers likning, hvis tilhørende løsning forteller om egenskaper til et mikrosystem, er vår naturlov. Fram til ca. 1970 kan vi si at mye av den eksperimentelle informasjonen vi hadde om mikrosystemer i all hovedsak dreide seg om systemer med mange partikler, f.eks. mange enkeltatomer. Grovt sett kan en si at vi ikke hadde tilgang til informasjon om kvantemekaniske enkeltsystemer som f.eks. et atom. Supraledning er et slikt eksempel. Her har vi en makroskopisk manifestasjon av en kvantemekanisk effekt, men vi kan ikke trekke ut eksperimentell informasjon om enkeltelektronene som bidrar. Siden 1970 har det blitt utviklet teknikker, f.eks. det som går under navnet ionefeller (Nobel pris i fysikk i 1989), hvor vi vha. f.eks. elektriske kvadrupolfelt kan fange inn enkeltatomer i små områder som er isolerte fra omgivelsene. Deretter kan vi studere ulike kvantemekaniske frihetsgrader til dette enkeltatomet ved f.eks. å sende laserlys med bestemte frekvenser. Den nye eksperimentelle og teknologiske situasjonen vi er ved kan være med å legge grunnlaget for

- Ny teknologi
- Nye fagfelt samt overlapp med flere eksisterende felt, fysikk, matematikk, informatikk, kjemi m.m.
- Eksisterende teknologi gjør at vi kan studere og kanskje utnytte sider av kvantemekanikken som anses som mindre trivielle. Eksempler er Schrödingers katt paradokset og 'Entanglement' (mere om dette senere).
- Kanskje vi utvikler også en bedre forståelse av naturen, **en ny og bedre teori?**
- Det er også en interessant parallell til begynnelsen av forrige århundre. Flere eksperiment (fotoelektrisk effekt, svart legeme stråling m.m.) kunne ikke forklare vha. klassisk fysikk. Det ledet igjen til utviklingen av kvantemekanikken rundt 1925. Med dagens teknologi kan vi f.eks. fange inn enkeltatomer og elektroner i små områder (noen få nanometre) og studere tilhørende kvantemekaniske egenskaper.

Vår målsetting er å gi dere en introduksjon til kvantemekanikken, hvor vi vektlegger den historiske gangen fram til Schrödingers likning, forstå enkle kvantemekaniske systemer og det periodiske systemet. I tillegg, tar vi med oss anvendelser fra moderne forskningsfelt som kvantedatamaskiner, litt om molekyler, halvledere og til slutt litt kjerne og partikkelfysikk.

Matematikken i dette kurset er ikke vanskelig, selv om en del manipulering med matematiske uttrykk kan virke innfløkt innledningsvis. Den formelle matematiske formalismen som kjennetegner kvantemekanikk vektlegges ikke i dette kurset. Videregående emner som FYS3110 har dette som et viktig tema. De vanskeligste matematiske problem vi kan komme i kontakt med er integral av typen

$$\int_a^b e^{-\alpha x} x^n dx,$$

og

$$\int_a^b e^{-\alpha x^2} x^n dx,$$

med α en reell positiv konstant og n et positivt tall. Bokstavene a og b representerer integrasjonsgrensene. I tillegg kommer kjennskap til regning med komplekse tall og variable.

1.2 Enheter i kvantefysikk

I kvantefysikk er vi opptatt av å beskrive fysiske fenomen på det vi kan kalle mikroskala. Typiske lengdeskalaer av interesse går fra 10^{-8} m ned til 10^{-18} m. Enhetene som da benyttes er **nm**, leses nanometer, som er 10^{-9} m og **fm**, leses femtometer, og er gitt ved $1\text{ fm} = 10^{-15}$ m. Nanometer er lengdeskalaen i atomfysikk, faste stoffers fysikk og molekylfysikk. Tilsvarende anvendes femtometer i kjerne og partikkelfysikk. Senere i dette kurset skal vi se at det er en sammenheng mellom de kreftene som virker (f.eks. Coulomb vekselvirkningen i atomfysikk) og et systems energi og dermed dets lengdeskala. For å gi dere et enkelt eksempel på de lengdeskalaer som vi skal befatte oss med, la oss hente fram Avogadros tall

$$N_A = 6.023 \times 10^{23},$$

som betyr at det er N_A atomer i A gram av et ethvert element, hvor A er det atomære massetall. Det vi si at et 1 g hydrogen, 12 g karbon (^{12}C) og 238 g uran (^{238}U) har like mange atomer. La oss så anta at vi har et gram av flytende hydrogen og stiller oss selv spørsmålet om hvor stor utbredelse et hydrogenatom har, dvs. hvor stor er diameteren til hydrogenatomet som består av et elektron og et proton. Vi har oppgitt at tettheten ρ av flytende hydrogen er $\rho = 71 \text{ kg/m}^3$. Volumet opptatt av et gram er da

$$V = \frac{10^{-3} \text{ kg}}{\rho}, \quad (1.1)$$

og volumet opptatt av et atom er da

$$V_{\text{atom}} = \frac{V}{N_A} = \frac{10^{-3} \text{ kg}}{N_A \rho} = \frac{10^{-3} \text{ kg}}{71 \text{ kg/m}^3 6.023 \times 10^{23}} = 2.3 \times 10^{-29} \text{ m}^3. \quad (1.2)$$

Deretter antar vi at denne væsken består av tettpakka kuler av hydrogen atomer, slik at vi kan sette diameteren d

$$d \sim V_{\text{atom}}^{1/3} = 3 \times 10^{-10} \text{ m} = 0.3 \text{ nm}. \quad (1.3)$$

Vi skal senere i kurset (i kapittel 7 i tekstsoka) se at når vi regner ut den gjennomsnittlige diameteren for hydrogenatomet vha. kvantemekanikk, vil vi finne en liknende størrelsesorden for diameteren. Dette enkle eksempel er ment som en illustrasjon på de lengdeskalaer som er av betydning for det vi skal drive med her. I forbifarten kan vi nevne at radius til et proton er ca. 1 fm, mens radius til en atomkjerne (uten elektronene, kun protoner og nøytroner) slik som bly er på ca 7 fm. Dette forteller også noe om at de sterke kjernekraftene som holder en atomkjerne sammen har kort rekkevidde (mere om dette i kapittel 14 i læreboka).

La oss nå introdusere den viktige energienheten vår. Fra FYS-ME1100 og FYS1120 har dere vært vant med Joule som energienhet, $J = \text{kgm}^2/\text{s}^2$. I FYS2140 vil vi operere med energiskalaer av typen 10^{-19} J. Da er det hensiktsmessig å innføre en ny energienhet, **elektronvolt** med enhet eV. Fra FYS2140 har vi at elektronets ladning er gitt ved

$$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}, \quad (1.4)$$

og at $1 \text{ V} = 1 \text{ J/C}$. I Fys2140 definerer vi 1 eV som den mengde kinetisk energi som et elektron får når det akselereres gjennom en potensial differanse på 1 V. Setter vi nå

$$1 \text{ J} = 1 \text{ V} \cdot 1 \text{ C} = 1 \text{ V} \cdot 1 \text{ C} \frac{e}{e} = 1 \text{ V} \cdot 1 \text{ C} \frac{e}{1.602 \times 10^{-19} \text{ C}} = \frac{1 \text{ eV}}{1.602 \times 10^{-19}}, \quad (1.5)$$

har vi at

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}. \quad (1.6)$$

Vi kan nå omregne hvileenergien til elektronet $E_0^{\text{elektron}} = m_e c^2$, hvor massen til elektronet er

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad (1.7)$$

i enheter eV ved å sette

$$m_e c^2 = 9.11 \times 10^{-31} (3 \times 10^8)^2 \text{ J} = (9.11 \times 10^{-31} (3 \times 10^8)^2 / 1.602 \times 10^{-19}) \text{ eV}, \quad (1.8)$$

som gir

$$E_0^{\text{elektron}} = m_e c^2 = 5.11 \times 10^5 \text{ eV} \quad (1.9)$$

eller 0.511 MeV, med $1 \text{ MeV} = 1000000 \text{ eV}$. **For massen brukes ofte**

$$m_e = E_0^{\text{elektron}}/c^2 \quad (1.10)$$

dvs at vi skriver $m_e = 0.511 \text{ MeV}/c^2$, som leses MeV-over-c-i-andre, men i bekvemmelighetens ånd forkortes den oftest til bare MeV. For protonet har vi $m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$. I atomfysikk, faste stoffers fysikk og molekylfysikk har vi energier på størrelsesorden **med noen eV**, i all hovedsak er det Coulomb vekselvirkningen som gir vesentlige bidrag til disse systemenes fysikk. I kjerne og partikkelfysikk opererer vi med energier på størrelse med MeV, GeV (=1000 MeV) (massen til kvarker og tunge bosoner) eller TeV (massen til den mystiske Higgs partikkelen). Maks bindingsenergi til kjerner, når vi ser bort fra hvileenergien til protoner og nøytroner, er på ca. 8 MeV (^{56}Fe). Andre nyttige størrelser er Plancks konstant h

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (1.11)$$

men oftest brukes \hbar (leses h-strek)

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6.582 \times 10^{-16} \text{ eVs}. \quad (1.12)$$

I tillegg, forekommer \hbar ofte sammen med lyshastigheten c , slik at en ny 'hendig' størrelse er

$$\hbar c = 197 \text{ eV nm (MeV fm)} \quad (1.13)$$

Til slutt kan faktoren i Coulombvekselvirkningen mellom to f.eks. to elektroner

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.14)$$

hvor ϵ_0 er permittiviteten og r er absolutt verdien av avstanden mellom de to elektronene, settes lik

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44 \text{ eV nm} \quad (1.15)$$

Som et eksempel på størrelsesordener, la oss se på forholdet mellom gravitasjonskrefter og elektrostatiske krefter. Gravitasjonskraften er gitt ved

$$F_G = -\frac{Gm_1m_2}{r^2}, \quad (1.16)$$

hvor $G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$ er gravitasjonskonstanten, r er avstanden mellom legeme 1 og 2 og m_1 og m_2 deres respektive masser. La oss anta at m_1 er et elektron og at m_2 er et proton. Coulombkraften er gitt ved

$$F_C = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}. \quad (1.17)$$

Setter vi inn for elektronets og protonets masse har vi

$$F_G/F_C \approx 4 \times 10^{-40}. \quad (1.18)$$

Nå vet vi at bindingsenergien til elektronet i hydrogenatomet er -13.6 eV og at den midlere avstanden mellom elektronet og protonet er ca. 0.05 nm . Dersom det er gravitasjonskreftene som holder hydrogenatomet sammen, hvor stor blir da den midlere avstanden? Her kan du anta at bindingsenergien til elektronet er proporsjonalt med

$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Sammenlikner radien du finner med den estimerte avstanden til den fjerneste galakse, så har vi ca. 10^{25} m .

Når vi først har tatt steget ut i universet, la oss avslutte dette avsnittet med en ytterligere digresjon fra verdensrommet. Solas masse er gitt ved

$$M_\odot = 1.989 \times 10^{30} \text{ kg}. \quad (1.19)$$

og protonets masse er

$$M_p = 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}. \quad (1.20)$$

Siden elektronet har en masse som er ca 2000 ganger mindre en protonet, kan vi anta at det er hovedsaklig protoner og nøytroner (som har nesten samme masse som protonet) som bidrar til solas totale masse. Antallet protoner og nøytroner N er da gitt ved

$$N = \frac{M_\odot}{m_p} \sim 10^{57}. \quad (1.21)$$

Vi kan så prøve å gjenta eksemplet med hydrogenatomet. Vi antar at sola består av en gass med tettpakkede protoner og nøytroner og at volumet V_p opptatt av et proton (nøytron) er

$$V_p = \frac{4\pi r_p^3}{3}, \quad (1.22)$$

hvor r_p er radien til protonet. Ovenfor oppga vi at $r_p \sim 1$ fm eller 10^{-15} m. Volumet til sola $V_S = 4\pi R^3/3$, hvor R er solas radius, blir da

$$V_S = NV_p = \frac{4\pi(10^{-15})^3 \text{ m}^3}{3} \times 10^{57}. \quad (1.23)$$

Dette gir oss en radius

$$R \sim 10 \text{ km!!} \quad (1.24)$$

Solradien er gitt ved

$$R_\odot = 7 \times 10^5 \text{ km}. \quad (1.25)$$

Dette forteller oss at den modellen vi antok for å beskrive den gjennomsnittlige tettheten i sola er feil. Gjennomsnittlig tetthet i sola er estimert til ca. 1.4 g/cm^3 . Derimot vil radien på ca 10 km svare til radien til ei nøytronstjerne, som er et mulig resultat av en supernova eksplosjon, sluttstadiet for en stjerne som har brukt opp all brennstoffet sitt. Massen til en nøytronstjerne er ca. 1.4 solmasser, så dere kan tenke dere sola konsentrert i et område med Fysisk institutt som sentrum med radius 10 km. Det sier seg selv at tettheten må være enorm. Tettheten i ei nøytronstjerne varierer fra 10^6 g/cm^3 i de ytre lag til 10^{15} g/cm^3 i det indre av stjernen.

Til slutt, for å bringe oss over til neste tema, en størrelse som er interesse er hvor mye energi sola stråler ut per sekund. Denne størrelsen kalles luminositeten og er gitt ved

$$L_\odot = 3.826 \times 10^{26} \text{ J/s}, \quad (1.26)$$

hvor $\text{J/s} = \text{W}$ (watt). Ser vi på utstrålt energi per sekund, får vi radiansen, som vi skal diskutere nærmere i neste avsnitt.

Tabell 1.1: Standard metrisk notasjon for tierpotenser

Potens	prefiks	Symbol
10^{18}	exa	E
10^{15}	peta	P
10^{12}	tera	T
10^9	giga	G
10^6	mega	M
10^3	kilo	k
10^{-2}	centi	c
10^{-3}	milli	m
10^{-6}	micro	μ
10^{-9}	nano	n
10^{-12}	pico	p
10^{-15}	femto	f
10^{-18}	atto	a

Vi kommer til å bruke det internasjonale enhets systemet, SI, hvor dynamiske variable uttrykkes i fem fundamentale enheter, meter (m), kilogram (kg), sekund (s), ampere (A) og kelvin (K). I kvantefysikk er det, som vist ovenfor, mer hensiktsmessig å bruke enheter som eV for energi. Nyttige omregningsfaktorer er $1 \text{ eV} = 1.60 \times 10^{-19} \text{ J}$ og en atomær masseenhet gitt ved $1 \text{ u} = 1/12$ av massen til $^{12}\text{C} = 1.6604 \times 10^{-27} \text{ kg} = 931.48 \text{ MeV}/c^2$. Nedenfor finner dere flere konstanter som blir brukt i dette kurset.

Tabell 1.2: Nyttige konstanter

Konstant	symbol	verdi
Lyshastighet	c	$3.00 \times 10^8 \text{ m/s}$
Gravitasjonskonstant	G	$6.67 \times 10^{-11} \text{ Nm}^2/\text{kg}^2$
Coulombkonstant	k	$8.99 \times 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$
Boltzmannkonstant	k_B	$1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Elementærladning	e	$1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$
Plancks konstant	h	$6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$
	hc	1240 eVnm
	$\hbar = h/2\pi$	$1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$
	$\hbar c$	197 eVnm
Bohrradius	$a_0 = \hbar^2/m_e k e^2$	0.0529 nm
Finstrukturkonstanten	α	$1/137.036$
Coulombfaktor	ke^2	1.44 eVnm
Elektronets gyromagnetisk faktor	g_e	2.002
Grunntilstand hydrogen	$E_0 = -ke^2/2a_0$	-13.606 eV
Rydberg	Ry	13.606 eV

Tabell 1.3: Masser til viktige partikler

Partikkel	i kg	i MeV/c^2	i u
elektron	$9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$	$0.511 \text{ MeV}/c^2$	0.000549 u
proton	$1.672 \times 10^{-27} \text{ kg}$	$938.3 \text{ MeV}/c^2$	1.007277 u
nøytron	$1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$	$939.6 \text{ MeV}/c^2$	1.008665 u
hydrogen	$1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$	$938.8 \text{ MeV}/c^2$	1.007825 u

Annen nyttig informasjon er bølgelengden til synlig lys som går fra 700 nm (mørk rød) til 400 nm (mørk fiolett).

I mange tekstbøker i fysikk brukes også det Gaussiske enhetssystemet. De viktigste enhetene der er gram, centimeter og sekund. Ladningsenheten, som kalles statcoulomb, representerer en ladning, som i en avstand på 1 cm fra en identisk ladning føler en kraft på 1 dyne. En statcoulomb er da gitt ved

$$1 \text{ statcoulomb} = 1 \text{ dyne}^{1/2} \text{ cm} = 1 \text{ g}^{1/2} \text{ cm}^{3/2} \text{ s}^{-1}.$$

Tabellen nedenfor gir faktoren som trengs når vi går fra SI systemet til det Gaussiske systemet.

Tabell 1.4: Fra SI systemet til Gaussiske enheter

variabel	transformasjon
Elektrisk felt	$\mathbf{E} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \mathbf{E}$
Vektorpotensial	$\mathbf{A} \rightarrow \sqrt{\frac{\mu_0}{4\pi}} \mathbf{A}$
B-felt	$\mathbf{B} \rightarrow \sqrt{\frac{\mu_0}{4\pi}} \mathbf{B}$
Magnetisk moment	$\mu \rightarrow \sqrt{\frac{4\pi}{\mu_0}} \mu$
Skalart potensial	$\phi \rightarrow \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \phi$

1.3 Plancks kvantiseringshypotese

Et av problemene¹ en ikke var i stand til å forklare vha. klassisk fysikk var frekvensfordelingen til elektromagnetisk (e.m.) stråling fra et legeme ved en gitt temperatur, f.eks. sola eller ei kokeplate. Når vi setter på ei kokeplate merker vi i begynnelsen ikke noen nevneverdig fargeforandring, selv om vi registrerer at den blir litt varmere. Etter en stund blir den rødglødende og innbyr neppe til å bli tatt på. Men før vi definerer problemet noe nærmere, la oss ta for oss noen definisjoner.

- Termisk stråling : den e.m. stråling som sendes ut fra et legeme som resultat av dets temperatur. Alle legemer sender ut (emisjon) og mottar (absorpsjon) e.m. stråling.
- Ved gitt temperatur T er vi interessert i å finne fordelingen av emittert stråling som funksjon av den e.m. strålingen sin frekvens ν eller bølgelengde λ . Vi har følgende relasjon mellom frekvensen ν og bølgelengden λ

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

- Frekvensfordelingen

$$M_\nu(T) d\nu$$

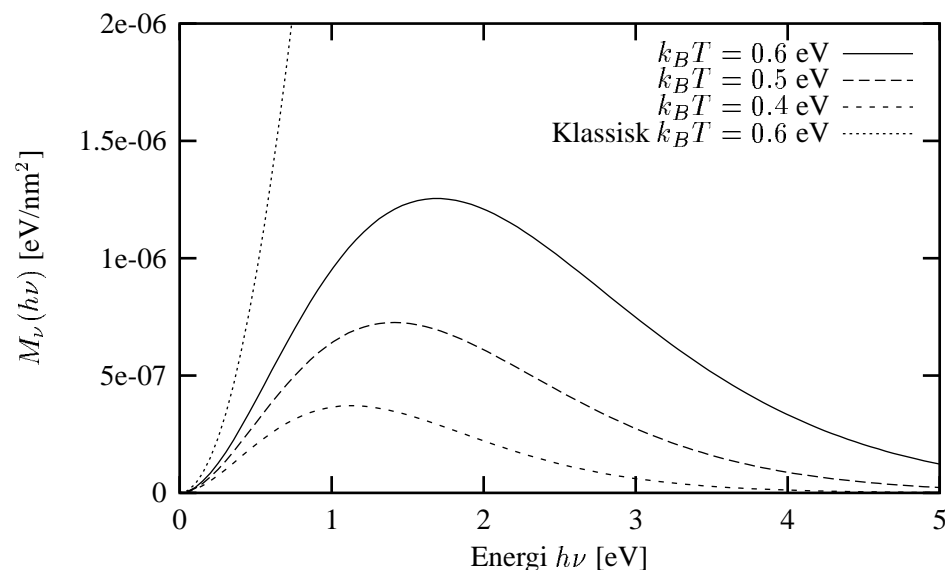
kalles spektralfordelingen eller kanskje bedre fordelingsfunksjonen for frekvensspekteret, eller bare frekvensfordeling. Denne fordelingen leses også som **utstrålt energi fra en gjenstand ved temperatur T per areal per tid per frekvensenhet**. Figur 1.1 viser eksempler på frekvensfordelinger for ulike temperaturer fra et såkalt svart legeme. Denne figuren viser også resultatet fra klassisk teori. Vi ser at denne fordelingsfunksjonen viser en divergerende oppførsel (ultrafiolett katastrofe) ved høye frekvenser (eller små bølgelengder), i strid med eksperimentelle resultat.

- Integrerer vi over alle frekvenser

$$M(T) = \int_0^\infty M_\nu(T) d\nu$$

får vi totalt utstrålt energi per sekund per areal ved gitt temperatur T . Dimensjonen til $M(T)$ er da $[M(T)] = \text{J}/(\text{m}^2\text{s}) = \text{W}/\text{m}^2$. Denne størrelsen kalles radiansen.

¹Sidehenvisning i læreboka er kap 2-1, sidene 74-80, kap 2-2 er kun bakgrunnsmateriale, men vi kommer i kap 5 til å utlede energien til et system som utviser stående bølger. Kap 2-3, side 86-93 undervises i FYS2160 og vil ikke bli vektlagt som pensum. Kap 2-4, side 93-99 gir den første virkelige anvendelse av kvantiseringshypotesen og det som la grunnlaget for kvantemekanikken. Det viktige med disse avsnittene er at dere har klart for dere hva som skapte bruddet med klassisk fysikk. En bedre forklaring vil dere få i FYS2160 og eventuelt FYS3130.



Figur 1.1: Figuren viser frekvensfordelingen fra Plancks kvantiseringspostulat i likning (1.33) og den klassiske fordelingsfunksjonen fra likning (1.30). Legg merke til at energi er i enhet eV og frekvensfordelingen har enheten eV/nm².

- Vårt problem er å finne fram til en fysisk forklaring for den eksperimentelle formen til $M_\nu(T)$.

Det klassiske eksempel på en slik frekvensfordeling $M_\nu(T)$ var gitt ved stråling fra et såkalt svart legeme. Et svart legeme er et idealisert objekt som ikke reflekterer noe av den innkommende e.m. stråling. All innkommende e.m. stråling blir absorbert. Grunnen til at det kalles svart legeme var at ved lave temperaturer (tenk igjen på ei kokeplate som nettopp er satt på) så forble legemet mørkt, selv om det sendte ut termisk stråling. Den var bare ikke synlig for oss. Frekvensfordelingen til et svart legeme er uavhengig av materiale, slik at dets frekvensfordeling er en universell funksjon av frekvens ν og temperatur T . På slutten av 1800-tallet hadde en gjennomført flere eksperimenter ved å observere utstrålt e.m. energi fra modeller som skulle representere et såkalt svart legeme. Modellen var et hulrom som ble varmet opp til en bestemt temperatur. Atomene i materialet til dette hulrommet ble da satt i svingninger og sendte ut e.m. stråling (mere om dette i FYS2160). En kan tenke seg atomene som harmoniske oscillatorer som vibrerer og sender ut stråling. Ved termisk likevekt var hulrommet fylt av e.m. stråling. **Teknisk sett vil dette svare til stående e.m. bølger** og en kan da regne ut energien til det e.m. feltet i et slikt hulrom. Hulrommet hadde et hull, hvis størrelse var mye mindre enn hulrommets overflate. E.m. stråling ble emitert fra dette hullet som ideelt sett skal representere et svart legeme. Fordelen med dette oppsettet var at det lot seg både gjennomføre eksperimentelt og at en kunne regne ut teoretisk frekvensfordelingen. En kan da vise (se kap 2-1 og sidene 83-85 i læreboka) at

$$M_\nu(T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \langle E \rangle, \quad (1.27)$$

hvor $\langle E \rangle$ er den gjennomsnittlige energien per svingemode til det elektromagnetiske feltet i hulrommet. Dette feltet skal igjen gjenspeile svingingene til atomene i materialet til hulrommet. Den tilsvarende radiansen var da gitt ved

$$M(T) = \sigma T^4, \quad (1.28)$$

hvor σ er en konstant. Dette uttrykket kalles Stefan-Boltzmanns lov. Det var Stefan som i 1879 foreslo basert på data at radiansen for et svart legeme skulle være proporsjonal med T^4 . Klassisk fysikk, se nedenfor, ga at

$$\langle E \rangle = \frac{3k_B T}{2}, \quad (1.29)$$

hvor k_B er Boltzmanns konstant. Dvs.

$$M_\nu(T) = \frac{\pi \nu^2}{c^2} 3k_B T. \quad (1.30)$$

Dersom vi integrerer det siste uttrykket for å finne radiansen

$$M(T) = \int_0^\infty \frac{\pi \nu^2}{c^2} 3k_B T d\nu, \quad (1.31)$$

ser vi at radiansen divergerer, i strid med den empiriske oppførselen i Stefan-Boltzmanns lov. Plancks hypotese (se nedenfor) ga

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (1.32)$$

og dermed

$$M_\nu(T) = \frac{2\pi \nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (1.33)$$

og samsvar med eksperiment. h er Plancks konstant. Vi ser at denne funksjonen har det riktige forløp både ved små og store verdier av ν , se figur 1.1. I denne figuren har vi valgt enheter eV og nm. Grunnen er at dersom vi ønsker å sette naturkonstantene k_B , h og c i enheter av henholdsvis J/K, Js og m/s², kan det lett lede til tap av presisjon i numeriske beregninger av frekvensfordelingen. For å konvertere til disse enhetene har vi multiplisert siste uttrykk med h^2 i teller og nevner

$$M_\nu(T) = \frac{2\pi}{h^2 c^2} \frac{(h\nu)^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (1.34)$$

og ved å sette $x = h\nu$ finner vi

$$M_x(T) = \frac{2\pi}{h^2 c^2} \frac{x^3}{e^{x/k_B T} - 1}, \quad (1.35)$$

som gir med $hc = 1240$ eVnm

$$M_x(T) = \frac{2\pi}{(1240)^2} \frac{x^3}{e^{x/k_B T} - 1}. \quad (1.36)$$

Temperaturen er også uttrykt i eV. En temperatur på 1 eV (husk at 1eV = 1.6×10^{-19} J) svarer derfor til

$$T = 1.60 \times 10^{-19} / (1.38 \times 10^{-23}) = 11594 \text{ K}.$$

Vi kan utlede Stefan-Boltzmanns lov vha. Plancks kvantiseringshypotese. Vi trenger da

$$M(T) = \int_0^\infty M_\nu(T) d\nu = \int_0^\infty \frac{2\pi \nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu, \quad (1.37)$$

og med variabel bytte $x = h\nu/k_B T$ får vi

$$M(T) = \frac{2\pi k_B^4}{c^2 h^3} T^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx, \quad (1.38)$$

og med

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}, \quad (1.39)$$

får vi

$$M(T) = \sigma T^4, \quad (1.40)$$

med

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} = 5.676 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4, \quad (1.41)$$

i godt samsvar med verdier fra empiriske data.

Det viktige budskapet er at Planck forlot den klassiske måten å regne ut den midlere energien $\langle E \rangle$. Istedet for å tillatte alle mulige verdier av energien, krevde han at kun bestemte diskrete verdier kunne tas med i utregningen av $\langle E \rangle$.

Dette leder oss til en digresjon om fordelingsfunksjoner, litt statistikk og hvorfor vi ofte betrakter kun midlere verdier av størrelser i fysikk. Mye av dette vil dere få i større detalj i FYS2160.

Det er dog en ting som er viktig å ha klart for seg. Planck hadde dataene foran seg! og visste dermed hva svaret skulle være og prøvde å tilpasse dataene med ulike funksjoner. Det er på dette viset vi ofte går fram i fysikk. I mange tilfeller har vi data fra eksperiment som vi ikke kan forklare med gjeldende teorier, andre ganger har vi teoretiske prediksjoner på fenomen som ikke er målt/observert. Fysikk representerer syntesen av eksperiment og teori med den målsetting å avdekke bevegelseslovene til naturen.

1.3.1 Maxwells hastighets og energifordeling, klassisk

Materialet her er bakgrunnsmateriale, og gjennomgå i dybde i FYS2160. Men vi trenger noen begrep for å forstå hvordan en kan regne ut midlere energi $\langle E \rangle$. I tillegg, vil begrepet om sannsynlighetsfordeling og normering være sentrale i vår diskusjon av kvantemekanikken. Det er en annen viktig grunn til at vi ofte bruker midlere verdier. Det skyldes at fysiske systemer involver så mange frihetsgrader, bare tenk på Avogadros tall!, at vi ikke vil være i stand til å regne med alle. En fullstendig mekanisk beskrivelse av et makroskopisk system som en gass av hydrogenatomer er uoverkommelig, og heller ikke ønskelig. Nedskrevet på papir måtte det atskillige billass med begynnelsesbetingelser til for å beskrive bare et gram av en slik hydrogen gass. Vi er egentlig bare interessert i visse midlere egenskaper ved atomenes dynamikk. Derfor betrakter vi som regel et system ved likevekt og ser på midlere størrelser, slik som midlere hastighet, energi osv. Makroskopiske systemer i likevekt beskrives f.eks. med termodynamiske størrelser som trykk P og temperatur T . For å regne ut slike størrelser trenger vi en del begrep fra sannsynlighetslære og statistikk.

Hvis vi tenker på statistikk og sannsynlighetsregning, så innfører vi begrepet sannsynlighet for at ei hending kan skje. F.eks., sannsynligheten P for å få 1,2,3,4,5 eller 6 ved et terningkast er gitt ved $P = 1/6$. Kaller vi et slikt utfall av terningkast for ei hending, gir summen over alle hendinger

$$\sum_{i=1}^6 P_i = \sum_{i=1}^6 \frac{1}{6} = 1, \quad (1.42)$$

summen av alle sannsynligheter er lik 1. Vi sier da også at summen er normalisert. Hvis vi ønsker å finne gjennomsnittsverdien til en størrelse x er den definert ved

$$\langle x \rangle = \frac{\sum_i x P_i}{\sum_i P_i}, \quad (1.43)$$

hvor leddet i nevneren sørger for at fordelingen over sannsynligheter er normert. Sannsynlighetene for terningkastene tar kun diskrete verdier. Vi kaller derfor fordelingen ovenfor for ei diskret fordeling. Men vi kan også ha kontinuerlige sannsynlighetsfordelinger. Et viktig eksempel i fysikk er Maxwells hastighetsfordeling². Den er gitt ved

$$\frac{df}{dv} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2k_B T} \quad (1.44)$$

med

$$\int_0^\infty \frac{df}{dv} dv = 1 \quad (1.45)$$

dvs at den er normalisert. Tolkningen av $df/dv dv$ er at den gir brøkdelen av partikler som har en hastighet mellom v og $v + dv$ ved en gitt temperatur T .

Dersom vi ønsker å regne ut en midlere hastighet trenger vi å regne ut

$$\langle v \rangle = \frac{\int_0^\infty v df/dv dv}{\int_0^\infty df/dv dv}. \quad (1.46)$$

For Maxwells fordeling i likning (1.44) er nevneren allerede normalisert og lik 1. Midlere hastighet blir

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty v 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2k_B T} dv. \quad (1.47)$$

Vi trenger altså å regne ut integral av typen

$$\int_0^\infty v^n e^{-\beta v^2} dv. \quad (1.48)$$

Disse kan finnes slik: for n ulike, velg ny variabel $t = \beta v^2$ og du får et integral av typen

$$\int_0^\infty (t/\beta)^{(n-1)/2} e^{-t} dt, \quad (1.49)$$

hvor $n - 1$ er et like tall. For like n trenger vi kun å foreta $n/2$ differensiasjoner m.h.p. β av integralet $\int_0^\infty e^{-\beta v^2} dv = 1/2\sqrt{\pi/\beta}$. Ønsker vi midlere hastighet $\langle v \rangle$ finner vi da

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}, \quad (1.50)$$

eller dersom vi ønsker $\langle v^2 \rangle$ finner vi

$$\langle v^2 \rangle = \frac{3k_B T}{m}, \quad (1.51)$$

noe som igjen gir en midlere energi på

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3k_B T}{2}. \quad (1.52)$$

Det var dette resultatet som ga det klassiske resultat for frekvensfordelingen av e.m. stråling. Vi kan også regne ut det siste uttrykk vha. energifordelingen

$$\frac{df}{dE}. \quad (1.53)$$

²Denne fordelingen utledes ikke her, og er ikke del av pensum

Bruker vi $E = 1/2mv^2$ har vi $dE = mv dv$ noe som igjen gir

$$\frac{df}{dE} = \frac{dv}{dE} \frac{df}{dv} = \frac{4\pi}{mv} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2k_B T}, \quad (1.54)$$

og setter vi inn at $v^2 = 2E/m$ får vi energifordelingen

$$\frac{df}{dE} = 2\pi \left(\frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \sqrt{E} e^{-E/k_B T}, \quad (1.55)$$

med

$$\int_0^\infty \frac{df}{dE} dE = 1, \quad (1.56)$$

dvs. at den er normalisert. Ønsker vi så å finne midlere energi har vi

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty E \frac{df}{dE} dE = \frac{3k_B T}{2}, \quad (1.57)$$

som er det klassiske resultat. Innsatt i uttrykket for frekvensfordelingen $M_\nu(T)$ i likning (1.30) får vi uttrykket til Rayleigh og Jeans. Vi fant også at radiansen divergerer, se igjen likning (1.31).

Vi kan oppsumere dette avsnittet med følgende. Vi kan skrive energifordelingsfunksjonen som

$$\frac{df}{dE} = g(E) e^{-E/k_B T}, \quad (1.58)$$

hvor $g(E)$ er en funksjon som kalles tettheten av tilstander med en gitt energi E , men eksponensial faktoren $e^{-E/k_B T}$ kalles Maxwell-Boltzmann faktoren og uttrykker sannsynligheten for å finne systemet i en tilstand med gitt energi E .

Og nå kommer det som er viktig:

Klassisk så tillater vi alle verdier av E i beregningen av forventningsverdien $\langle E \rangle$, dvs vi har et integral

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty E g(E) e^{-E/k_B T} dE}{\int_0^\infty g(E) e^{-E/k_B T} dE}, \quad (1.59)$$

hvor alle E er tillatt. Det resulterte i den såkalte ultrafiolette katastrofen.

1.3.2 Plancks hypotese

Plancks radikale hypotese var å foreslå at kun bestemte energier i beregningene av $\langle E \rangle$ er tillatt, dvs.

$$E_n(\nu) = nh\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.60)$$

hvor ν er frekvensen til den e.m. strålingen og h er en universell konstant var tillatt. Vi sier da at energien er kvantisert! De tillatte energitilstandene kalles **kvantetilstander** og heltallet n kalles et **kvantetall**. Det betyr at forventningsverdien i likning (1.59) blir

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^\infty E_n g(E_n) e^{-E_n/k_B T}}{\sum_{n=0}^\infty g(E_n) e^{-E_n/k_B T}}. \quad (1.61)$$

Setter vi inn $E_n = nh\nu$ og tar bort leddet $g(E_n)$ får vi

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^\infty nh\nu e^{-nh\nu/k_B T}}{\sum_{n=0}^\infty e^{-nh\nu/k_B T}}. \quad (1.62)$$

Setter vi så $x = h\nu/k_B T$ får vi

$$\langle E \rangle = k_B T \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n x e^{-n x}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n x}}. \quad (1.63)$$

Summen

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n x} = \frac{1}{1 - e^{-x}}, \quad (1.64)$$

og bruker vi at

$$\sum_{n=0}^{\infty} n x e^{-n x} = -x \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n x}, \quad (1.65)$$

får vi at

$$\langle E \rangle = k_B T x \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (1.66)$$

slik at frekvensfordelingen blir

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

eller dersom vi ønsker uttrykket gitt ved bølgelengden λ (vis dette) har vi

$$M_\lambda(T) d\lambda = \frac{2\pi h c^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1} d\lambda. \quad (1.67)$$

Som vist i likning (1.40), ga dette oss også et korrekt uttrykk for Stefan-Boltzmanns lov.

Det spesielle med e.m. stråling i et hulrom er at det gir opphav til stående e.m. bølger som utviser enkle harmoniske svingninger. Det særegne med denne type problem er at energien antar diskrete verdier³.

Plancks hypotese (1900) kan dermed formuleres som følger: Enhver fysisk størrelse som utviser enkle harmoniske svingninger har energier som tilfredsstiller

$$E_n(\nu) = n h \nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

hvor ν er frekvensen til svingningen og h er en universell konstant.

En idealisert pendel utviser også enkle harmoniske svingninger, og vi kan jo da stille spørsmålet om hvorfor kan vi beskrive en pendel vha. klassisk fysikk og ikke e.m. stråling?

Dette spørsmålet belyser et viktig aspekt ved vår forståelse av fysikk og framgangsmåter for å studere fysiske systemer. *Det dreier seg om energiskalaer og størrelsen på systemet.* Gang på gang vil vi komme over eksempler på det i kurset. Dette dikterer igjen hvilken fysisk teori som er anvendbar.

La oss bruke pendelen til å se nærmere på dette. Anta at vi har en idealisert pendel, vi ser bort fra luftmostand osv. Vi gir pendelen en masse $m = 0.01$ kg, en lengde på $l = 0.1$ m og vi tillater at den kan svinge ut en vinkel på maks $\theta = 0.1$ rad.

Vi spør deretter om hvor stor energiforskjellen er mellom kvantetilstander målt i forhold til maks potensiell energi pendelen kan ha når vi anvender Plancks hypotese. Maks potensiell energi E er gitt ved

$$E = mgs = mgl(1 - \cos\theta) = 5 \times 10^{-5} \text{ J}, \quad (1.68)$$

³I tilknytning Schrödingers likning, skal vi vise dette for ei fjær som svinger og er fastspenn i begge ender.

hvor s er maksimal høyde som pendelen kan oppnå ved utsving og g er tyngdeakselerasjonen. Svingefrekvensen ν finner vi også ved å anvende en velkjent travers

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{g}{l}} = 1.6 \text{ s}^{-1}. \quad (1.69)$$

Nå skal vi anvende Plancks hypotese for å regne energiforskjellen ΔE

$$\Delta E = (n + 1)h\nu - nh\nu = h\nu \sim 10^{-33} \text{ J}. \quad (1.70)$$

Forholdet

$$\frac{\Delta E}{E} \sim 10^{-29}! \quad (1.71)$$

viser at vi kunne praktisk talt satt denne energiforskjellen lik null. Det finnes ikke noe måleinstrument som kan måle en slik energiforskjell. I klassisk fysikk kan vi derfor sette $h = 0$.

Problemet dukker opp når $\Delta E/E$ ikke er neglisjerbar. For høgfrekvent e.m. stråling er dette tilfelle, og da kunne ikke klassisk fysikk lenger forklare fenomenene. Dersom E er så liten at $\Delta E = h\nu$ er på samme størrelse, da er vi på energiskalaer som ikke lenger kunne og kan forklares uten at ny teori anvendes.

Vi skal se på mange flere slike eksempler i dette kurset.

1.4 Fotoelektrisk effekt

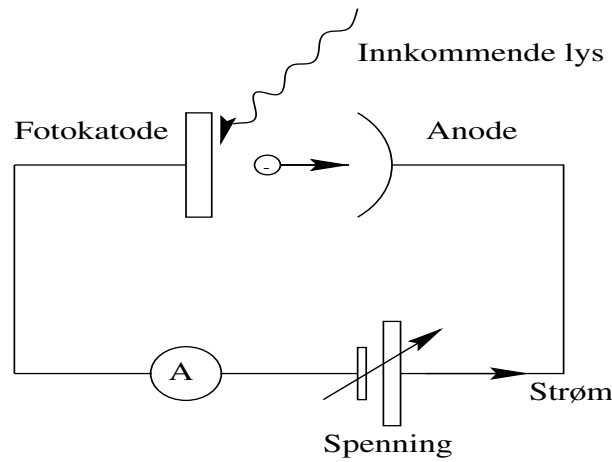
Den fotoelektriske effekt⁴ ble bla. studert av Hertz i 1886 og 1887, og ble da brukt som en bekreftelse på eksistensen av e.m. bølger og av Maxwells e.m. teori for lysforplantning. Figur 1.2 viser et oppsett for måling av fotoelektrisk effekt.

Oppsumert var det tre viktige egenskaper ved fotoelektrisk effekt som ikke kunne forklares vha. e.m. bølgeteori for lys:

1. Når intensiteten til lysstrålen økes, skal også amplituden til den oscillerende elektriske vektoren \mathbf{E} øke. Siden kraften feltet utøver på et elektron er $e\mathbf{E}$, burde også den kinetiske energien til elektronene øke. Men eksperiment viste at $K_{max} = eV_S$ var uavhengig av intensiteten. Dette har blitt utførlig uttestet for et intensitetssprang på 10^7 .
2. I henhold til klassisk e.m. teori, skal den fotoelektriske effekt forekomme for enhver frekvens, gitt at lyset er intenst nok til å gi den nødvendige energien til elektronene. Dette var ikke tilfelle, jfr. oppdagelsen av en nedre frekvens ν_0 . For lavere frekvenser forekommer ikke fotoelektrisk effekt, et resultat som er uavhengig av intensiteten til lyset.
3. I henhold til klassisk teori, skulle det, når lys faller inn på et materiale, ta litt tid fra når elektronene begynner å absorbere e.m. stråling til de slipper fri fra materialet. *Heller ikke noen slik tidsforskjell er detektert.*

La oss se på det siste først. Anta at vi har ei plate av kalium som er 1 m fra en lyskilde som sender ut e.m. stråling med effekt $1 \text{ W} = 1 \text{ J/s}$. Vi antar deretter at et elektron i denne kaliumplaten opptar et sirkelformet område med radius 10^{-10} m . Energien som trengs for å løsribe det svakest bundne elektron i kalium er 2.1 eV. Spørsmålet vi stiller oss da er hvor lang tid tar det før dette ene elektronet oppnår en energi på 2.1 eV når vi sender e.m. stråling fra lyskilden.

⁴Svarer til kap 2-5 i boka, sidene 99-103. I diskusjonen her henviser jeg til figurer i læreboka.



I tillegg til dette fant en også at den kinetiske energien K_{max} til de utsendte elektronene var uavhengig av intensiteten til strålingen og at det var en nedre frekvens den e.m. strålingen kunne ha for utsending av elektroner. I tillegg, utviste det påsatte potensialet V_S også en minste verdi for utsending av elektroner. Figur 1.3 viser skjematisk den resulterende fotostrømmen som funksjon av påsatt spenning og kinetisk energi som funksjon av frekvensen til den innkommende e.m. stråling.

Figur 1.2: Skjematisk oppsett for fotoelektrisk effekt.

Tenker vi oss at lyskilden sender ut e.m. stråling som sfæriske bølger, vet vi at overflaten til denne lyskjeglen ved 1 m fra lyskilden er gitt ved $A = 4\pi 1^2 \text{ m}^2$. Arealet elektronet opptar er $A_e = \pi r^2 = \pi 10^{-20} \text{ m}^2$. Total energi R som treffer A_e per sekund er da

$$R = 1 \text{ W} \frac{\pi 10^{-20}}{4\pi} = 0.015 \text{ eV/s}, \quad (1.72)$$

som igjen betyr at vi trenger

$$t = \frac{2.1}{0.015} \text{ s} \sim 135 \text{ s}, \quad (1.73)$$

for at dette elektronet skulle få nok energi til å kunne løsrives fra metallplaten. En slik tidsforsinkelse er aldri observert, tvertimot, elektronene blir emittert momentant.

For å løse de ovennevnte problemene med fotoelektrisk effekt, foreslo Einstein i 1905⁵ at den e.m. energien er kvantisert i konsentrerte deler (energibunter), som senere er blitt til partikler med null masse som reiser med lysets fart, fotonene. Han antok at energien til et slikt foton var bestemt av dets frekvens

$$E = h\nu. \quad (1.74)$$

Han antok også at i den fotoelektriske effekt blir denne energibunten (fotonet) fullstendig absorbert av elektronet. Energibalansen uttrykkes ved

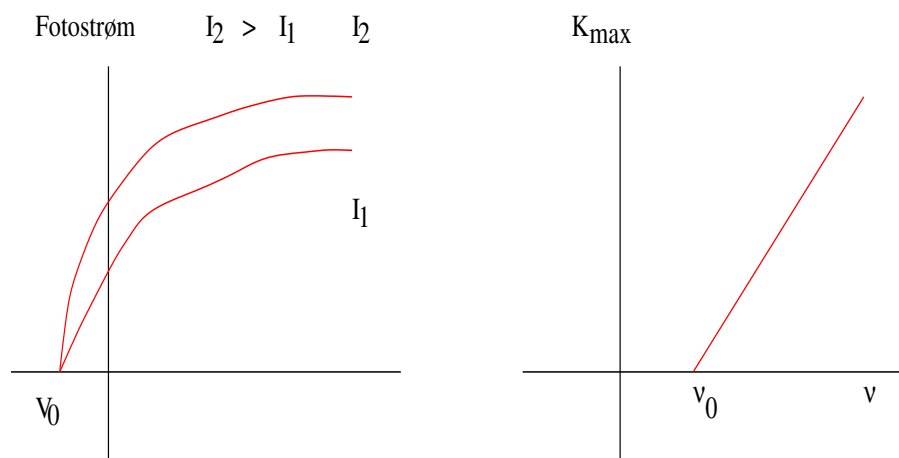
$$K_{max} = h\nu - w \quad (1.75)$$

hvor w er arbeidet som kreves for å fjerne et elektron fra metallet.

Dersom vi ser på de svakest bundne elektroner har vi

$$K_{max} = h\nu - w_0, \quad (1.76)$$

⁵Samme år som han utviklet relativitetsteorien.



Figur 1.3: Fotostrøm som funksjon av påsatt spenning og kinetisk energi som funksjon av frekvensen til den innkommende e.m. stråling.

hvor w_0 kalles arbeidsfunksjonen, den minste energi som trengs for å fjerne det svakest bundne elektron for å unnsnippe de tiltrekkende kreftene (Coulomb) som binder et elektron til et metall. Arbeidsfunksjonen w_0 er spesifikk for ethvert materiale og har typiske verdier på noen få eV.

Når det gjelder problemene med klassisk teori, så kan vi se fra de to siste likningene at hva angår punkt 1), så er det nå samsvar med eksperiment og teori. Det faktum at K_{max} er proporsjonal med $E = h\nu$ viser at den kinetiske energien elektronene har er uavhengig av intensiteten til den e.m. strålingen. Dersom vi dobler intensiteten, så påvirker ikke det energien til et foton, som er gitt ved kun $E = h\nu$.

Hva angår punkt 2), ser vi at vi kan bestemme den minste frekvensen ved å sette den kinetiske energien til det frigjorte elektron lik null. Da har vi

$$h\nu_0 = w_0, \quad (1.77)$$

og kan dermed forklare observasjonen av en minste tillatt frekvens

Innvending nummer tre kan også løses dersom en tenker seg at det er et foton som treffer elektronet, og overfører det meste av sin energi til elektronet. Da trenger en ikke å bombardere med jevnt fordelt stråling metallplaten av kalium. I tillegg er antall fotoner som sendes inn enormt. En enkel betraktning kan hjelpe oss her. Anta at vi sender inn monokromatisk (ensfarget) gult lys med bølgelengde $\lambda = 5890 \text{ \AA}$ hvor $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$. Effekt per arealenhet M til flaten til lyskjeglen 1 m fra lyskilden er da (dvs. e.m. energi per areal per sekund)

$$M = \frac{1 \text{ J/s}}{4\pi \text{ m}^2} = 8 \times 10^{-2} \text{ J/m}^2\text{s} = 5 \times 10^{17} \text{ eV/m}^2\text{s}, \quad (1.78)$$

og regner vi ut energien til hvert foton har vi

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 3.4 \times 10^{-19} \text{ J} = 2.1 \text{ eV}. \quad (1.79)$$

Totalt antall fotoner N per areal per sekund blir

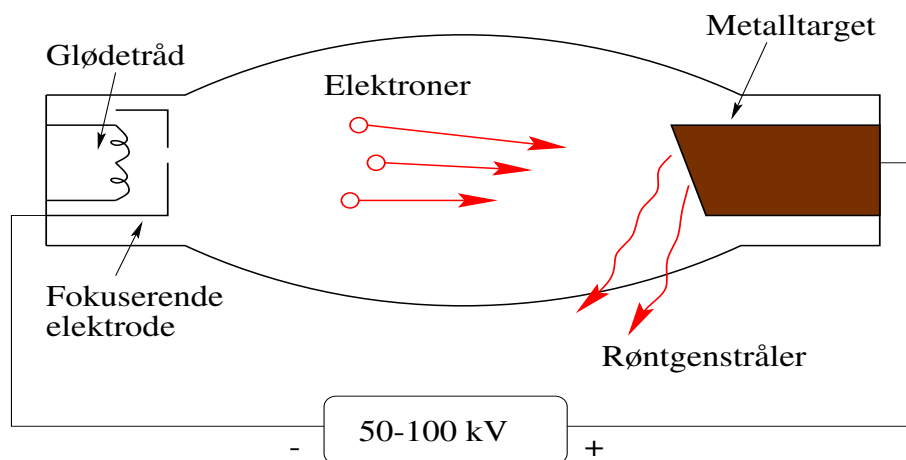
$$N = \frac{5 \times 10^{17} \text{ eV/m}^2\text{s}}{2.1 \text{ eV}} = 2.4 \times 10^{17} \text{ foton/m}^2\text{s}, \quad (1.80)$$

som betyr at sannsynligheten for at et foton treffer et elektron og overfører det meste av sin energi er nokså stor.

Merk at fotonene blir absorbert i den fotoelektriske prosess. Det betyr at dersom vi skal bevare bevegelsesmengde og energi, så må elektronene være bundet til atomet/metallet. Vi skal diskutere dette etter avsnittet om Compton effekten.

1.5 Röntgen stråling

Röntgen stråling⁶ svarer til det motsatte av fotoelektrisk effekt. Her sendes energirike elektroner som akselereres gjennom et potensialfall V_R på flere tusen V mot et metall. Figur 1.4 viser en skisse over et eksperimentelt oppsett for produksjon av Röntgenstråling.



Figur 1.4: Eksperimentelt oppsett for produksjon av Röntgenstråling.

Elektronene vekselvirker med atomene i metallet via Coulomb vekselvirkningen, og overfører bevegelsesmengde til atomene. Elektronene bremses dermed ned, og i denne deakselerasjonen sendes det ut e.m. stråling i Röntgen området. Denne strålingen som skyldes nedbremsingen av elektronet kalles Bremsstraahlung fra tysk for bremsestråling. Dette svarer til e.m. stråling med frekvenser i størrelsesorden $10^{16} - 10^{21}$ Hz, bølgelengder i størrelsesorden $10^{-7} - 10^{-13}$ m og energier for fotoner i størrelsesorden $10^1 - 10^6$ eV.

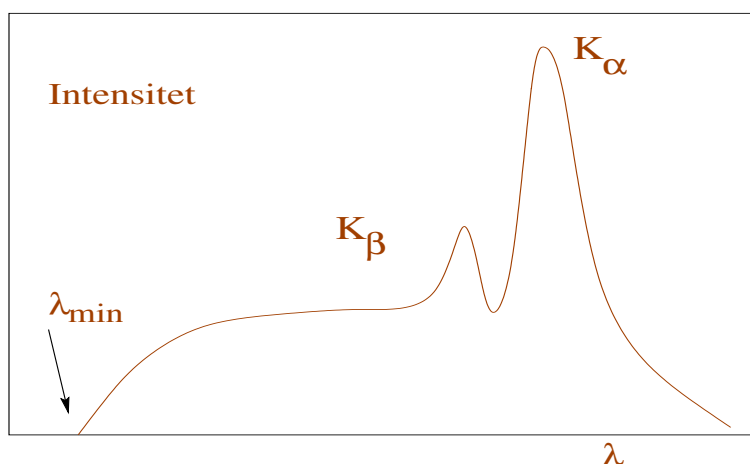
Idet elektronet bremses ned, kan vi anta at det vekselvirker mange ganger med atomene i materialet og dermed får vi et kontinuerlig energispektrum for utsendt e.m. stråling i Röntgen området, slik som vist i figur 1.5. De to toppene K_α og K_β skyldes bestemte eksiterte tilstander i metallet brukt under eksperimentet, se igjen figur 1.4. Vi kommer tilbake til dette under vår diskusjon om det periodiske systemet.

Dersom vi antar at atomene er mye tyngre enn det enkelte elektron, kan vi idealisere prosessen til å være gitt ved

$$e^- \rightarrow e^- + \gamma, \quad (1.81)$$

hvor vi heretter i dette kurset kommer til bruke indeks γ for fotoner og e^- for elektroner. Kaller vi den

⁶Henvisning til boka er kap 2-6, sidene 103-107.



Figur 1.5: Intensitets fordeling fra Röntgenstråling.

kinetiske energien til elektronet før støtet for K_e og den etter for K'_e har vi følgende energibalanse

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = K_e - K'_e. \quad (1.82)$$

Det en observerte ved Röntgen stråling var at det fantes en minste bølgelengde for utsending av Röntgen stråling, noe som ikke kunne forklares vha. klassisk e.m. teori. Dette svarer igjen til en maksimal energi som fotonene kan ha. Med en gitt innkommende kinetisk energi for elektronene, observerte en ulike frekvens(bølgelengde)fordelinger for den e.m. strålingen. Men, felles for alle kinetiske energier var en minste bølgelengde.

Dersom vi antar at elektronet har null kinetisk energi etter støtet, dvs. at det kommer til ro, har vi

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = K_e, \quad (1.83)$$

som igjen gir oss

$$\frac{hc}{\lambda_{min}} = K_e, \quad (1.84)$$

og setter vi inn at $K_e = eV_R$ har vi

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV_R}. \quad (1.85)$$

Det finnes mange eksempler på at når ladde partikler bremses ned så sendes det ut høgenergetisk e.m. stråling. Kosmisk stråling er et slikt eksempel, og hvem har ikke sett Nordlys med det blotte øye?

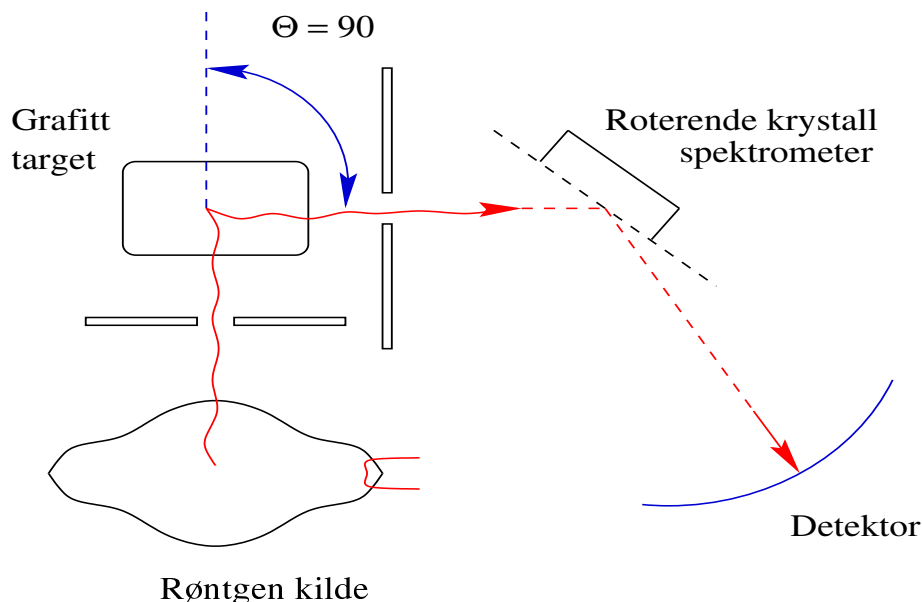
Et mer eksotisk eksempel er såkalt Röntgenstjerner, eller dersom vi bruker det engelske faguttrykket X-ray pulsars og bursters! Pulsarer er hurtigroterende nøytronstjerner i binære stjernesystemer (to stjerner nær hverandre). X-ray pulsarer og bursters er antatt å være nøytronstjerner som mottar masse fra en annen stjerne i et binærsystem. Massen til den andre stjerna kan være flere solmasser for pulsarer ($M > 10M_\odot$) eller ha liten masse ($M < 1.2M_\odot$) for bursters. Den utsendte e.m. stråling i Röntgenområdet antas å skyldes masse som samles enten ved polene eller over hele stjerna. Når masse slynges ned mot stjerna vil ulike kjernefysiske reaksjoner sende ut e.m. stråling i Röntgenområdet.

1.6 Compton spredning

I et eksperiment fra 1923⁷, sendte Compton inn høgenergetiske fotoner (Röntgen stråler) mot en grafittplate og observerte bla. en forskjell i bølgelengde mellom den innkommende e.m. stråling og den utgående. Siden energien er knytta til bølgelengden via

$$E = \frac{hc}{\lambda} = h\nu,$$

betyr ei forandring i bølgelengde en energiforandring. Figur 1.6 viser en skisse av oppsettet for Comptons forsøk. Figur 1.7 viser, skjematisk, intensitetsfordelingen for ulike spredningsvinkler θ for den e.m. strå-



Figur 1.6: Eksperimentelt oppsett for Comptons forsøk.

lingen. Compton antok at denne spredningsprosessen kunne idealiseres som et støt mellom et tilnærma fritt elektron i grafittplate og høgenergetiske fotoner. Dvs. at reaksjonen er gitt ved

$$\gamma + e^- \rightarrow \gamma + e^-. \quad (1.86)$$

Dersom fotonet skulle kunne overføre all sin energi til elektronet, vil vi ha en prosess av typen

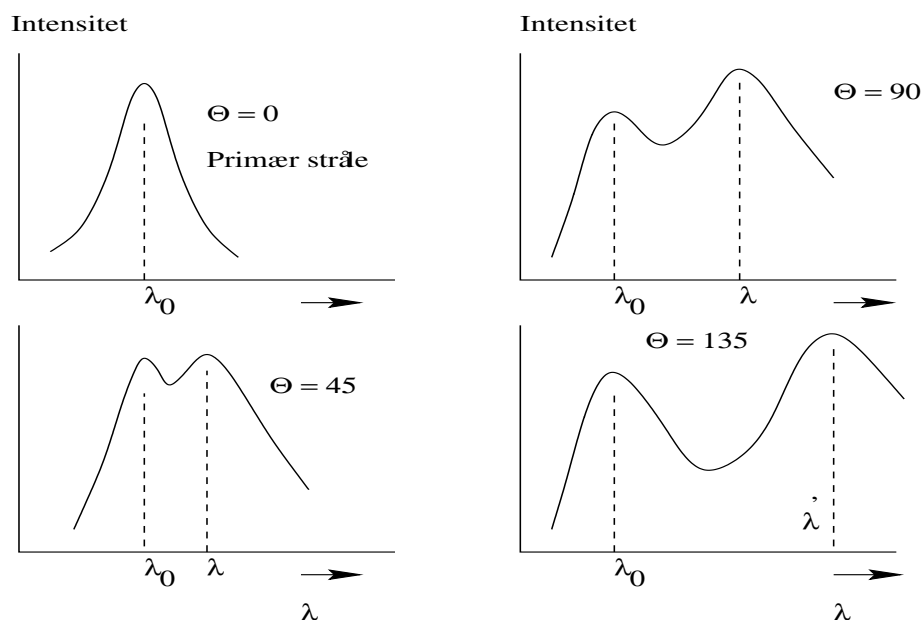
$$\gamma + e^- \rightarrow e^-, \quad (1.87)$$

og som vi skal nedenfor så strider en slik prosess med bevaring av energi og bevegelsesmengde. Vi kunne også tenke oss at fotonet kreerte et elektron, dvs.

$$\gamma \rightarrow e^-. \quad (1.88)$$

En slik prosess er også umulig, ikke bare fordi vi ikke kan tilfredsstille bevaring av energi og bevegelsesmengde, men også fordi ladning ikke er bevart. Et foton har null ladning, mens et elektron har ladning $-e$.

⁷Dekkes av kap 2-7, sidene 107-113.



Figur 1.7: Intensitetsfordeling for e.m. stråling i Comptons forsøk.

I senere eksperiment observerte en også det utgående elektronet. I slik forstand kan vi betrakte denne prosessen som en analog til fotoelektrisk effekt, hvor innkommende e.m. stråling river løs de svakest bundne elektronene. En viktig forskjell er dog at i fotoelektrisk effekt så blir den e.m. stråling i all hovedsak absorbert.

Grunnen til at Compton kunne idealisere sitt spredningseksperiment som et støt mellom et tilnærma fritt elektron og et foton ligger i energien til fotonene, som nå er flere størrelsesordener større enn i fotoelektrisk effekt. Siden energien til de innkommende fotonene E_γ er så stor, betyr det at arbeidsfunksjonen w_0 , som er på noen få eV, kan neglisjeres i energibalansen og vi kan betrakte det hele som et støt mellom et foton og et fritt elektron.

Hvordan kan vi forstå dette? La oss først sette opp resultatet av Comptons regning, dvs. forandringen i bølgelengde ved Compton spredning, gitt ved $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$. Compton viste at den kunne skrives som (se utledning nedenfor)

$$\Delta\lambda = \lambda_C (1 - \cos\theta), \quad (1.89)$$

med

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 0.0243 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad (1.90)$$

og vi ser at $\Delta\lambda$ varierer fra 0 til en maks verdi $2\frac{h}{m_e c}$. λ_C kalles også Comptonbølgelengden. *Legg merke til $\Delta\lambda$ er uavhengig av materiale og bølgelengden til den innkommende e.m. stråling.* Det var dette, som i motsetning til fotoelektrisk effekt med en arbeidsfunksjon w_0 bestemt av materialet, som bla. leda Compton til å anta at prosessen kunne idealiseres vha. et fritt elektron, og ikke et som er bundet til et atom.

Forklaringen ligger simpelthen i energistørrelsene. I fotoelektrisk effekt har vi e.m. stråling i området med synlig lys til ultrafiolett lys. Det betyr at vi har frekvenser i størrelsesorden $10^{15} - 10^{17}$ Hz, noe som tilsvarer bølgelengder i størrelsesorden $10^{-7} - 10^{-8}$ m og energier for fotoner i størrelsesorden $10^0 - 10^2$

eV. Dersom vi ser på vårt eksempel med monokromatisk gult lys, så er forholdet

$$\frac{\lambda_C}{\lambda} \sim 10^{-6}, \quad (1.91)$$

dvs. at vi knapt kan observere en forandring i bølgelengde når vi har med fotoelektrisk effekt å gjøre. Legg også merke til at arbeidsfunksjonen for f.eks. kalium er på 2.1 eV, på størrelse med energien til fotonene.

Med Röntgenstråler derimot, har vi e.m. stråling med frekvenser i størrelsesorden $10^{16} - 10^{21}$ Hz, noe som tilsvarer bølgelengder i størrelsesorden $10^{-7} - 10^{-13}$ m og energier for fotoner i størrelsesorden $10^1 - 10^6$ eV. Dersom vi antar at fotonene har en frekvens på 10^{19} Hz, gir det en energi på 41000 eV og en bølgelengde

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = 3 \times 10^{-11} \text{ m}. \quad (1.92)$$

Ser vi først på λ_C/λ finner vi nå

$$\frac{\lambda_C}{\lambda} = \frac{0.0243 \times 10^{-10} \text{ m}}{3 \times 10^{-11} \text{ m}} = 0.081 \quad (1.93)$$

som betyr at forskjellen i bølgelengde burde være observerbar. Øker vi frekvensen blir forholdet klart større, og dermed større sannsynlighet for å observere ei forandring i bølgelengde. Ser vi deretter på energien, ser vi at 41000 eV er mye større enn typiske energier i fotoelektrisk effekt, og arbeidsfunksjonen w_0 som er på noen få eV. Derfor kunne Compton i dette tilfelle idealisere spredningen av fotoner mot et materiale som spredning av et foton mot et fritt elektron. Det vi har antatt er at den kinetiske energien elektronet får er mye større enn w_0 , og at vi kan neglisjere w_0 . Det vil svare til en situasjon hvor elektronet ikke er bundet, dvs. det er fritt.

Det vi først skal forklare er selve forandringen i bølgelengde. Til slutt skal vi også forklare tilfellet med null bølgeforandring også se igjen figur 1.7.

Fotonet er en partikkel med masse null som reiser med lysets hastighet. For å se at massen må være null, kan vi bruke noen enkle argument fra FY-ME100. Vi har at energien til en fri partikkel med hastighet v er gitt ved

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (1.94)$$

Når vi kombinerer dette med det faktum at fotonene reiser med lysets hastighet c og at energien til et foton er endelig og gitt ved $E = h\nu$, så må massen til fotonet være lik null, ellers vil energien divergere i det ovennevnte uttrykk. Bruker vi også relasjonen

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = pc = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad (1.95)$$

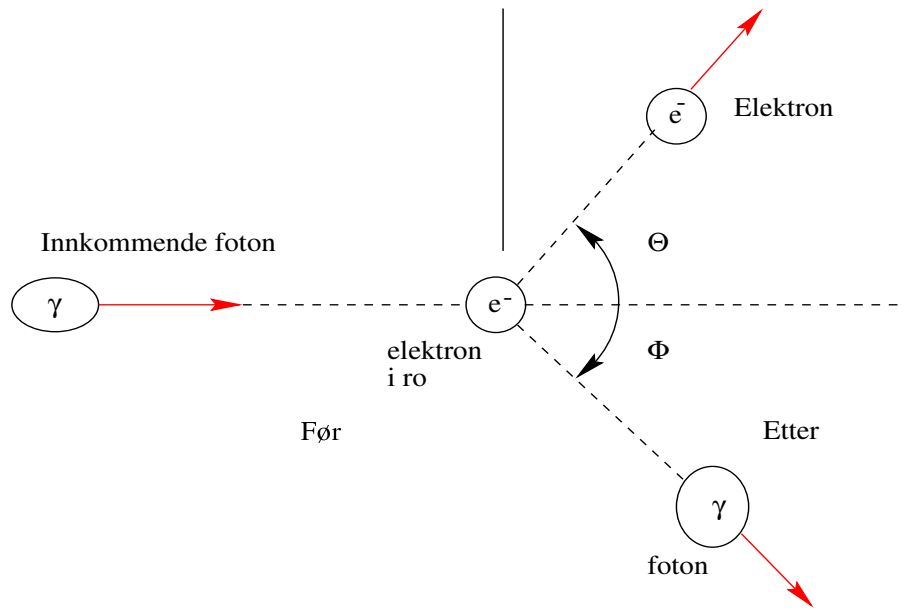
har vi at bevegelsesmengden p er gitt ved

$$p = \frac{h\nu}{c}. \quad (1.96)$$

Når vi skal utlede Comptons formel, trenger vi altså å ta utgangspunkt i to bevaringssatser, energi og bevegelsesmengde, før og etter støtet. Vi antar også at før støtet så er elektronet i ro, dvs. at det har null kinetisk energi og bevegelsesmengde. Vi kan da, se også figur 1.8, lage oss en tabell med definisjonene av energi og bevegelsesmengde for elektroner og fotoner hvor m_e er elektronets masse.

Energibevaring gir

$$E_\gamma + E_e = E'_\gamma + E'_e, \quad (1.97)$$



Figur 1.8: Idealisering av kollisjonen mellom et foton og et elektron. Vi antar at det er et tilnærmet fritt elektron i ro som kolliderer med et foton.

dvs.

$$\frac{hc}{\lambda} + m_e c^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \sqrt{(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4}. \quad (1.98)$$

Tilsvarende har vi for bevaring av bevegelsesmengde

$$\mathbf{p}_\gamma + \mathbf{0} = \mathbf{p}'_\gamma + \mathbf{p}'_e. \quad (1.99)$$

Dersom vi kvadrerer likning (1.98) får vi

$$(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4 = \left(\frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} \right)^2 + 2m_e c^2 \left(\frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} \right) + m_e^2 c^4, \quad (1.100)$$

som gir

$$(p'_e c)^2 = \left(\frac{hc}{\lambda} \right)^2 + \left(\frac{hc}{\lambda'} \right)^2 - 2 \frac{h^2 c^2}{\lambda \lambda'} + 2m_e c^2 \left(\frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} \right). \quad (1.101)$$

Deretter kvadrerer vi likning (1.99) og får

$$(\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}'_\gamma)^2 = (\mathbf{p}'_e)^2, \quad (1.102)$$

som gir når vi multipliserer begge sider med c^2

$$(\mathbf{p}'_e c)^2 = \left(\frac{hc}{\lambda} \right)^2 + \left(\frac{hc}{\lambda'} \right)^2 - 2 \frac{h^2 c^2}{\lambda \lambda'} \cos \theta. \quad (1.103)$$

Setter vi venstresidene i likningene (1.101) og (1.103) like og multipliserer med

$$\frac{\lambda \lambda'}{2hc}, \quad (1.104)$$

Tabell 1.5: Definisjon av energi og bevegelsesmengde før og etter støtet for fotonet og elektronet.

	Før	Etter
Bevegelsesmengde		
γ	$p_\gamma = \frac{h}{\lambda}$	$p'_\gamma = \frac{h}{\lambda'}$
e^-	$p_e = 0$	p'_e
Energi		
γ	$E_\gamma = \frac{hc}{\lambda}$	$E'_\gamma = \frac{hc}{\lambda'}$
e^-	$E_e = m_e c^2$	$E'_e = \sqrt{(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4}$

får vi

$$m_e c^2 (\lambda' - \lambda) - hc = -\cos\theta hc, \quad (1.105)$$

som igjen gir

$$(\lambda' - \lambda) = \Delta\lambda = \frac{hc}{m_e c^2} (1 - \cos\theta) = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta), \quad (1.106)$$

som er Comptons formel. Vi ser at siden bølgelengden til den e.m. strålingen etter støtet er større enn før, så innebærer det at energien til fotonet etter støtet er mindre enn før, dvs. siden

$$\lambda' > \lambda, \quad (1.107)$$

så har vi at

$$E_{\lambda'} = \frac{hc}{\lambda'} < E_\lambda = \frac{hc}{\lambda}. \quad (1.108)$$

Kan så fotonet overføre all sin energi til et fritt elektron? Det betyr at vi tar utgangspunkt i prosessen i likning (1.88), noe som impliserer at fotonet blir annihilert, og at dets energi og bevegelsesmengde etter støtet er null. Tar vi i bruk bevaring av energi og bevegelsesmengde igjen finner vi at energibevaring gir

$$E_\gamma + E_e = E'_e, \quad (1.109)$$

dvs.

$$\frac{hc}{\lambda} + m_e c^2 = \sqrt{(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4}. \quad (1.110)$$

Tilsvarende har vi for bevaring av bevegelsesmengde

$$\mathbf{p}_\gamma + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{p}'_e, \quad (1.111)$$

som gir når vi kvadrerer og multipliserer med c^2

$$(\mathbf{p}'_e c)^2 = \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2. \quad (1.112)$$

Vi kvadrerer igjen likning (1.110) og får

$$(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4 = \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2 + 2m_e c^2 \frac{hc}{\lambda} + m_e^2 c^4, \quad (1.113)$$

som gir, når vi bruker bevaring av bevegelsesmengde

$$\left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2 = \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2 + 2m_e c^2 \frac{hc}{\lambda}, \quad (1.114)$$

som impliserer at

$$2m_e c^2 \frac{hc}{\lambda} = 0, \quad (1.115)$$

i strid med eksperiment, elektronet har en endelig masse $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$. Men vi ser at klassisk er denne prosessen fullt mulig, da setter vi nemlig $h = 0$, og vi har ikke noen inkonsistens med elektronets masse.

Det vi ikke har forklart er hvorfor vi har en topp på Figur 1.7 hvor vi tilsynelatende ikke har noen forandring i bølgelengde. Dette kan forstås på følgende vis. Når vi har en forandring i bølgelengde, vekselvirker egentlig fotonet med de svakest bundne elektronene, og vi idealiserer reaksjonen som et støt mellom et foton og et elektron. Men vi kan jo tenke oss at elektronet er sterkt bundet til atomet, eller at den innfallende e.m. stråling ikke er sterk nok til å sparke ut et elektron. I dette tilfelle kan vi betrakte kollisjonen mellom fotonet og materialet som en kollisjon mellom et foton og et atom, og atomet får en rekyleffekt gjennom kollisjonen. Dersom vi antar at materialet består av karbon, blir reaksjonen vår

$$\gamma + C \rightarrow \gamma + C, \quad (1.116)$$

og i dette tilfelle må vi erstatte massen til elektronet med den til karbonatomet, som er 22000 ganger tyngre enn elektronet. Da blir

$$\lambda_C = \frac{h}{22000m_e c} \sim 10^{-16} \text{ m}, \quad (1.117)$$

og med de aktuelle bølgelengde blir λ_C/λ knapt observerbar!

Som en oppsummering på fotoelektrisk effekt, Röntgen stråling og Compton spredning kan vi si at e.m. stråling utviser både partikkel og bølgeegenskaper. Strålingen, hva den enn måtte være, utviser i noen tilfeller partikkel egenskaper, og andre tilfelle rene bølgeegenskaper slik som diffraksjon og interferens.

Comptons eksperiment utviser begge deler:

- 1) Prinsippene bak målingen av den spredte e.m. strålingen ble gjort vha. standard bølgelære.
- 2) Spredningen påvirker bølgelengden på et vis som kun kan forstås ved å behandle Röntgen strålene som partikler som kolliderer med elektronene i et atom.

Vi kan si at uttrykket

$$E = h\nu$$

har i seg bølgebeskrivelsen ved

$$\lambda \text{ og } \nu \quad (1.118)$$

og partikkelbeskrivelsen ved

$$E \text{ og } p = h/\lambda \quad (1.119)$$

Vi skal legge merke til at både for den fotoelektriske effekt og for Compton spredning, så er det av avgjørende betydning at vi ser på svært små bølgelengder. I grensa $\lambda \rightarrow \infty$ går de kvantemekaniske resultat mot de klassiske. Når vi beveger oss inn i Röntgenstrålingen sitt domene, begynner energiene å bli såpass store at vi kan betrakte kollisjonen som et støt mellom et foton og et elektron som er tilnærminsgvis fritt. Forandringen i bølgelengde blir såpass stor at det er mulig å observere den. Energiskalaen og det faktum at h er liten dikterer hva slags fysisk teori og fysisk forståelse vi må ta i bruk for å forklare eksperiment. Det kan derfor i vår analyse være hensiktsmessig å studere størrelser som

$$\frac{\Delta E}{E},$$

og

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda}.$$

1.7 Oppgaver

1.7.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 1.1

- Energienheten 1 eV (*elektronvolt*) er definert som økningen i kinetisk energi når et elektron akselereres gjennom et potensialsprang på 1 volt. Vis at $1 \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$.
Hva blir energiøkningen når elektronet akselereres i et potensialsprang på 10 V, 50 kV = $5 \times 10^4 \text{ V}$ og 1 MV = 10^6 V ?
Beregn hastigheten elektronene får etter akselerasjon i potensialene nevnt ovenfor når utgangshastigheten $v_0 = 0$.
- Beregn den potensielle energien for to partikler med ladning $e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$ som befinner seg i en avstand $0,1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$. Vis at enheten elektronvolt er en naturlig enhet i dette tilfelle.
- La oss anta at de to partiklene ovenfor er et proton og et elektron. Diskutér forholdet mellom gravitasjons- og elektrostatisk potensiell energi i dette tilfelle.
(Gravitasjons konstanten: $\gamma = 6,67 \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$.)
- Beregn hvileenergien for elektronet og protonet. Under hvilke betingelser må vi regne med relativistiske effekter?

Oppgave 1.2

Anta at sola med radius $6,96 \times 10^8 \text{ m}$ stråler som et svart legeme. Av denne strålingen mottar vi 1370 Wm^{-2} her på jorda i en avstand av $1,5 \times 10^{11} \text{ m}$. Jorda har en radius 6378 km.

- Beregn temperaturen til sola.
- Anta at atmosfæren rundt jorda reflekterer 30% av den innkommende stråling. Hvor mye energi fra solen absorberer den per sekund og per kvadratmeter?

- c) For å være i termisk likevekt, må jorda emittere like mye energi som den absorberer via atmosfæren hvert sekund. Anta at den stråler som et sort legeme. Finn temperaturen. Hva betyr drivhuseffekten?

Oppgave 1.3

Definér uttrykket “svart legeme” (“blackbody”). Plancks strålingslov sier at utstrålt effekt pr. arealenheter og pr. bølgelengde, $dR/d\lambda$, fra et sort legeme er gitt ved

$$\frac{dR}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)},$$

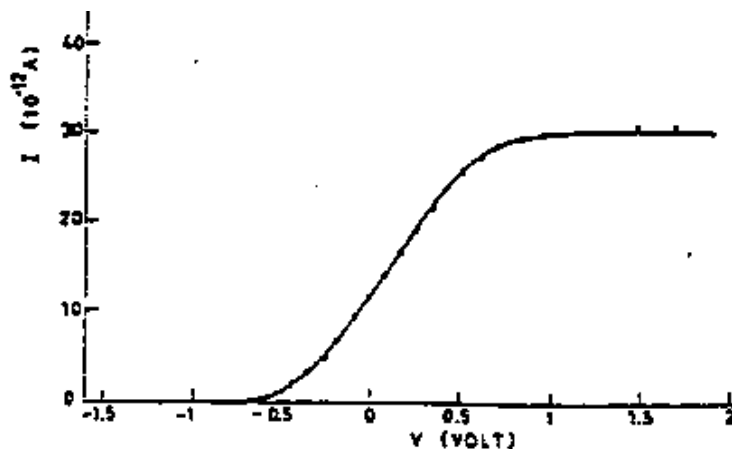
der k er Boltzmanns konstant og T er legemets temperatur. I utledningen av likningen over gjøres en antakelse som bryter med klassisk fysikk. Forklar kort hva denne antakelsen består i. Bruk Plancks lov til å vise Wiens forskyvningslov

$$\lambda_m T = \text{konstant},$$

der λ_m er bølgelengden hvor $dR/d\lambda$ er maksimal (konstanten skal ikke bestemmes, men har verdien $0.00290 \text{ K} \cdot \text{m}$). En del av de astrofysiske objekter som kalles pulsarer sender ut stråling i røntgenområdet. Ved observasjon av en slik pulsar finner man at den utstrålte effekt pr. arealenheter og pr. bølgelengde er størst ved en bølgelengde på 5.58 nm . Anta at pulsaren stråler som et sort legeme og regn ut overflate-temperaturen.

Oppgave 1.4, Eksamen V-1994

- a) Gjør rede for den fotoelektriske effekten. Tegn en figur som viser en eksperimentell oppstilling for å studere denne effekten.
- b) Anta at vi bruker denne oppstillingen til å bestråle et metall med monokromatisk lys, $\lambda = 2.58 \cdot 10^{-7} \text{ m}$. Figur 1.1 viser observerte verdier av strømmen I når spenningen varieres. Forklar forløpet av kurven. Hva skjer hvis intensiteten av lyset økes til det dobbelte?



Figur 1.9: Strøm I som funksjon av spenningen V ved foto-elektrisk effekt.

- c) Bruk figur 1.9 til å bestemme arbeidsfunksjonen for metallet.
- d) Vi bytter nå ut metallet foran med et nytt. Det bestråles med lys med forskjellig bølgelengde. Tabell 1.7.1 viser stoppepotensialet for noen forskjellige verdier av bølgelengden. Bestem ut fra dette arbeidsfunksjonen for det nye metallet, den lavest mulige frekvensen for prosessen og Plancks konstant h .

λ (i 10^{-7} m)	2,536	3,132	3,650	4,047
V_S (i volt)	1,95	0,98	0,50	0,14

Tabell 1.6: Stoppepotensial for forskjellige verdier av bølgelengden.

- e) Forklar hvorfor et foton ikke kan overføre all sin energi og bevegelsesmengde til et fritt elektron.

Oppgave 1.5

En stråle av ultrafiolett lys og med en intensitet på $1.6 \times 10^{-12} \text{ W}$ blitt pluselig satt på og bestråler en metallflate. Ved fotoelektrisk effekt blir elektroner sendt ut fra metallflaten. Den innkommende strålen har et tverrsnitt på 1 cm^2 og bølgelengden svarer til en foton energi på 10 eV. Arbeidsfunksjonen for metallet er 5 eV. Vi skal i det følgende analysere hvor lang tid det vil ta før elektroner emitteres.

- a) Gjør et klassisk estimat basert på den tid det vil ta før et elektron med radius $\approx 1 \text{ Å}$ har absorbert nok energi til å emitteres.
- b) Lord Rayleigh viste imidlertid (Phil. Mag. **32**, (1916), side 188) at dette estimatet er for pessimistisk. Absorpsjonsarealet for et elektron i et atom er av størrelsesorden λ^2 for lys av bølgelengde λ . Beregn den klassiske forsinkelsestiden for emisjon av et elektron.
- c) Kvantemekanisk er det mulig for et elektron å emitteres umiddelbart – så snart et foton med tilstrekkelig energi treffer metallflaten. For å få et estimat som kan sammenlignes med den klassiske verdien beregn det midlere tidsintervall mellom to fotoner i strålen.

Oppgave 1.6

- a) Gjør kort rede for den fotoelektriske effekten, og skissér en eksperimentell oppstilling som kan observere og måle denne effekten.
- b) Den fotoelektriske arbeidsfunksjonen for kalium (K) er 2,0 eV. Anta at lys med en bølgelengde på 360 nm ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) faller på kaliumet. Finn stoppepotensialet for fotoelektronene, den kinetiske energien og hastigheten for de hurtigste av de emitterte elektronene.
- c) En uniform monokromatisk lysstråle med bølgelengde 400 nm faller på et materiale med arbeidsfunksjon på 2,0 eV, og med en intensitet på $3,0 \times 10^{-9} \text{ Wm}^{-2}$. Anta at materialet reflekterer 50 % av den innfallende stråle, og at 10 % av de absorberte fotoner fører til et emittert elektron. Finn antall elektroner emittert pr. m^2 og pr. sec, den absorberte energi pr. m^2 og pr. sec, samt den kinetiske energi for fotoelektronene.

Oppgave 1.7

I et røntgenrør lar vi en elektronstråle gjennomløpe et spenningsfall V før den treffer en anode av wolfram (W). Den resulterende strålingen fra røntgenrøret observeres. Figur 1.5 viser hvordan strålingens intensitet varierer med bølgelengden λ .

- Tegn en skjematisk skisse av et røntgenrør. Gi en kort og kvalitativ beskrivelse av hvordan røntgenstrålingen dannes og typiske trekk ved den jevne kontinuerlige delen av spekteret i figur 1.5.
- Skriv ned og begrunn sammenhengen mellom spenningen V og den minste bølgelengden λ_{\min} for røntgenstrålingen. Gjør det samme for V og den maksimale frekvensen ν_{\max} .

Oppgave 1.8

- Tegn en skjematisk skisse av et røntgenrør. Gi en kort og kvalitativ beskrivelse av hvordan røntgenstrålingen dannes og typiske trekk ved foton-spekteret.
- Hvis et elektron har kinetisk energi $E_k = 10000$ eV, beregn den minste bølgelengden λ_{\min} for de utsendte fotonene.
- Vi antar at vi har røntgenstråler med bølgelengde $\lambda = 1\text{ nm} = 1 \times 10^{-9}\text{ m}$. De faller inn mot en krystall under en vinkel på 45° med innfallsloddet. Dette gir en koherent refleksjon fra krystallen. Beskriv prosessen og beregn ut fra dette avstanden mellom de reflekterende plan i krystallen.
- Når et foton passerer en atomkjerne, kan det omdannes til et elektron–positron par (pardannelse). Finn den minste energien E_ν fotonet kan ha for at denne prosessen kan skje (se bort fra mulige rekyleffekter).

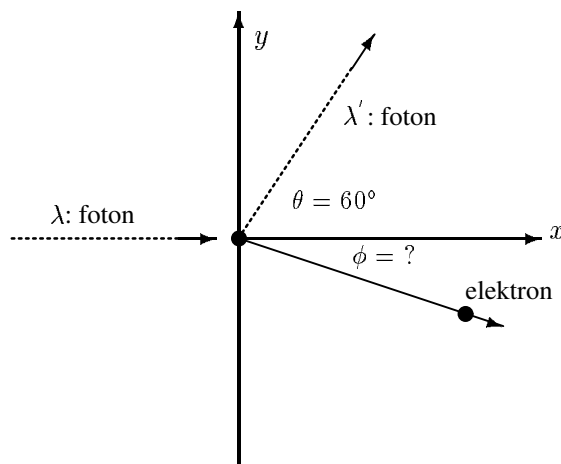
Oppgave 1.9

Et foton er spredt en vinkel θ i forhold til dets opprinnelige retning etter å ha vekselvirket med et fritt elektron som var i ro.

- Gjør rede for hvilke prinsipper som anvendes til å beregne det spredte fotonets bølgelengde og utled Comptons formel.
- Begrunn at bølgelengden for det spredte fotonet er større enn bølgelengden for fotonet før vekselvirkningen (spredningsvinkelen forutsettes å være større enn null).
- Et foton er spredt en vinkel θ etter å ha vekselvirket med et fritt elektron som før vekselvirkningen hadde en bevegelsesmengde som var like stor som fotonets bevegelsesmengde, men motsatt rettet. Hvor stor blir fotonets bølgelengdeforandring i dette tilfellet? Vi antar at elektronet kan beskrives ikke-relativistisk.
- Kan et foton overføre hele sin energi og bevegelsesmengde til et fritt elektron? Begrunn svaret.

Oppgave 1.10

Et foton med bølgelengde $\lambda = 1,00 \cdot 10^{-11}$ m treffer et fritt elektron i ro. Fotonet blir spredt under en vinkel θ , og får en bølgelengdeforandring gitt ved Comptons ligning $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta)$, hvor Comptonbølgelengden er $\lambda_c = 2,426 \cdot 10^{-12}$ m. I denne oppgaven skal vi bare se på det som observeres



Figur 1.10:

under en vinkel $\theta = 60^\circ$ (se figur 1.10). Energi og bevegelsesmengde beregningene skal uttrykkes ved enheten eV.

- Beregn energien og bevegelsesmengden til det innkommende fotonet.
- Finn bølgelengden, bevegelsesmengde og den kinetiske energien til det spredte fotonet.
- Finn den kinetiske energien, bevegelsesmengden og spredningsvinkelen for elektronet.

Oppgave 1.11, Eksamen V-1992

Vi skal i denne oppgaven gjøre bruk av det relativistiske uttrykk for energien av en partikkel

$$E = \sqrt{E_0^2 + (pc)^2}.$$

Som energi enhet bruk eV og eV/c som enhet for bevegelsesmengde.

- Gjør kort rede for de størrelser som inngår i relasjonen ovenfor.
- Anvend relasjonen ovenfor på et foton og finn fotonets energi og bevegelsesmengde når bølgelengden er $500 \text{ nm} = 5,00 \times 10^{-7} \text{ m}$.

Et foton med energi $E = h\nu_0 = hc/\lambda_0$ spres en vinkel θ ved Comptoneffekt mot et elektron som antas å ligge i ro før spredning.

- Tegn en prinsippskisse for et Compton eksperiment og angi spredningsvinklene for fotonet og elektronet etter spredningen.
- Formulé de prinsipper som anvendes til å beregne det spredte fotonets bølgelengde λ' og bruk dem til å utlede Comptons formel

$$\lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta)$$

Røntgenstråler med en bølgelengde $\lambda_0 = 1,21 \times 10^{-1} \text{ nm}$ treffer en målskive med carbon atomer. De spredte røntgenstråler blir observert i en vinkel på 90° .

- e) Beregn bølgelengden λ' av det spredte fotonet ved 90° .
- f) Figur 1.7 viser en topp ved bølgelengden λ_0 . Hvilken prosess skyldes denne toppen?

Kapittel 2

BOHRS ATOMMODELL

2.1 Introduksjon



Figur 2.1: Dansk frimerke som markerer Bohrs atomteori.

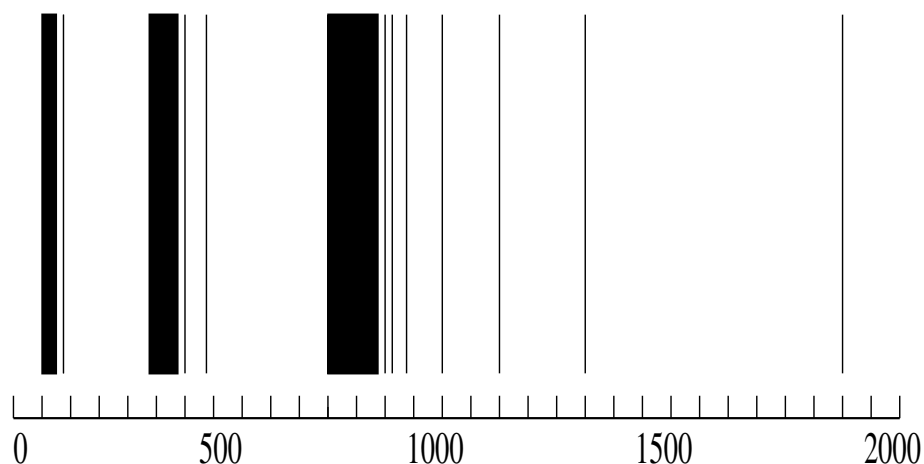
Allerede¹ mot slutten av 1800-tallet fantes det store mengder med eksperimentelle data om spektroskopi fra atomer. Det dreide seg i all hovedsak om utsendt (emittert) e.m. stråling fra atomer. Den viktige observasjonen var at e.m. stråling utsendt fra atomer er konsentrert ved bestemte diskrete bølgelengder. Et av de mest studerte atomer var hydrogenatomet, som består av et proton og et elektron.

Basert på slike diskrete verdier for bølgelengden (spektrallinjer) til den utsendte e.m. stråling, se Figur 2.3, laget Balmer en parametrisering for de observerte spektrallinjene allerede i 1885, med bølgelengden gitt som

$$\lambda = (3645.6 \times 10^{-10} \text{ m}) \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad n = 3, 4, \dots, \quad (2.1)$$

som skal svare til overganger fra eksiterte tilstander i hydrogenatomet til den første eksisterte tilstanden i hydrogen, dvs. $n = 2$. Balmerserien av overganger representerer overganger til den første eksiterte tilstanden fra høyereliggende eksiterte tilstander. Tilsvarende overganger til grunntilstanden kalles for Lymanserien. For å foregripe den påfølgende diskusjonen, kan vi si at tallene $n = 1, 2, 3, \dots$ skal svare

¹Lesehenvisning til læreboka er Kap. 3-5, 3-6, 3-7 og 3-8, sidene 144-170.



Figur 2.2: Foton-spekteret for hydrogen. Bølgelengdene er i nm.

til bestemte kvantetilstander (merk at verdiene er diskrete) for elektronet i hydrogenatomet. Merk at vi heretter, når vi snakker om et atoms energi, så tenker vi på energien til elektronet(ne). Da opererer vi med en energi skala på noen få eV. Tallet $n = 1$ skal svare til grunntilstanden, eller normaltstanden. Denne tilstanden har en energi, som vi skal utlede både vha. Bohrs atommodell og kvantemekanikk, på -13.6 eV. For $n = 2$, som svarer til en energi på -3.4 eV, har vi den første eksiterte tilstand for hydrogenatomet. For $n = 3, 4, \dots$ har vi høyere eksiterte tilstander, se Figur 2.3.

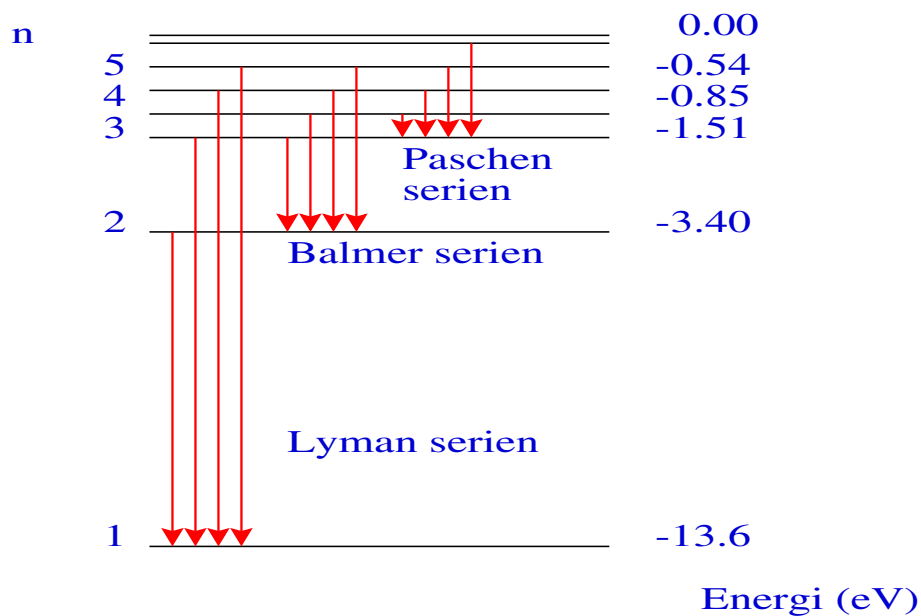
Grunnen til at bla. Balmer studerte overganger fra $n = 3, 4, \dots$ til den første eksiterte tilstand med $n = 2$ skyldtes enkelt og greit at den utsendte stråling var i området for synlig lys til det ultrafiolette. I tillegg var det slik, og er fremdeles slik, at den e.m. stråling som blir sendt ut fra fotosfæren på sola, dvs. solas overflate, ligger i området for synlig lys til det ultrafiolette. Og sola har fra forhistorisk tid alltid vært gjenstand for vår nysgjerrighet og vitebegjær. I området for synlig lys utsendt i fotosfæren, har det negative hydrogenionet avgjørende betydning. Dette ionet har i kort tid to elektroner i bane rundt kjernen og er meget viktig for emisjon og absorpsjon av e.m. stråling i fotosfæren. Dersom vi sammenligner data for utsendt e.m. stråling fra solas overflate og e.m. stråling utsendt fra et svart legeme med temperatur 5800 K (som er ca. temperatur ved solas overflate), ville vi fått en mer hakkete kurve med ulike fordypninger. Disse fordypningene eller toppe, svarer til utsendt stråling fra ulike atomer i solas atmosfære. En bestemt topp er f.eks. gitt ved bølgelengden $\lambda = 656.1$ nm, som igjen svarer til overgangen fra $n = 3$ til $n = 2$ i hydrogenatomet. Denne overgangen fikk benevnning H_{α} .

I 1890 kom Rydberg med en parametrisering for alle mulige overganger i hydrogenatomet, nemlig

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (2.2)$$

med

1. $n_f = 1$ og $n_i = 2, 3, \dots$ svarende til den såkalte Lymanserien, (ultrafiolett) dvs. overganger fra eksiterte tilstander til grunntilstanden,
2. $n_f = 2$ og $n_i = 3, 4, \dots$ svarende til den såkalte Balmer-serien (synlig lys),
3. $n_f = 3$ og $n_i = 4, 5, \dots$ svarende til den såkalte Paschen-serien (infrarødt), osv.



Figur 2.3: Ulike mulige overganger i hydrogenatomet. Grunntilstanden har kvantetall $n = 1$ og energi -13.6 eV, som også svarer til energien for å frigjøre et elektron i hydrogenatomet.

Konstanten R_H er Rydbergkonstanten for hydrogen og gitt ved

$$R_H = 1.0967757 \times 10^7 \text{ m}^{-1}. \quad (2.3)$$

selv om parametriseringene reproduserte dataene, så manglet en mer grunnleggende teori til beskrivelsen av atomer. Først med kvantemekanikken var en i stand til å gi en tilfredsstillende matematisk beskrivelse. Et viktig bidrag mot kvantemekanikken var Bohrs atommodell fra 1913. Bohr utviklet en teori basert på kombinasjonen av klassisk mekanikk og Plancks og Einsteins kvantiseringsteorier fra e.m. stråling. Teorien Bohr presenterte forklarte hydrogenspekteret og dermed Rydbergs formel. La oss se nærmere på postulatene Bohr kom med.

2.2 Bohrs postulat og hydrogenatomet

Vi skal se på de ulike postulatene som Bohr lanserte og diskutere hvert av dem. Postulatene er som følger

1. Et elektron i et atom beveger seg i sirkulære baner om en kjerne. Kreftene er gitt ved tiltrekning via Coulomb vekselvirkningen mellom elektron og kjerne.
2. Klassisk kan et elektron befinne seg i en uendelighet av orbitaler. **Bohr antok at et elektron kan kun bevege seg i baner hvis banespinn L er et heltalls multiplum av $\hbar = h/2\pi$.**
3. Et elektron i en slik bane vil klassisk ha en sentripetalakselevarasjon og skal dermed sende ut e.m. stråling. Ved utsending av energi deakselereres elektronet, og til slutt vil det komme helt inn til kjernen. **Bohr antok derimot at elektronets energi i en gitt orbital er konstant.**

4. E.m. stråling sendes ut dersom et elektron som beveger seg i en orbital med energi E_i , forandrer på et diskontinuerlig vis sin bevegelse slik at energien er gitt ved den til en orbital med energi E_f .

$$\nu = \frac{(E_i - E_f)}{h}$$

2.2.1 Første postulat

Dette postulatet baseres seg på eksistensen av en atomkjerne, og utledningen av energien som et elektron kan ha er basert på betrakninger fra klassisk mekanikk. Siden protonet er ca 2000 ganger tyngre enn elektronet, kan vi i første omgang beskrive systemet som et elektron som kretser om protonet som tyngdepunkt. Dvs. at vi kun tar hensyn til elektronets posisjon og energi som frihetsgrader. Radian r svarer da til avstanden mellom protonet og elektronet. Kreftene F som virker på elektronet er gitt via Coulombtiltrekningen

$$F = k \frac{(-e)(+e)}{r^2}, \quad (2.4)$$

hvor vi heretter skal bruke

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8.988 \times 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2. \quad (2.5)$$

Bruker vi også elektronets ladning kvadrert har vi at $ke^2 = 1.44 \text{ eVnm}$. Dette er en størrelse som er grei å huske, da den forekommer ofte i dette kurset. Bohr antok sirkulære baner. Da er sentripetakselerasjonen gitt ved

$$a_r = -\frac{v^2}{r}, \quad (2.6)$$

og bruker vi Newtons lov med $m_e a_r$ og likning (2.4) får vi at

$$m_e a_r = -m_e \frac{v^2}{r} = -k \frac{e^2}{r^2}. \quad (2.7)$$

Nå kan vi også finne elektronets energi E ved å summere kinetisk energi E_{kin} og potensiell energi E_{pot} . Sistnevnte følger fra likning (2.4)

$$F = -\frac{\partial E_{pot}}{\partial r}, \quad (2.8)$$

slik at vi får

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2}mv^2 - k\frac{e^2}{r}, \quad (2.9)$$

og bruker vi likning (2.7) finner vi

$$E = \frac{1}{2}k\frac{e^2}{r} - k\frac{e^2}{r} = -k\frac{e^2}{2r}. \quad (2.10)$$

Andre postulat

Vi har tidligere sett Plancks og Einsteins kvantiseringspostulat for e.m. stråling $E = nh\nu$. Bohr antok, basert på at elektronet kun kunne bevege seg i bestemte baner, at det var banespinnet til elektronet (bane angulært moment) som var kvantisert, dvs. at banespinnet kunne anta bare diskrete verdier

$$|\mathbf{L}| = m_e v r = n\hbar. \quad (2.11)$$

med $n = 1, 2, 3, \dots$. Fra likning (2.7) har vi at

$$v = \sqrt{\frac{ke^2}{m_e r}}, \quad (2.12)$$

som gir

$$m_e v r = \sqrt{ke^2 m_e r} = n\hbar. \quad (2.13)$$

Kvadrerer vi siste likning har vi definisjonen på Bohrradier

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{m_e k e^2} = a_0 n^2, \quad (2.14)$$

hvor a_0 kalles *Bohrradien*, og danner en viktig lengdeskala i atomfysikk, faste stoffers fysikk og molekylfysikk. Denne minste Bohrradien har verdi

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}. \quad (2.15)$$

Vi ser av uttrykket for Bohrradiene at de tillatte radiene antar diskrete verdier diktert av verdien på heltallet n , som vi kaller *et kvantetall*.

Setter vi uttrykket for r_n i det for energien til elektronet finner vi

$$E = E_n = -k \frac{e^2}{2r_n} = -k \frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} = -13.6 \frac{1}{n^2} \text{ eV}. \quad (2.16)$$

Det viktige budskapet her er at energikvantisering følger nå fra postulatet om kvantisering av banespinn.

Vi kan generalisere uttrykket for energien, radien osv. til å gjelde tyngre atomer ved å erstatte ladningen til et enkelt proton $+e$ med den til Z protoner. Da får vi

$$E_n = -k \frac{Z^2 e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}, \quad (2.17)$$

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{m_e k Z e^2} = a_0 \frac{n^2}{Z}, \quad (2.18)$$

og

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e r_n} = \frac{k Z e^2}{n\hbar}. \quad (2.19)$$

Dersom vi velger $n = 1$ finner vi

$$v_1 = \frac{k Z e^2}{\hbar}, \quad (2.20)$$

og med innsetting av lyshastigheten har vi

$$v_1 = \frac{ck Z e^2}{\hbar c}. \quad (2.21)$$

Nå er $ke^2 = 1.44 \text{ eVnm}$, $\hbar c = 197 \text{ eVnm}$, slik at

$$v_1 \approx Z \times 2.2 \times 10^6 \text{ m/s}, \quad (2.22)$$

og for lette atomer er hastigheten kun noen få prosent av lyshastigheten. Dette forteller oss at Bohrs atommodell, som er basert på ikke relativistisk teori, kun kan anvendes for lette atomer. For $Z \sim 100$,

begynner elektronets hastighet å nærme seg lysets. Vi avslutter dette avsnittet med definisjonen av den såkalt finstrukturkonstanten

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx 1/137, \quad (2.23)$$

som vi kan bruke til å skrive om uttrykkene til Bohrradien

$$a_0 = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}, \quad (2.24)$$

og energien

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2n^2} m_e c^2, \quad (2.25)$$

som likner på det velkjente uttrykket $E = m_e c^2$!

Setter vi inn for ulike n -verdier finner vi $E_1 = -13.6$ eV, $E_2 = -3.4$ eV, $E_3 = -1.5$ eV osv., i bra samsvar med de eksperimentelle verdiene.

2.2.2 Tredje postulat

Hva tredje postulat angår, så tar det utgangspunkt i det faktum at atomer tross alt er stabile. Vi skal se senere i vår diskusjon av kvantemekanikken at vi kan, om enn ikke forklare hvorfor atomer er stabile, ihvertfall lage en teori hvor formalismen gir som resultat at det er stor sannsynlighet for at atomer forblir stabile.

2.2.3 Fjerde postulat

Nå kan vi tenke oss et elektron som er i en orbital n_i med energi E_i går spontant til en orbital n_f hvor $n_f < n_i$. I denne prosessen sendes det ut e.m. stråling og siden energien til $E_i \neq E_f$, så betyr det at energibevaring krever

$$E_i = E_f + E_\gamma = E_f + h\nu. \quad (2.26)$$

Den utsendte e.m. stråling er gitt ved

$$\Delta = h\nu = E_i - E_f, \quad (2.27)$$

dvs.

$$\nu = \frac{(E_i - E_f)}{h} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e Z^2 e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \quad (2.28)$$

Dersom vi nå bruker at $1/\lambda = \nu/c$ og setter inn tallverdier for de ulike konstantene og velger $Z = 1$ (hydrogenatomet) finner vi

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right), \quad (2.29)$$

med

$$R_H = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3 c} = \frac{ke^2}{2a_0\hbar c}, \quad (2.30)$$

som har samme form som Rydbergs formel i likning (2.2). Setter vi deretter inn numeriske verdier finner vi

$$R_H = 1.0973732 \times 10^7 \text{ m}^{-1}, \quad (2.31)$$

mens den eksperimentelle verdien for hydrogenatomet er $R_H = 1.0967757 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$. Vi har altså en teori som reproducerer tilpasningen til de eksperimentelle spektrallinjene gitt i likning (2.2). I neste avsnitt skal vi se at når vi tar hensyn til protonets masse vil verdien av R_H nærme seg den eksperimentelle. På tilsvarende vis kan vi studere absorpsjon av e.m. stråling, en prosess hvor innkommende e.m. stråling eksiterer et elektron til en høyere liggende energitilstand. Energibevaring gir

$$h\nu + E_i = E_f \quad (2.32)$$

og den inverse bølgelengde blir da

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right). \quad (2.33)$$

Til slutt skal vi nevne at vi dersom $n \rightarrow \infty$ får vi $E_\infty = 0$. Dette svarer igjen til at avstanden mellom elektronet og protonet er uendelig stor. Vi sier da at elektronet er fritt. Den energien som trengs for å løsrive et elektron fra hydrogenkjernen kalles ionisasjonsenergien og er gitt ved

$$E_\infty - E_1 = 0 - (-13.6) = 13.6 \text{ eV}. \quad (2.34)$$

2.2.4 Tyngdepunktskorreksjon

Vi har sett at massen til elektronet m_e er mye mindre enn massen til protonet m_p , $m_p \sim 2000m_e$. Dersom vi nå tar utgangspunkt i bevegelse om et felles tyngdepunkt for protonet og elektronet så trenger vi å introdusere en relativ masse for hydrogenatomet μ_H

$$\mu_H = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = m_e \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_p}} = 0.99946 m_e. \quad (2.35)$$

Dette virker som en ubetydelig korreksjon. Men det er nå slik at spektroskopiske data er svært nøyaktige. Dersom vi f.eks. studerer nærmere uttrykket for R_H i likning (2.30) ser vi at det avhenger av massen til elektronet. Tar vi forholdet mellom den utrekna verdien og den eksperimentelle for R_H finner vi

$$1.0973732 \times 10^7 / 1.0967757 \times 10^7 = 1.000545 \quad (2.36)$$

Verdien av $\mu_H = 0.99946 m_e$ gir oss dermed et hint om mulige korreksjoner til den teoretiske verdien av R_H . La oss studere denne mulige korreksjonen i nærmere detalj.

Hittil har vi altså tenkt at siden elektronet er mye lettere enn protonet, kan vi approksimere systemet til et elektron som kretser rundt et tyngdepunktsenter, som er protonet. Dette senteret definerer origo.

La oss heller betrakte systemet som et to-legeme system, hvor vi ser på tyngdepunktsenteret til dette to-legeme systemet som det nye origo. Vi definerer da en relativ avstand

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p, \quad (2.37)$$

hvor \mathbf{r}_e er elektronets avstand til det nye origo og \mathbf{r}_p den tilsvarende for protonet. Siden origo er lokalisert i massesenteret må vi tilfredsstille følgende likning

$$m_e \mathbf{r}_e + m_p \mathbf{r}_p = 0. \quad (2.38)$$

De to siste likningene hjelper oss å finne et uttrykk for

$$\mathbf{r}_e = \frac{m_p}{m_e + m_p} \mathbf{r}, \quad (2.39)$$

og

$$\mathbf{r}_p = -\frac{m_e}{m_e + m_p} \mathbf{r}. \quad (2.40)$$

Bruker vi deretter definisjonen på hastighet $v = dr/dt$ finner vi

$$\mathbf{v}_e = \frac{m_p}{m_e + m_p} \mathbf{v}, \quad (2.41)$$

og

$$\mathbf{v}_p = -\frac{m_e}{m_e + m_p} \mathbf{v}. \quad (2.42)$$

Vha. de to uttrykkene for hastighetene kan vi uttrykke både kinetisk energi og banespinnet for protonet og elektronet. Den kinetiske energien til dette to-legeme systemet blir da

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m_e v_e^2 + \frac{1}{2} m_p v_p^2 = \frac{1}{2} \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} v^2, \quad (2.43)$$

eller

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \mu_H v^2, \quad (2.44)$$

hvor v er den relative hastighet gitt ved $\mathbf{v} = \mathbf{v}_e - \mathbf{v}_p$ og μ_H er den reduserte massen til et system som består av et proton og et elektron.

På tilsvarende vis kan vi uttrykke det totale banespinnet som

$$L = m_e r_e v_e + m_p r_p v_p = m_e \left(\frac{m_p}{m_e + m_p} \right)^2 v r + m_p \left(\frac{m_e}{m_e + m_p} \right)^2 v r, \quad (2.45)$$

eller

$$L = \mu_H v r. \quad (2.46)$$

Bruker vi atter en gang Bohrs kvantiseringspostulat på banespinnet, finner vi at Bohrradiene r_n er gitt ved

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 \mu_H} n^2. \quad (2.47)$$

Dette uttrykket skiller seg fra likning (2.14) ved at vi har den reduserte massen istedet for elektronets masse. Multipliserer vi oppe og nede med massen til elektronet finner vi

$$r_n = \frac{m_e 4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2 \mu_H} n^2 = \frac{m_e}{\mu_H} a_0 n^2, \quad (2.48)$$

eller

$$r_n = \frac{m_e}{\mu_H} a_0 \frac{n^2}{Z}, \quad (2.49)$$

hvor Bohrradien a_0 er gitt ved $a_0 = \hbar^2 / m_e k e^2$. I tillegg har vi introdusert ladningen til kjernen ved Z . For hydrogenatomet har vi $Z = 1$.

I likning (2.16) ga vi et uttrykk for energien vha. Bohrradiene r_n . Setter vi inn det nye uttrykket for r_n finner vi at energien kan skrives som

$$E_n = -k \frac{\mu_H}{m_e} \frac{Z e^2}{2 a_0} \frac{1}{n^2} = -13.6 \frac{\mu_H}{m_e} \frac{Z}{n^2} \text{ eV}, \quad (2.50)$$

som da gir oss den nye Rydbergkonstanten R'_H for hydrogenatomet gitt ved

$$R'_H = \frac{\mu_H}{m_e} R_H = 0.99946 R_H = 1.096781 \times 10^7 \text{ m}^{-1}, \quad (2.51)$$

nærmere den eksperimentelle verdien.

En interessant anvendelse av tyngdepunktskorreksjon var oppdagelsen av deutronet. Deutronet består av et proton, et nøytron og et elektron. Nøytronet har omtrent samme masse som protonet. Setter vi massen til deutrons kjerne lik $2m_p = 2 \times 938 \text{ MeV}/c^2$, finner vi at den reduserte massen til deutronet (med et elektron er)

$$\mu_D = \frac{m_e 2m_p}{m_e + 2m_p} = m_e \frac{1}{1 + \frac{m_e}{2m_p}} = 0.99973 m_e. \quad (2.52)$$

En observerte at for $n_f = 2$ og $n_i = 3$ overgangen i Balmer-serien, den såkalt H_α linjen så fantes det to bølgelengder, en gitt ved $\lambda = 656.1 \text{ nm}$ som vi allerede har diskutert og en ukjent ved $\lambda = 656.3 \text{ nm}$. Dersom vi bruker likning (2.29) og korregerer for tyngdepunktskorreksjoner for henholdsvis hydrogenatomet og deutronet finner vi for hydrogenatomet

$$\frac{1}{\lambda_H} = \frac{\mu_H}{m_e} R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right), \quad (2.53)$$

og for deutronet

$$\frac{1}{\lambda_D} = \frac{\mu_D}{m_e} R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right). \quad (2.54)$$

Ser vi på forholdet

$$\frac{\lambda_D - \lambda_H}{\lambda_H} = \frac{\mu_H - \mu_D}{\mu_D} = \frac{\mu_H}{\mu_D} - 1, \quad (2.55)$$

som skal gi oss forskjellen i bølgelengde. Setter vi inn tallverdier finner vi

$$\frac{\mu_H - \mu_D}{\mu_D} = \frac{m_e(0.99946 - 0.99973)}{m_e 0.99973} = -0.00027, \quad (2.56)$$

som svarer til ei forandring på 0.027%. Dette gir oss ei forandring i bølgelengde mellom hydrogenatomet og deutronet for denne spesielle overgangen på 0.177 nm, i bra samsvar med observerte verdier. Deutronet ble oppdaga i 1932 av Urey, 3 år etter oppdagelsen av nøytronet.

2.2.5 Korrespondanseprinsippet

Bohr formulerte korrespondanse prinsippet slik:

- Kvanteteoriens forutsigelser om oppførselen til et fysisk system skal svare til de for et klassisk system i grensa hvor kvantetallene som bestemmer en tilstand blir veldig store.

Teknisk sett betyr det at den klassiske grense skal nås når kvantetallene blir 'store', f.eks. ved å la kvantetallet n i Bohrs modell bli stort. (Senere i dette kurset skal vi se at kvantemekanikken som teori inneholder automatisk klassisk fysikk som et grensetilfelle.) Vi kan vise dette prinsippet med et enkelt eksempel. La oss se på frekvensen for en overgang fra en tilstand med kvantetall $n + 1$ til en med kvantetall n . Bruker vi likning (2.28)

$$\nu = \frac{(E_{n+1} - E_n)}{h} = \frac{m_e c^2}{4\pi \hbar} (Z\alpha)^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right), \quad (2.57)$$

ser vi at når n er stor kan vi approksimere frekvensen med

$$\nu \approx \frac{m_e c^2}{2\pi \hbar} (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^3}. \quad (2.58)$$

Det klassiske uttrykket for frekvensen er gitt fra FY-ME100 som

$$\nu_{\text{klassisk}} = \frac{v}{2\pi r}. \quad (2.59)$$

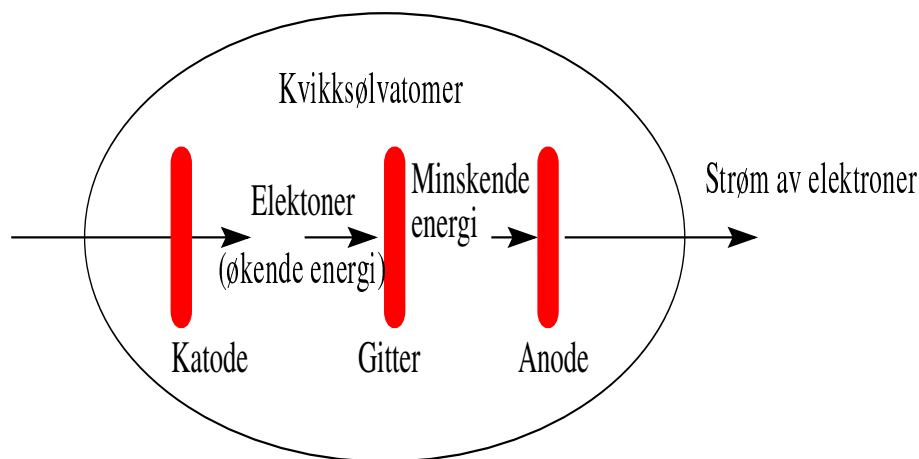
Setter vi så inn uttrykket for Bohrradien har vi

$$\nu_{\text{klassisk}} = \frac{Z\alpha m_e c}{n} \frac{Z\alpha c}{2\pi n^2 \hbar} = \frac{m_e c^2}{2\pi \hbar} (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^3}, \quad (2.60)$$

som svarer til likning (2.58). Legg merke til at det er bare overganger av typen $n + 1 \rightarrow n$ som gir det klassiske resultat. Stråling som svarer til en overgang av typen $n + 2 \rightarrow n$ har ikke noen klassisk analog.

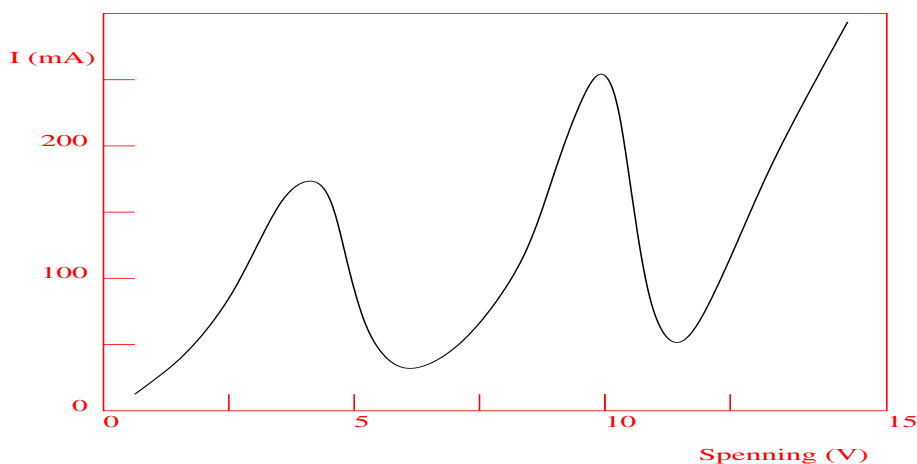
2.2.6 Franck-Hertz eksperimentet

I 1914 utførte Franck og Hertz et eksperiment som var den første bekreftelse på eksistensen av stasjonære tilstander i atomer, dvs. at kun bestemte eksiterte tilstander var mulig, i motsetning til det kontinuerlige spekteret av tilstander som klassisk fysikk ga. For dette fikk Franck og Hertz Nobelprisen i fysikk i 1925. Et eksperimentelt oppsett er vist i Figur 2.4. Eksperimentet ble gjennomført ved å akselerere elektroner gjennom en gass av kvikksølv vha. en påsatt spenning mellom katoden og anoden. Etter som elektronene kolliderer med kvikksølvatomene taper de kinetisk energi. For å kunne nå anoden og for at en skulle kunne måle en strøm av elektroner må elektronene ha en bestemt kinetisk energi. Økes spenningsforskjellen, vil flere og flere elektroner nå anoden, og dermed skulle en registrere en monotont økende strøm av elektroner. Dette var ikke tilfelle eksperimentelt. Et plott av elektrisk strøm som funksjon av det ak-



Figur 2.4: Skjematisk oppsett for Franck og Hertz sitt eksperiment med kvikksølv i 1914. Et rør med tre elektroder fylles med kvikksølv damp. Elektroner akselleres over et spenningsfall V mellom katoden og et gitter. Et mindre spenningsfall med motsatt polaritet settes opp mellom gitteret og anoden. Strømmen av elektroner gjennom røret avhenger av hvordan de vekselvirker med kvikksølv.

selerende potensialet viste topper ved heltalls verdier av en spenning på ca 4.9 V, se Figur 2.5. Det som



Figur 2.5: Strømmen av elektroner gjennom røret måles som funksjon av det aksellererende potensialet V . Flere og flere elektroner når anoden etter som spenningen økes. Ved $V \approx 4.9 \text{ V}$, $2 \times 4.9 \text{ V}$, $3 \times 4.9 \text{ V}$ osv. avtar strømmen. Det svarer til at elektronene taper 4.9 eV per kollisjon.

skjer er at ved bestemte kinetiske energier (og dermed spenninger) for elektronene, har elektronene en energi som svarer til den første eksiterte tilstanden i kvikksølvatomet, se Figur 2.6. Når elektronene dermed overfører sin kinetiske energi til kvikksølvatomet, bremses det ned og færre elektroner når anoden. Derfor faller strømmen for spenningsfall over 4.9 V . Økes spenningen over 4.9 V , øker strømmen igjen til elektronene har en kinetiske energi på

$$E_{kin} = 2 \times 4.9 \text{ eV}.$$

Da har elektronet energi nok til å eksitere to kvikksølvatomer og en observerte en ny topp i elektronstrømmen.

Når kvikksølvatomet går tilbake til grunntilstanden, sendes det ut elektromagnetisk stråling med bølglengde på $\lambda = 254 \text{ nm}$. Det svarer til en energiforskjell gitt ved

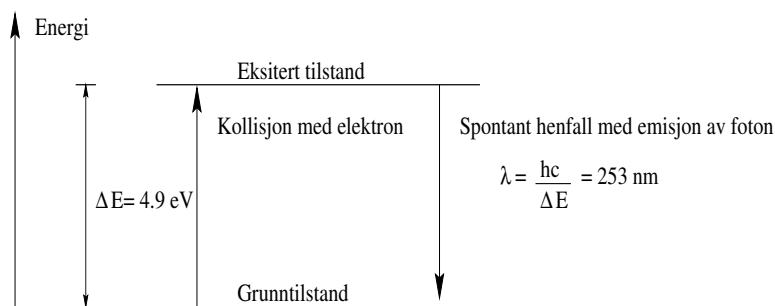
$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{254 \text{ nm}} = 4.88 \text{ eV}, \quad (2.61)$$

i samsvar med den målte spenningen og dermed den kinetiske energi som elektronene har.

2.2.7 Problemer med Bohrs atommodell

Bohrs atommodell var et viktig steg i retning mot kvantemekanikken. Det faktum at en teoretisk kunne forklare spektrene til atomer var en aldri så liten revolusjon. Men modellen hadde klare svakheter etterhvert som den ble konfrontert med nye eksperimentelle data.

Modellen var i stand til å forklare flere egenskaper ved alkalimetallene, slik som litium, natrium, kalium, rubidium og cesium. Dette er alle metaller hvis kjemiske egenskaper henger nøye sammen med det faktum at de alle har et valenselektron. Vi kan da tenke oss at de svarer til modifiserte hydrogenatomer, hvor frihetsgradene til kjernene og de andre elektronene er absorbert i ladningen Z . Men som vi skal se i vår gjennomgang av det periodiske systemet, kunne ikke alle egenskapene til alkaliatomene forklares vha. Bohrs atommodell. For atomer med flere valenselektroner var samsvaret mellom teori og eksperiment dårlig.



Figur 2.6: Eksitasjonsenergien fra grunntilstanden til den første eksiterte tilstanden svarer til at et elektron i et kvikksølvatom har fått tilført en energi på 4.9 eV. Ved henfall tilbake til grunntilstanden sendes det ut e.m. stråling med bølglengde $\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 254 \text{ nm}$.

I tillegg, inkluderte Bohrs atommodell ad hoc postulater slik som postulatet om kvantiseringen av bane-spinnet, som i det lange løp ikke var intellektuelt tilfredsstillende.

2.3 Oppgaver

2.3.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 2.1

Synlig lys har bølglengder i området 4000–7000 Å.

- Fra Bohrs formel for energinivåene i H-atomet, vis at bølglengden til det emitterte lyset vil ligge utenfor det synlige området ved alle overganger til laveste nivå (Lyman-serien).
- Hva blir den korteste og den lengste bølglengden ved overganger til det nest laveste nivået (Balmer-serien)?
- Hvor mange spektrallinjer ligger i det synlige området i denne serien?

Oppgave 2.2

I den enkleste versjonen av Bohrs atommodell antas det at elektronet beveger seg i sirkulære baner rundt en atomkjerne som ligger i ro, d.v.s. at den har en masse som regnes å være uendelig stor. Spesielt for de letteste atomene er dette ikke en særlig god antagelse. I H-atomet består kjernen kun av et enkelt proton med en masse m_p som er 1836 ganger tyngre enn elektronmassen m_e .

- Ved å ta med bevegelsen til protonet i H-atomet, vis at den totale banespinn for atomet i dets massesentersystem er $L = \mu \omega r^2$, hvor r er avstanden mellom elektronet og protonet, ω er vinkel-frekvensen til deres sirkulære bevegelse og μ er deres reduserte masse

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}.$$

- Finn energiene til de stasjonære tilstandene til atomet ved bruk av Bohrs kvantiseringsbetingelse $L = n\hbar$, og vis at dette mer nøyaktige resultatet er identisk med Bohrs energiformel med det unntak at den reduserte massen μ nå inngår i stedet for elektronmassen m_e .

- c) Hvor mye forandres den lengste bølgelengden H_α ($n = 3 \rightarrow n = 2$) i Balmer-serien ifølge denne mer korrekte formelen?
- d) Spektrallinjen H_α fra deuterium (tungt hydrogen) har bølgelengden $\lambda = 656,029 \text{ \AA}$. Finn massen til atomkjernen i deuterium.

Oppgave 2.3

- a) Hvilke energier har lyskvant som faller i den synlige delen av spektret, $4000 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 7000 \text{ \AA}$?
- b) Oppgi noen spektrallinjer av atomært hydrogen og enkeltionisert helium som tilsvarer synlig lys.
- c) Finn størrelsesorden av effekten på disse dersom man tar hensyn til rekylen av atomet under emisjonen, og vis at denne effekten er langt mindre enn isotopeffekten (effekt p.g.a. redusert masse).

Oppgave 2.4

Et atom med masse M , opprinnelig i ro, emitterer et foton ved en overgang fra et energinivå E_1 til et annet nivå E_2 . Det sies vanligvis at det emitterte fotonets energi er gitt ved $h\nu = E_1 - E_2$, der ν er fotonets frekvens og h er Plancks konstant. Imidlertid vil en liten del av energien overføres til atomet som kinetisk energi (rekylvirkning), og fotonet får derfor en tilsvarende mindre energi: $h\nu = E_1 - E_2 - \Delta E$.

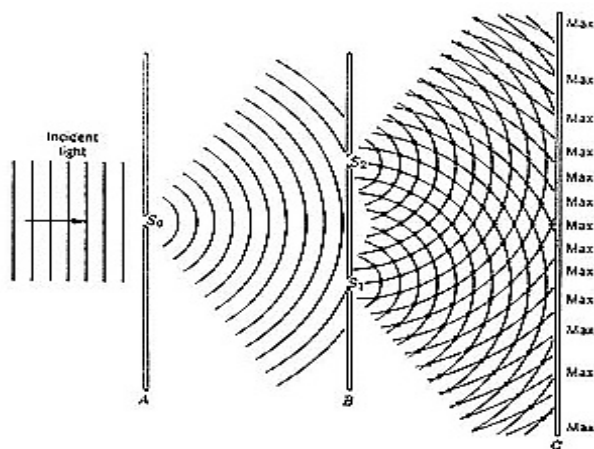
- a) Finn et uttrykk for denne korreksjonen ΔE . Gå ut fra at fotonet har en bevegelsesmengde lik $h\nu/c$.
- b) Gjennomfør en tilsvarende diskusjon for det tilfellet at atomet absorberer et foton.
- c) Regn ut den numeriske verdien av $\Delta E/h\nu$ for en overgang $E_1 - E_2 = 4,86 \text{ eV}$ i et kvikksølvatom som har masse lik $200 \times$ massen til et proton.

Oppgave 2.5

Bruk Bohrs kvantiseringsbetingelse $L = n\hbar$ til å kvantisere energien av en partikkel i et sentral potensial $V(r) = V_0(r/a)^k$. Beregn den kvantiserte energien som funksjon av kvantetallet n . Kontroller n -avhengigheten for $k = -1$ som svarer til Bohrs atom modell for hydrog . Lag en figur som viser $V(r)$ for store verdier av k . Forklar ut fra figuren verdien av elektronets bane-radius for $k \rightarrow \infty$.

Kapittel 3

MATERIEBØLGER



Figur 3.1: Dobbeltspalt eksperiment. Nylig, se Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 2868, klarte fysikere å observere interferens fenomen mellom bølgepakker som besto av kun to fotoner.

Hensikten med dette kapitlet, i tillegg til å diskutere de Broglies hypotese, er å gi en introduksjon til viktige deler av bølgelæren som vil følge oss i store av deler av kurset. Bølgelæren er i seg selv et omfattende fagfelt, men vi skal i all hovedsak fokusere på de deler som er av interesse for kurset. Dette dreier seg om interferens, diffraksjon, og gruppe og fasehastighet. Dette er begrep som var sentrale i eksperiment som avdekket bølgeegenskapen til materien. For å forstå disse resultatene og å kunne relatere dem til de Broglies hypotese, Heisenbergs uskarphetsrelasjon, materiens bølge og partikkel egenskaper og Schrödingers likning, trenger vi noen resultater fra bølgelæren. I tillegg, og kanskje minst like viktig, vil vår diskusjon av kvantemekanikken basere seg på bølgeteori. Et viktig aspekt i denne vektleggingen av bølgelære ligger i det rent pedagogiske, i den forstand at dere vil se en fortsettelse og utvidelse av begrep fra e.m. teori som dere har sett i kurs som FY101. Sett utifra et slikt perspektiv kan en også si at bildet basert på bølgeteori som vi kommer til å vektlegge er kanskje mer fysisk intuitivt ved et introduksjonskurs som FYS2140. I videregående kurs som FYS 201, FYS 303, FYS 305 og FYS 403, vil dere få en introduksjon til en mer moderne matematisk presentasjon av kvantemekanikken.

Etter avsnittet med bølgelære, følger en diskusjon av Heisenbergs uskarphetsrelasjon. Men først til et eksperimentelt faktum som ikke har noen klassisk analogi. Her ligger også det eneste 'mysteriet' med kvantemekanikken.

3.1 Materiens bølge og partikkelnatur

Mer eller mindre vet vi hvordan dagligdagse gjenstander oppfører seg under påvirkninger fra ulike kref-ter. På mikronivå er dog vårt erfaringsgrunnlag begrenset. Det vi skal ta for oss nå er et eksperimentelt faktum uten sidestykke i den makroskopiske virkelighet, slik vi kjenner den fra vårt erfaringsgrunnlag. Materien, dvs. elektroner, nøytroner, atomer m.m. utviser ikke bare partikkel egenskaper men også bøl-geegenskaper. Elektronene oppfører seg akkurat som lys. Det hører også med til historien at Newton trodde lys besto av partikler, men da bølgeegenskapene til lys ble avdekka i mange eksperiment, ble denne tråden forlatt, inntil Einsteins radikale bruk av Plancks postulat for å forklare den fotoelektriske effekt. Historisk ble elektronet tiltenkt kun partikkel egenskaper. Men ulike eksperiment med elektroner avdekket også bølgeegenskaper.

Det vi skal studere i dette kapitlet er altså materiens bølgeegenskaper. Vi kan ikke forklare dette vha. klas-sisk teori. Det danner også grunnlaget for kvantemekanikken som teori og to av de viktige postulatene om naturen vi nevnte innledningsvis, Heisenbergs uskarphetsrelasjon og de Broglies postulat om materiens bølgeegenskaper. Kvantemekanikken som teori baserer seg på disse postulatene ved å ta utgangspunkt i en bølgebeskrivelse av naturen¹. Vi er ikke i stand til å forklare *hvorfor* materien utviser slike egenska-per. Vår innsikt begrenser seg *kun* til å forklare hva som skjer. Sagt litt annerledes, ved å fortelle deg hva som skjer, vil vi også avdekke kvantemekanikkens grunnleggende merkverdigheter. Med siste ord mener vi egentlig sider ved vår forståelse av naturen som savner sidestykker i våre erfaringsgrunnlag fra verden på makronivå. Du vil selvsagt sitte igjen med mange store spørsmål om hvorvidt vår beskrivelse av den fysiske virkelighet på mikronivå virkelig følger f.eks. uskarphetsrelasjonen. I skrivende stund har vi ikke en eneste eksperimentell observasjon på brudd med de grunnleggende postulatene. Kanskje er uskarphetsrelasjonen en fundamental egenskap ved naturen?

Faktisk er det slik at idag tenker vi oss at vi kan bruke sider av kvantemekanikken som er høyst ikke-trivielle i f.eks. utviklingen av kvantedatamaskiner eller undersøkelser av systemer på mikronivå. Idag er vi f.eks. istand til å fange inn enkeltelektroner (kunstig hydrogenatom) i områder på noen få nanometre. Eksperiment har blitt gjort hvor en til og med kan lage såkalte Schrödinger katt tilstander ved å manipu-lere enkeltioner i ionefeller vha. laserlys. Bruk av entanglement² av kvantemekaniske systemer for sikker kryptering, rask søking i store databaser og teleportasjon er begrep som bare for få år siden hadde et klart science fiction preg over seg. Idag snakker vi om slike sider, om ikke med den største selvfølge, så ihvertfall som spennende muligheter for å forstå naturen bedre. Men, mere om dette i neste kapittel.

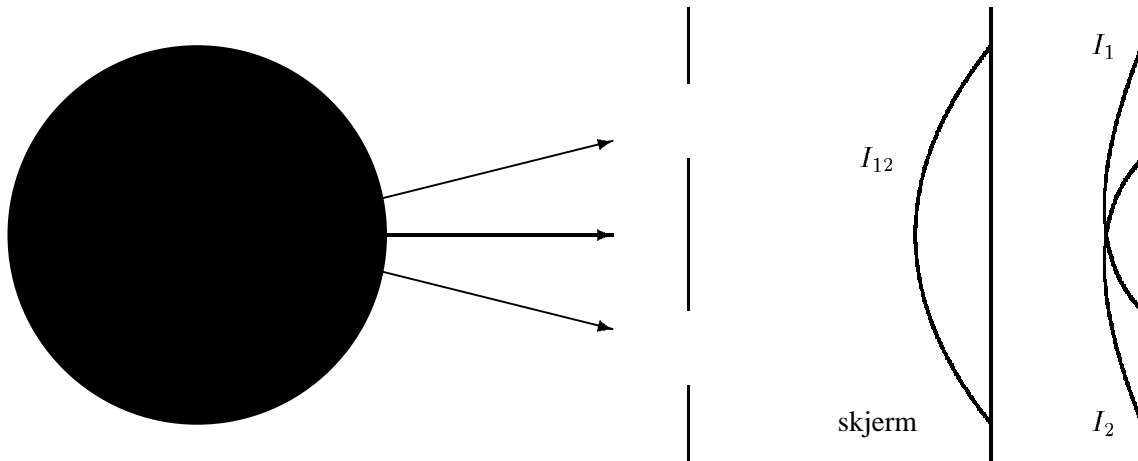
Tenk deg nå et eksperiment hvor vi sender inn f.eks. en jevn strøm av tennisballer mot to spalteåpninger, slik som vist i Figuren nedenfor. Anta også at måten disse tennisballene treffer spaltene er vilkårlig. På baksiden av de to spalteåpningene har vi en detektor som måler hvor mange baller som kommer i et gitt område. Anta også at vi holder på en stund slik at intensitetsfordelingen I_{12} for tennisballene (som uttrykker hvor mange baller som kommer inn per tid per arealenhet) ser ut som vist på figuren. Siden vi ikke kan si helt nøyaktig hvor ballene vil havne, uttrykker intensitetsfordelingen en sannsynlighet for hvor det er størst eller minst sannsynlighet for at ballene treffer.

Dersom vi lukker en av spaltene, f.eks. den andre, vil vi måle en intensitetsfordeling som vist i kurven I_1 . Lukker vi spalt en, finner vi en tilsvarende fordeling I_2 . Det vi skal merke oss her er at disse intensitets-fordelingene adderes opp, dvs.

$$I_{12} = I_1 + I_2.$$

¹Schrödingers likning som er vår naturlov, er ikke noe annet enn en bølgelikning, som, dersom vi tillater oss abstraksjonen med imaginær tid, kan skrives som en diffusjonlikning. Varmedledning er et klassisk eksempel på et fysisk problem som kan modelleres vha. en diffusjonslikning

²En mulig norsk oversettelse er sammenfiltrede tilstander.



Figur 3.2: Tennisballer med hastighet v sendes inn mot to spaltåpningen. På baksiden har vi en detektor som registrerer hvor tennisballene treffer. Den totale intensitetsfordelingen er gitt ved I_{12} .

La oss gjenta dette eksperimentet, men denne gang med lys. Anta at vi har en lyskilde som sender ensfarget lys med gitt bølgelengde λ mot samme type skjerm, som vist i Figur 3.3. Istedet for å måle antall baller som treffer bak spaltene har vi nå f.eks. en fotografisk plate som måler intensiteten til lyset som passerer de to spaltene. Vi kaller avstanden mellom spalteåpningene for a . Dersom forholdet mellom a og lysets bølgelengde (vi kommer til dette i de neste to avsnittene) er gitt ved

$$a/\lambda \sim 1,$$

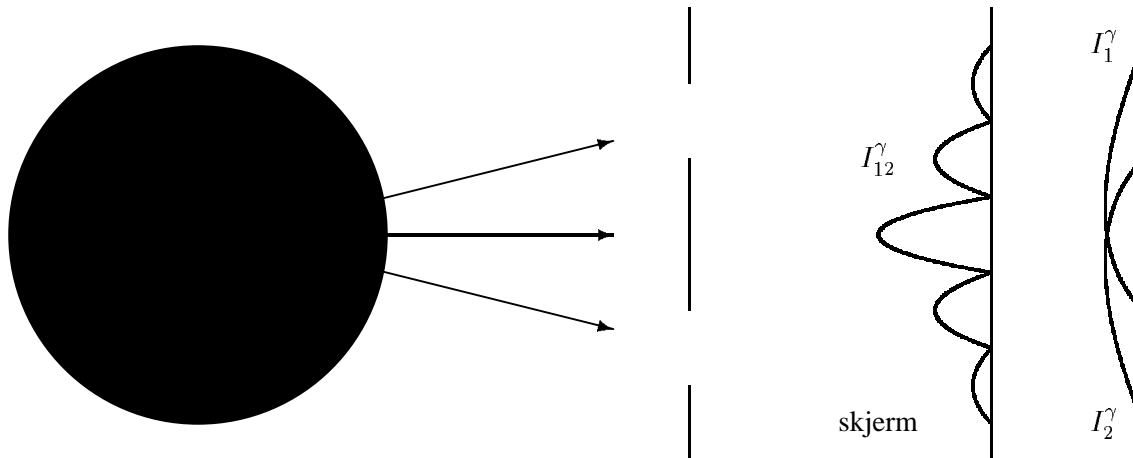
kan vi observere et diffraksjonsmønster ved den fotografiske plata som vist i Figur 3.3. Et diffraksjonsmønster utviser intensitetstopper og bunner. Intensiteten I_{12}^γ er nå forskjellig fra eksperimentet vårt med tennisballene. Lukker vi nå den andre spalten, kan vi, avhengig av forholdet mellom spaltens størrelse og lysets bølgelengde observere et diffraksjonsmønster eller en mer glatt kurve som vist i figuren med intensiteten I_1^γ . Lukker vi spalt en, ser vi en tilsvarende intensitetsfordeling I_2^γ . Prøver vi å addere de enkelte intensitetsfordelingene finner vi at

$$I_{12}^\gamma \neq I_1^\gamma + I_2^\gamma!$$

Vi skal utlede det matematiske uttrykket i avsnittet om bølgelæren. Vi kan alstå ikke addere opp intensiteter for lys. Det at lys utviser et diffraksjonsmønster på lik linje med hva f.eks. vannbølger gjør, førte til forståelsen av lys som bølger.

Hva om vi erstatter lys med elektroner i Figur 3.3? Anta at du har en eller annen kilde som sender elektroner med en gitt bølgelengde mot spaltene. I tillegg har vi en detektor ved skjermen som teller antall elektroner som passerer de to spaltene. Med begge spalter åpne kan vi igjen observere en tilsvarende intensitetsfordeling som for lys. Elektronene utviser altså bølgeegenskaper, i klar strid med vår intuitive oppfatning av partikler. Prøver vi å lukke en av spaltene, ser vi en tilsvarende intensitetsfordeling som for lys. Legger vi sammen intensitetsfordelingene kommer vi fram til samme konklusjon, nemlig

$$I_{12}^{e^-} \neq I_1^{e^-} + I_2^{e^-}!$$



Figur 3.3: Lys med bølglengde λ sendes inn mot to spaltåpningen. På baksiden har vi en detektor som registrerer intensiteten. Den totale intensitetsfordelingen er gitt ved I_{12}^γ .

Materien tilskrives altså bølgeegenskaper, på lik linje med fotonene.

La oss utvide eksperimentet med elektronene. Vi sender et elektron per sekund mot de to spaltene. Samtidig er vi nå litt mer ambisiøse. I tillegg til diffraksjonsmønsteret ønsker vi å finne ut fra hvilken spalt et enkelt elektron gikk gjennom. Vi ønsker å både studere bølgeegenskapene til elektronene (vi vil ha et diffraksjonsmønster) samtidig som vi ønsker å si noe om hvilken spalt det gikk gjennom, dvs. vi ønsker å studere dets partikkelegenskaper.

Tenk deg da at vi plasserer en detektor ved spaltene. Denne detektoren sender ut fotoner som kolliderer med de innkommende elektronene, jfr. Compton spredning. Detektoren er bygd slik at vi ser et skarpt lysglimt ved enten den ene eller andre spalten, avhengig av hvor elektronet gikk gjennom. Ellers har eksperimentet vårt samme oppsett som i Figur 3.3.

Hva skjer nå ? Jo, vi observerer et lysglimt hver gang et elektron passerer en av spaltene. Men, intensitetsfordelingen vår utviser ikke lenger et diffraksjonsmønster som vist i Figur 3.3! Vårt lille ønske om å studere både partikkel og bølgeegenskaper *samtidig* i ett og samme eksperiment er ikke mulig. Det var basert på slike observasjoner at Heisenberg formulerte sin uskarphetsrelasjon. Per dags dato finnes det ikke noe eksperiment som bryter med denne relasjonen.

Hensikten med dette kapittelet blir dermed å introdusere for dere to viktige postulat om naturen, de Broglies hypotese om materiens bølge og partikkelegenskaper og Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

3.2 De Broglies hypotese

I forrige kapittel³ diskuterte vi egenskapene til lys og fant fra Comptons effekt, fotoelektrisk effekt og Röntgenstråling at e.m. stråling utviser både partikkel og bølgeegenskaper. I noen tilfeller kan vi avdekke bølgeegenskaper, i andre tilfeller ser vi partikkelegenskaper.

Det er viktig å ha klart for seg skillet mellom partikler og bølger siden de representerer de eneste moder

³Lesehenvisning her er kap 4-1 og 4-2.

for transport av energi. Klassisk har en partikkel egenskaper som posisjon, bevegelsesmengde, kinetisk energi, masse og elektrisk ladning. En klassisk bølge derimot beskrives ved størrelser som bølgelengde, frekvens, hastighet, amplitude, intensitet, energi og bevegelsesmengde. Den viktigste forskjellen mellom en klassisk partikkel og bølge er at partikkelen kan **lokaliseres**, dvs. har en skarpt definert posisjon, mens en bølge er spredt utover rommet. Vi skal se mer av dette både når vi diskuterer bølgelære og i tilknytning Heisenbergs uskarphetsrelasjon, og ikke minst i vår diskusjon av kvantemekanikken.

de Broglie tok utgangspunkt i resultatene fra e.m. stråling og foreslo, utifra ideen om symmetrier i naturen, at også materie, dvs. partikler med endelig masse som f.eks. elektroner, protoner, atomer m.m., utviser partikkel og bølge egenskaper. For fotoner har vi relasjonen mellom bølge og partikkel egenskaper gitt ved $E = h\nu$ og $\lambda = h/p$, med Plancks konstant som knytter sammen disse to relasjonene. de Broglie foreslo at liknende relasjoner også skulle gjelde for materie og postulerte at f.eks. elektroner kunne tilordnes en bølgelengde

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}. \quad (3.1)$$

Dette er de Broglies hypotese.

Det er en viktig ting å merke seg, som vi også kommer tilbake i neste avsnitt. For et foton har vi en enkel relasjon som gir oss både bølgelengde og frekvens, nemlig $\lambda\nu = c$, med gitt energi og bevegelsesmengde. For massive partikler derimot, trenger vi separate relasjoner for henholdsvis bølgelengde $\lambda = h/p$ og frekvens $\nu = E/h$.

Basert på de Broglies hypotese foreslo Elsasser i 1926 at bølgeegenskapene til materie burde kunne testes på lik linje med f.eks. slik en observerte Röntgenstråler, dvs. ved å sende høgenergetiske elektroner mot et metall og detektere på ei fotografisk plate et eventuelt diffraksjonsmønster for fotonene. Her skulle en altså prøve å detektere et diffraksjonsmønster for elektroner. Eksperimentet som ble gjennomført av Davisson og Germer besto i å sende elektroner mot en krystall av nikkell for deretter å prøve å detektere de utgående spredte elektroner som funksjon av innkommende energi og spredningsvinkel θ . Atomene i nikkell krystallen, med interatomær avstand d skulle dermed fungere som diffraksjonssentra og i henhold til bølgelære skulle en dermed kunne observere et diffraksjonsmønster ved detektoren. Fra diffraksjonsteori, som vi skal utlede i neste avsnitt, kan en vise at det er en relasjon mellom bølgelengden til elektronene, avstanden mellom atomene som fungerer som diffraksjonssentra og spredningsvinkelen θ gitt ved

$$n\lambda = 2d\sin\theta, \quad (3.2)$$

hvor n er et heltall⁴ Figur 3.4 viser en skisse for dette diffraksjonseksperimentet.

Det som er viktig for den videre forståelse, er at diffraksjon skyldes en forstyrrelse av en innkommende bølge hvor det forstyrrende element, om det er en spalteåpning eller avstanden mellom atomer i en krystall, er på størrelse med bølgelengden til den innkommende bølge, dvs.

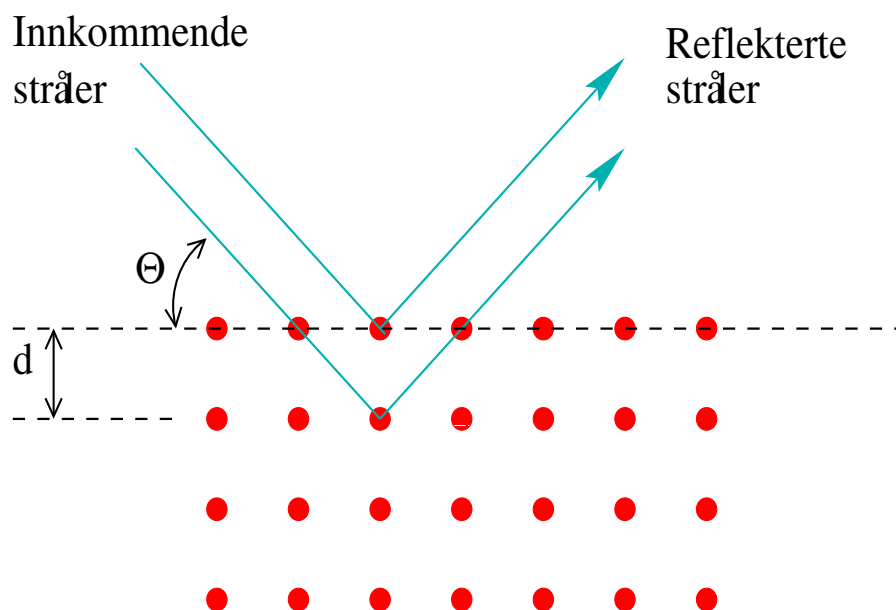
$$\lambda/d \sim 1. \quad (3.3)$$

Dersom $\lambda/d \rightarrow 0$ kan vi ikke observere noe diffraksjonsmønster.

For å ta et eksempel, anta at vi sender en kontinuerlig strøm av baller som veier et 1 kg mot en spalteåpning d . Anta at hastigheten er gitt ved $v = 10 \text{ ms}^{-1}$. Bruker vi de Broglies hypotese finner vi at bølgelengden til denne innkommende strøm av baller er gitt ved

$$\lambda_{ball} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = 6.6 \times 10^{-25} \times 10^{-10} \text{ m}, \quad (3.4)$$

⁴Vi utleder denne formelen i neste avsnitt. Her tillater vi oss å bare sette opp resultatet.



Figur 3.4: Avstanden mellom atomene som fungerer som diffraksjonssentra med spredningsvinkelen θ for innkommende og utgående elektroner.

og dersom vi overhodet skal være i stand til å observere et diffraksjonsmønster for ballene som passerer åpningen, bør vi ihvertfall ha en spalteåpning $d \sim 10^{-35}$ m! Å lage en ball på et kg som passer til en slik åpning overlates hermed til ekspertene! I praksis vil det si at $\lambda_{ball}/d \sim 0$ og vi vil aldri være i stand til å observere et diffraksjonsmønster.

Derimot, dersom vi sender elektroner med kinetisk energi på $E_{kin} = 100$ eV mot en nikkel krystall, hvor $d = 0.91$ Å har vi

$$\lambda_{e^-} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_{kin}}} = 1.2 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad (3.5)$$

og vil være i stand til å observere et diffraksjonsmønster.

Det var nettopp det Davisson og Germer så. For en spredningsvinkel på 50 grader observerte de en interferens topp som kun kunne forklares dersom elektroner utviser også bølgeegenskaper. Se avsnittene 4-1 og 4-2 i læreboka for en mer utførlig diskusjon av eksperimentene til Davisson og Germer og også Thompson.

Før vi går inn på detaljer om interferens og diffraksjon, kan vi kort oppsumere denne delen med følgende. For å observere et diffraksjonsmønster, som igjen er en bølgeegenskap, bør vi ha et forhold $\lambda/d \sim 1$. Har vi derimot $\lambda/d \sim 0$, kan ikke noe slikt mønster observeres. Tenker vi deretter på $\lambda = h/p$ har vi at det er forholdet

$$\frac{h}{pd} = \frac{h}{mvd}, \quad (3.6)$$

som er viktig. Velger vi $h = 0$ skal ikke en partikkel utvise bølgeegenskaper. For massive partikler som ballen i eksemplet ovenfor, blir p så stor at vi knapt kan detektere bølgelengden. For elektronet derimot, er massen så liten at også bevegelsesmengden $p = mv$ blir liten, til tross for at hastigheten v kan bli svært så stor. Er i tillegg d på størrelsesorden med λ er det store muligheter for å observere et diffraksjonsmønster. mer om dette i neste avsnitt.

3.3 Diffraksjon, fasehastighet og gruppehastighet

I dette avsnittet skal⁵ vi presentere en del emner fra bølgelære som vi vil få bruk for både i tilknytning den påfølgende diskusjonen om Heisenbergs uskarphetsrelasjon og senere når vi går løs på kvantemekanikken.

3.3.1 Bølgepakker, gruppe og fasehastighet

Her skal vi rekapitulere en del begrep fra FYS2140 samt innføre begrepet gruppehastighet. Fra sistnevnte kurs har dere sett at Maxwells likninger gir en bølgelikning på formen

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathcal{E}(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2}, \quad (3.7)$$

hvor \mathcal{E} er det elektriske feltet. Tilsvarende likning får vi for det magnetiske feltet ved å erstatte \mathcal{E} med \mathcal{B} . Vi kan generalisere denne likningen ved å skrive den som

$$v^2 \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2} = \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2}, \quad (3.8)$$

hvor ψ kan representere det elektriske \mathcal{E} eller magnetiske \mathcal{B} felt og hvor

$$v^2 = c^2 = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0} \quad (3.9)$$

hastigheten til lyset for det e.m. tilfellet. Heretter i dette kurset kommer vi konsekvent til å bruke ψ som symbol for bølgefunksjonen.

Slik likning (3.8) står kan den representere en bølgelikning for flere systemer, fra e.m. felt til trykkbølger i en gass eller en svingende streng. Når vi kommer til Schrödingers likning skal vi se at den tidsavhengige delen av denne likning blir forskjellig. Istedet for den andrederiverte av bølgefunksjonen mhp. tiden t har vi en første deriverte mhp. t .

Løsningen til likning (3.8) kan skrives på generell form som

$$\psi(x, t) = f(x \mp v_f t), \quad (3.10)$$

som skal representere en bølge som propagerer som funksjon av tid og posisjon med en hastighet v_f . Sistnevnte kalles fasehastigheten og er hastigheten bølgen reiser med. Minustegnet svarer til en forover (i x -retning) reisende bølge, mens plusstegnet svarer til ei bølge som brer seg bakover. Figur 3.5 illustrerer noe av dette. Ei spesiell løsning til bølgelikningen er gitt ved sinus eller cosinus funksjoner, f.eks. ved

$$\psi(x, t) = A \sin[k(x - v_f t)] = A \sin[k(x - v_f t) + 2\pi], \quad (3.11)$$

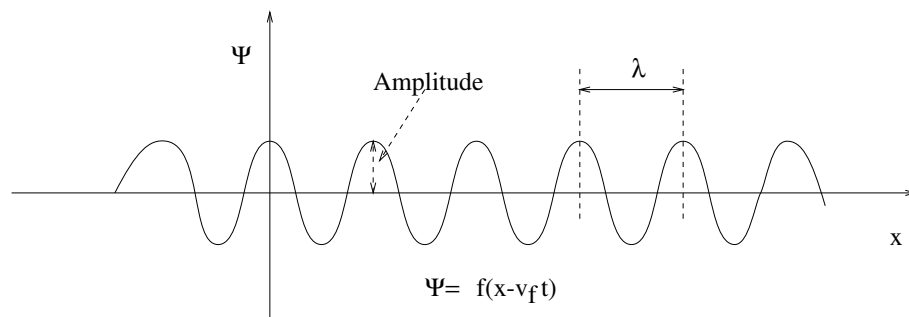
som indikerer at når $x \rightarrow x + 2\pi/k$ så har ψ samme verdi. Størrelsen A er amplituden. Alternativt kunne vi ha brukt cosinus-funksjonen som løsning

$$\psi(x, t) = A \cos[k(x - v_f t)], \quad (3.12)$$

eller uttrykke løsningen som

$$\psi_i = A e^{i(kx - kv_f t)}. \quad (3.13)$$

⁵Lesehenvisning er kap 4-6, sidene 205-215.



Figur 3.5: Bølge som propagerer forover med fasehastighet v_f og bølgelengde λ .

Fra FY101 har vi sett at bølgelengden kan skrives som

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad (3.14)$$

hvor k kalles bølgetallet. Vi kan da omskrive bølgefunksjonen til

$$\psi(x, t) = A \sin\left[\frac{2\pi}{\lambda}(x - v_f t)\right], \quad (3.15)$$

og med vinkelfrekvensen

$$\omega = 2\pi\nu = kv = \frac{2\pi v_f}{\lambda}, \quad (3.16)$$

har vi

$$\psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t) \quad (3.17)$$

Nullpunktene svarer til noder

$$\frac{2\pi}{\lambda}(x_n - vt) = n\pi \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.18)$$

som gir

$$x_n = \frac{n\lambda}{2} + vt. \quad (3.19)$$

Fasehastigheten v_f kan også uttrykkes vha. vinkelfrekvensen og bølgetallet ved

$$v_f = \frac{\omega}{k}. \quad (3.20)$$

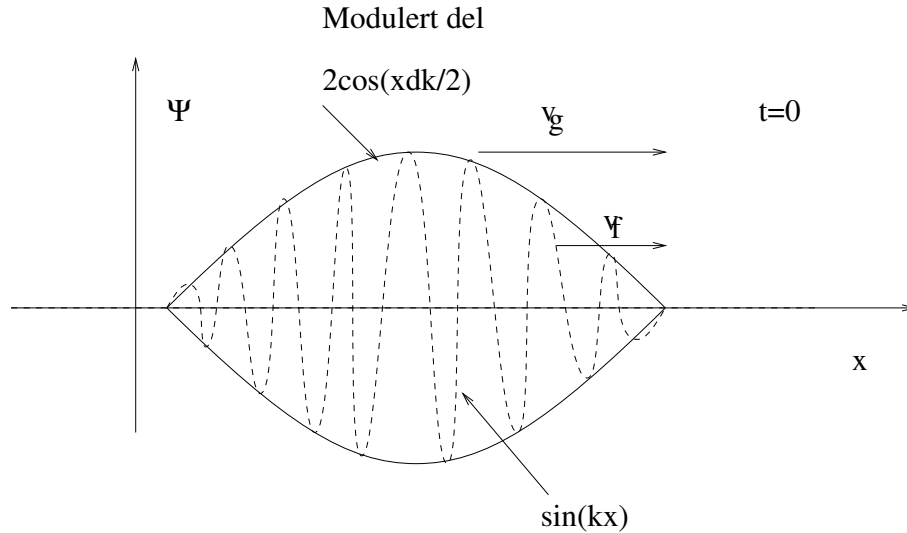
La oss anta at den formen vi har funnet på løsningen til bølgefunksjonen skal svare til bølgefunksjonen for et foton eller elektron. Dersom vi ønsker å assosiere fasehastigheten v_f med hastigheten v til en partikkel får vi et problem. Dette ser vi fra

$$v_f = \lambda\nu = \frac{hE}{ph} = \frac{E}{p}, \quad (3.21)$$

hvor vi har brukt de Broglie sin hypotese. Vi har sneket inn en ansats for materiebølger om at $E = h\nu = \hbar\omega$, noe som vi skal komme tilbake til under Schrödingers likning. Antar vi at dette dreier seg om ikke relativistiske partikler med energi $E = mv^2/2$ og bevegelsesmengde $p = mv$ finner vi at

$$v_f = \frac{E}{p} = \frac{mv^2/2}{mv} = \frac{v}{2}. \quad (3.22)$$

Dersom vi ønsker at bølgen i Figur 3.5 skal representere en partikkel, bør bølgehastigheten (fasehastigheten) også svare til partikkelens hastighet. Dette stemmer ikke helt i siste likning. Merk også at bølgen i Figur 3.5 svarer til en kontinuerlig harmonisk bølge av uendelig utstrekning, med en gitt bølgelengde og frekvens. En slik bølge kan ikke representere en partikkel som befinner seg på et bestemt sted i rommet. Ei heller er den egnet til å sende et signal, siden et signal, tenk bare på når dere roper etter noen, er noe som starter et sted og slutter et annet sted etter et gitt tidspunkt. En slik bølge har en form som likner mer på bølgen i Figur 3.6. Denne figuren viser en såkalt superposisjon (addisjon) av flere bølger. Vi skal se at en slik superposisjon av bølger, som kalles bølgepakke, leder til begrepet gruppehastighet, som igjen vil gi oss en hastighet for bølgepakken som svarer til en partikkels hastighet. Som et eksempel for å belyse



Figur 3.6: Eksempel på superponering av to bølger ved tiden $t = 0$ og $dk = k_1 - k_2$.

dette velger vi å se på superponering av to bølger med ulik vinkelfrekvens ω_1 og ω_2 og bølgetall k_1 og k_2 . Vi antar at forskjellen mellom disse verdiene er slik at

$$\omega_1 - \omega_2 \ll 1 \text{ og } k_1 - k_2 \ll 1. \quad (3.23)$$

Legger vi sammen disse to bølgene har vi

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = A_1 \sin(k_1 x - \omega_1 t) + A_2 \sin(k_2 x - \omega_2 t), \quad (3.24)$$

og setter vi amplitudene like $A_1 = A_2 = A$ har vi

$$\psi(x, t) = A(\sin(k_1 x - \omega_1 t) + \sin(k_2 x - \omega_2 t)), \quad (3.25)$$

som vha. den trigonometriske relasjonen

$$\sin X + \sin Y = 2 \cos \left(\frac{X - Y}{2} \right) \sin \left(\frac{X + Y}{2} \right), \quad (3.26)$$

gir

$$\psi(x, t) = 2A \cos \left(\frac{(k_1 - k_2)x - (\omega_1 - \omega_2)t}{2} \right) \sin \left(\frac{(k_1 + k_2)x - (\omega_1 + \omega_2)t}{2} \right). \quad (3.27)$$

Setter vi så

$$\omega_1 + \omega_2 \approx 2\omega_1 = 2\omega \text{ og } k_1 + k_2 \approx 2k_1 = 2k, \quad (3.28)$$

har vi

$$\psi(x, t) = 2A \cos\left(\frac{(k_1 - k_2)x - (w_1 - w_2)t}{2}\right) \sin(kx - \omega t). \quad (3.29)$$

Leddene med cosinus funksjonen kalles for den modulerte del og vi sier at amplituden A er modulert gitt ved faktoren

$$2A \cos\left(\frac{(k_1 - k_2)x - (w_1 - w_2)t}{2}\right). \quad (3.30)$$

Den modulerte amplituden svarer til en hastighet

$$\frac{\omega_1 - \omega_2}{k_1 - k_2} \rightarrow \frac{d\omega}{dk} = v_g, \quad (3.31)$$

som er definisjonen på gruppehastigheten. Se Figur 2.4 for et eksempel ved $t = 0$. Vi kan si at bølgepakens amplitude reiser med en hastighet som svarer til gruppehastigheten. Det er denne hastigheten som skal svare til partikkelens hastighet. Det kan vi se dersom vi bruker at

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

og

$$k = 2\pi \frac{p}{h},$$

som gir at

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi E/h)}{d(2\pi p/h)} = \frac{dE}{dp}, \quad (3.32)$$

og antar vi at vår partikkel kan beskrives vha. ikke-relativistisk mekanikk har vi

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{d(mv^2/2)}{d(mv)} = v, \quad (3.33)$$

dvs. gruppehastigheten svarer til partikkelens hastighet. Gruppehastigheten til en materiebølge er lik hastigheten til partikkelen hvis bevegelse den skal representere. de Broglie sitt postulat er dermed konsistent. Vi får samme resultat dersom vi hadde antatt en relativistisk beskrivelse.

selv om vi bare har addert to bølger med ulike frekvenser og bølgetall, så holder dette resultatet for mange bølger som adderes og har frekvenser og bølgetall nær hverandre.

Dersom $dv_f/dk \neq 0$ kan vi bruke $\omega = kv_f$ til å vise at

$$v_g = v_f + k \frac{dv_f}{dk}. \quad (3.34)$$

I et dispersivt medium vil et signal reise med gruppehastigheten.

For en ikke relativistisk partikkel er $v_g = v = p/m = \hbar k/m$ slik at vi får

$$\frac{d\omega(k)}{dk} = v_g = v = \frac{\hbar k}{m}, \quad (3.35)$$

som gir når vi integrer opp (og setter konstanten fra integrasjonen lik null)

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar}. \quad (3.36)$$

En slik relasjon kalles for en dispersjonsrelasjon. Med $\omega = 2\pi\nu$ har vi

$$\nu(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar 2\pi} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{p^2}{2m} \frac{1}{\hbar} = \frac{E}{\hbar}, \quad (3.37)$$

som ventet! Utifra likning (3.20) finner vi så fasehastigheten v_f .

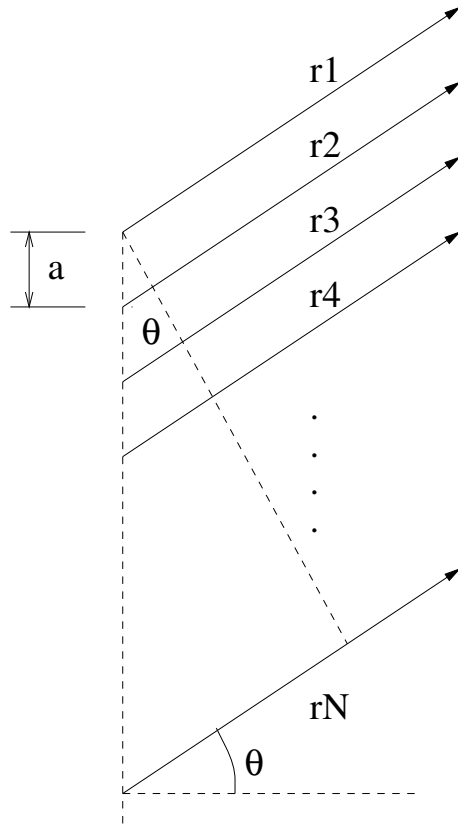
3.3.2 Interferens

Interferens forekommer når to eller flere bølger sammenfaller i tid og rom og gir opphav til en maksimal amplitude eller en minimal amplitude. Intensiteten til f.eks. e.m. stråling som treffer ei fotografisk plate er proporsjonal med kvadratet av bølgefunksjonen, som igjen er proporsjonal med amplituden A . **Intensitet er definert som energi som kommer inn per sekund per areal.** Dersom amplituden, som er resultatet av summen av alle amplituder, har et maksimum i et gitt punkt P , vil en kunne observere et kraftig mønster på f.eks. ei fotografisk plate. Vi snakker da om konstruktiv interferens. Dersom vi ikke observerer noe har vi destruktiv interferens.

La oss nå regne ut intensiteten for lys som blir sendt fra N lyskilder mot en skjerm ved avstand D . Avstanden mellom hver lyskilde er a . Vi antar at vi har med koherente lyskilder å gjøre, at amplituden til alle bølgefunksjonene A_i er like,

$$A_1 = A_2 = A_3 \cdots = A_N = A, \quad (3.38)$$

og at både vinkelfrekvens og bølgetall er like. En slik bølgefunksjon vil ved skjermen være gitt ved



Figur 3.7: Skjematisk oppsett med N lyskilder som sender koherent lys mot en skjerm. Avstanden mellom hver lyskilde er a , og $r_2 - r_1$ kalles den optiske veilengde. Skjermen antas å være langt borte fra lyskildene, slik at linjene som skal representere bølgene kan antas å være parallelle.

$$\psi_i = Ae^{i(kr_i - \omega t)}, \quad (3.39)$$

hvor vi nå velger å bruke den komplekse representasjonen for bølgefunksjonen. Størrelsen r_i er **avstanden fra lyskilde i til skjermen**. Vi antar også at skjermen er så langt borte at vi kan betrakte linjene fra lyskilden til skjermen som tilnærma parallelle, se Figur 3.3.2 for et mulig oppsett med N lyskilder. Den totale bølgefunksjonen er nå gitt ved

$$\psi = A \left(e^{i(kr_1 - \omega t)} + e^{i(kr_2 - \omega t)} + \dots + e^{i(kr_N - \omega t)} \right), \quad (3.40)$$

eller

$$\psi = Ae^{i(kr_1 - \omega t)} \left(1 + e^{i(k(r_2 - r_1))} + \dots + e^{i(k(r_N - r_1))} \right). \quad (3.41)$$

Definerer vi så

$$\delta = k(r_2 - r_1), \quad 2\delta = k(r_3 - r_1), \quad \dots, \quad (N-1)\delta = k(r_N - r_1), \quad (3.42)$$

har vi

$$\psi = Ae^{i(kr_1 - \omega t)} \left(1 + e^{i\delta} + \dots + e^{i\delta(N-1)} \right), \quad (3.43)$$

som kan summeres opp ved formelen til ei geometrisk rekke for å gi

$$\psi = Ae^{i(kr_1 - \omega t)} \frac{e^{iN\delta} - 1}{e^{i\delta} - 1}, \quad (3.44)$$

eller

$$\psi = Ae^{i(kr_1 - \omega t)} \frac{e^{iN\delta/2}}{e^{i\delta/2}} \frac{e^{iN\delta/2} - e^{-iN\delta/2}}{e^{i\delta/2} - e^{-i\delta/2}}, \quad (3.45)$$

som vi kan skrive om vha. definisjonen for sinus-funksjonen som

$$\psi = Ae^{i(kr_1 - \omega t)} e^{i(N-1)\delta/2} \frac{\sin(N\delta/2)}{\sin(\delta/2)}. \quad (3.46)$$

Siden vi har antatt at linjene som treffer skjermen er parallelle, har vi at den **optiske veilengden** $r_2 - r_1$ er gitt ved

$$r_2 - r_1 = a \sin \theta, \quad (3.47)$$

som sammen med

$$k(r_2 - r_1) = \frac{2\pi}{\lambda}(r_2 - r_1) = \frac{2\pi}{\lambda} a \sin \theta = \delta, \quad (3.48)$$

og definisjonen

$$R = \frac{1}{2}(N-1)a \sin \theta + r_1, \quad (3.49)$$

som svarer til en linje med lengde R trukket fra midtpunktet til alle lyskildene, kan vi skrive om uttrykket for ψ som

$$\psi = Ae^{i(kR - \omega t)} \frac{\sin(N\delta/2)}{\sin(\delta/2)}, \quad (3.50)$$

eller

$$\psi = Ae^{i(kR - \omega t)} \frac{\sin(N\frac{\pi}{\lambda} a \sin \theta)}{\sin(\frac{\pi}{\lambda} a \sin \theta)}. \quad (3.51)$$

Intensiteten I er proporsjonal med kvadratet av bølgefunksjonen, og siden $|e^{i(kR - \omega t)}|^2 = 1$ har vi

$$I = I_0 \frac{\sin^2(N\frac{\pi}{\lambda} a \sin \theta)}{\sin^2(\frac{\pi}{\lambda} a \sin \theta)}. \quad (3.52)$$

Konstanten I_0 inneholder bla. $|A|^2$ samt konstanter som gir oss de riktige enhetene. Intensiteten har en maksimal verdi ved

$$a \sin \theta_m = m\lambda, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.53)$$

som svarer til konstruktiv interferens.

For $N = 2$ har vi det mer velkjente uttrykket

$$I = 4I_0 \cos^2\left(\frac{\pi}{\lambda} a \sin \theta\right), \quad (3.54)$$

der vi har brukt at $\sin(2x) = 2 \cos(x) \sin(x)$. Eksempler på mulige interferensmønstre er vist i Figur 3.8 for $N = 2$ og $N = 8$. Vi merker oss at etterhvert som vi øker N blir interferensmaksima skarpere og skarpere.

3.3.3 Diffraksjon

Tenk dere at en sender inn en bølge mot en spalteåpning som vist på Figur 3.9. Dersom spalteåpningen d er på størrelse med bølgelengden λ ⁶, kan bølgen som brer seg fra spalteåpningen danne et interferensmønster. Vi sier at, i motsetning til interferens hvor flere bølger summeres opp i et område P , så svarer diffraksjon til at det er selve bølgen som vekselvirker med seg selv og danner et interferensmønster ved skjermen.

Her skal vi all hovedsak kun anskueliggjøre utledningen av uttrykket for intensiteten ved en skjerm langt borte fra spalteåpningen. Vi skal betrakte superposisjon av bølger som reiser ut fra spalten og treffer skjermen ved et område P som har en avstand R fra sentrum av spalten. Huygens prinsipp forteller at hvert element dy i spalteåpningen virker som en lyskilde, jfr. diskusjonen fra foregående avsnitt om interferens. Igjen antar vi at avstanden er så stor at vi kan anta tilnærma parallelle linjer for alle bølger som treffer området P .

Vi definerer

$$R = \frac{1}{2}(N - 1)d \sin \theta + dy, \quad (3.55)$$

dvs. vi har delt opp spalten i N deler dy . En bølge som blir utsendt i et punkt y reiser derfor en avstand $R - y \sin \theta$ for å komme til området P . Bruker vi så definisjonen av bølgefunksjonen fra et punkt dy (som svarer til r_i i foregående avsnitt)

$$d\psi = Ae^{i(k(R-y\sin\theta)-\omega t)} \frac{dy}{d}, \quad (3.56)$$

og integrerer vi opp bidragene fra hele spalten får vi

$$\psi = \int_{-d/2}^{d/2} d\psi = \int_{-d/2}^{d/2} Ae^{i(k(R-y\sin\theta)-\omega t)} \frac{dy}{d}, \quad (3.57)$$

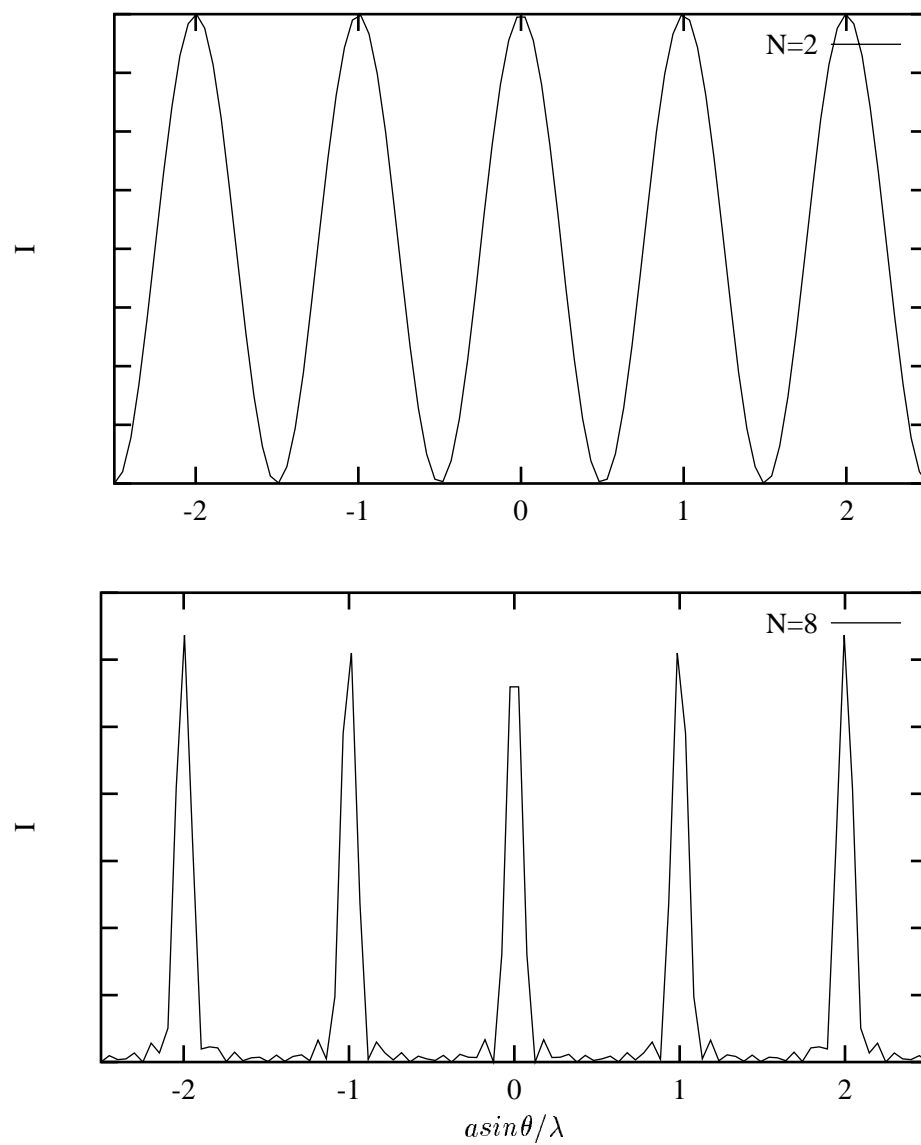
som gir

$$\psi = Ae^{i(kR-\omega t)} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta\right)}{\frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta}, \quad (3.58)$$

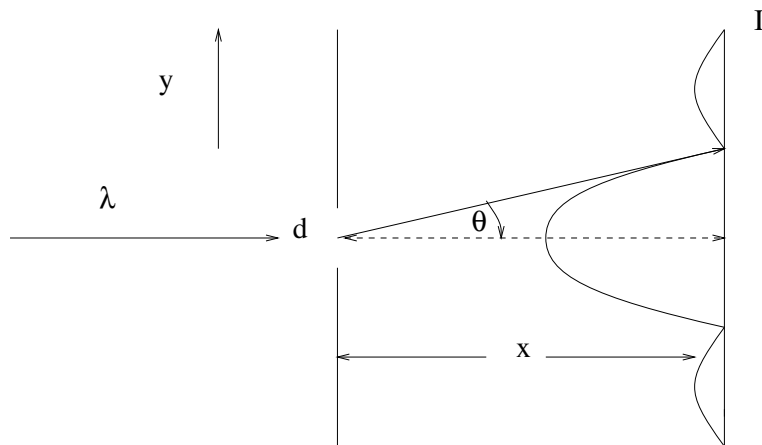
som resulterer i en intensitet gitt ved

$$I = I_0 \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta\right)}{\left(\frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta\right)^2}, \quad (3.59)$$

⁶Vi nevnte dette også i anledning de Broglies hypotese.



Figur 3.8: Eksempel på interferensmønstre med $N = 2$ og $N = 8$ lyskilder.



Figur 3.9: Skjematisert oppsett for lysstråle som sendes mot en spalteåpning. Vinkelen θ indikerer hvor første diffraksjonsminimum opptrer.

eller

$$I = I_0 \frac{\sin^2(u)}{u^2}, \quad (3.60)$$

med

$$u = \frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta. \quad (3.61)$$

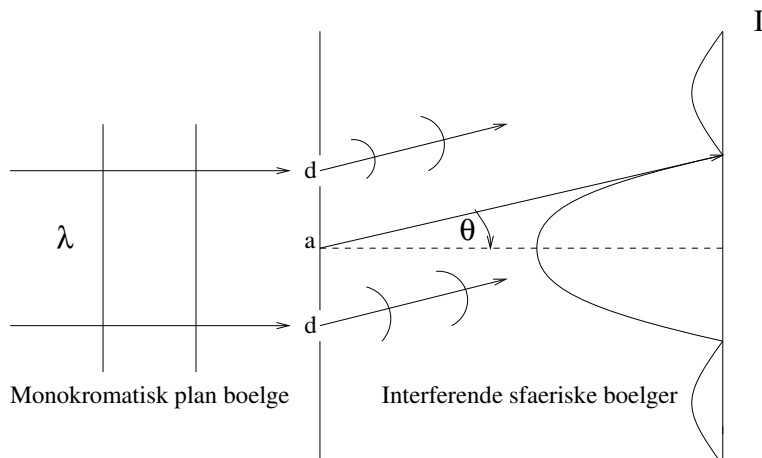
Dette forteller oss vi har maks intensitet når $u = 0$ og min intensitet, dvs $I = 0$ når

$$u = n\pi \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.62)$$

eller

$$d \sin \theta_n = n\lambda. \quad (3.63)$$

Dersom vi har to spalter med avstand a og spalteåpning d , se Figur 2.6, finner vi at intensiteten er gitt



Figur 3.10: Skjematisert oppsett for lysstråle som sendes mot to spalteåpninger med åpning d og avstand mellom åpningene gitt ved a .

ved

$$I = I_0 \cos^2\left(\frac{\pi}{\lambda} a \sin \theta\right) \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta\right)}{\left(\frac{\pi}{\lambda} d \sin \theta\right)^2}, \quad (3.64)$$

som er relevant når en studerer Bragg spredning. I dette tilfelle har vi konstruktiv interferens både når

$$d \sin \theta_n = \frac{(2n + 1)\lambda}{2}.$$

og når

$$a \sin \theta_n = n\lambda.$$

Eksempler for diffraksjonsmønster med henholdsvis en og to spalteåpninger er vist i Figur 3.11. Legg merke til at for tilfellet med to spalter har vi satt avstanden mellom spalteåpningene a lik størrelsen på spalteåpningen d .

3.3.4 Fourieranalyse og uskarphetsrelasjonen

Her skal vi prøve å bygge en bro mellom begrep som bølgepakker og gruppehastighet og neste avsnitt om Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

La oss repetere litt av diskusjonen rundt Figurene 3.5 og 3.3.1. De fleste av dere er kanskje vant med at en bølge er noe som kan likne på den harmoniske svingningen vist i Figur 3.5. Problemet her er at bølgen vår har en utstrekning i rom som er uendelig. Det blir dermed vanskelig å tilordne en partikkel eller f.eks. en høyttaler puls, eller en radiobølge. Skal vi kople bølgebeskrivelsen til en beskrivelse av materie, må bølgen ha ei begrenset utstrekning i rom. Vi vil da bruke bølgen for å uttrykke en sannsynlighet for å finne partikkelen et bestemt sted. Er utbredelsen uendelig, kan vi ikke si noe som helst om hvor partikkelen er.

Det vi også la merke til var at dersom vi satte at hastigheten til partikkelen skulle svare til fasehastigheten, fikk vi problemer med de Broglie sitt postulat. Vi ønsker derfor at vår bølge skal ha en form som likner mer på hva vi ser i Figur 3.3.1. Rekningen vår viste at dersom vi introduserer begrepet gruppehastighet v_g , dvs. hastigheten som bølgepakken (som er satt sammen av flere bølger) reiser med, fant vi at partikkelens hastighet svarte til gruppehastigheten,

For å få til dette finnes det et teorem fra Fourier som sier at dersom vi ønsker at vår bølge skal være forskjellig fra null kun i et bestemt område i rommet, må vi integrere over alle frekvenser ν eller bølgetall k .

Følgende eksempel illustrer dette. Eksemplet tillater oss også å lage ei kopling til Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

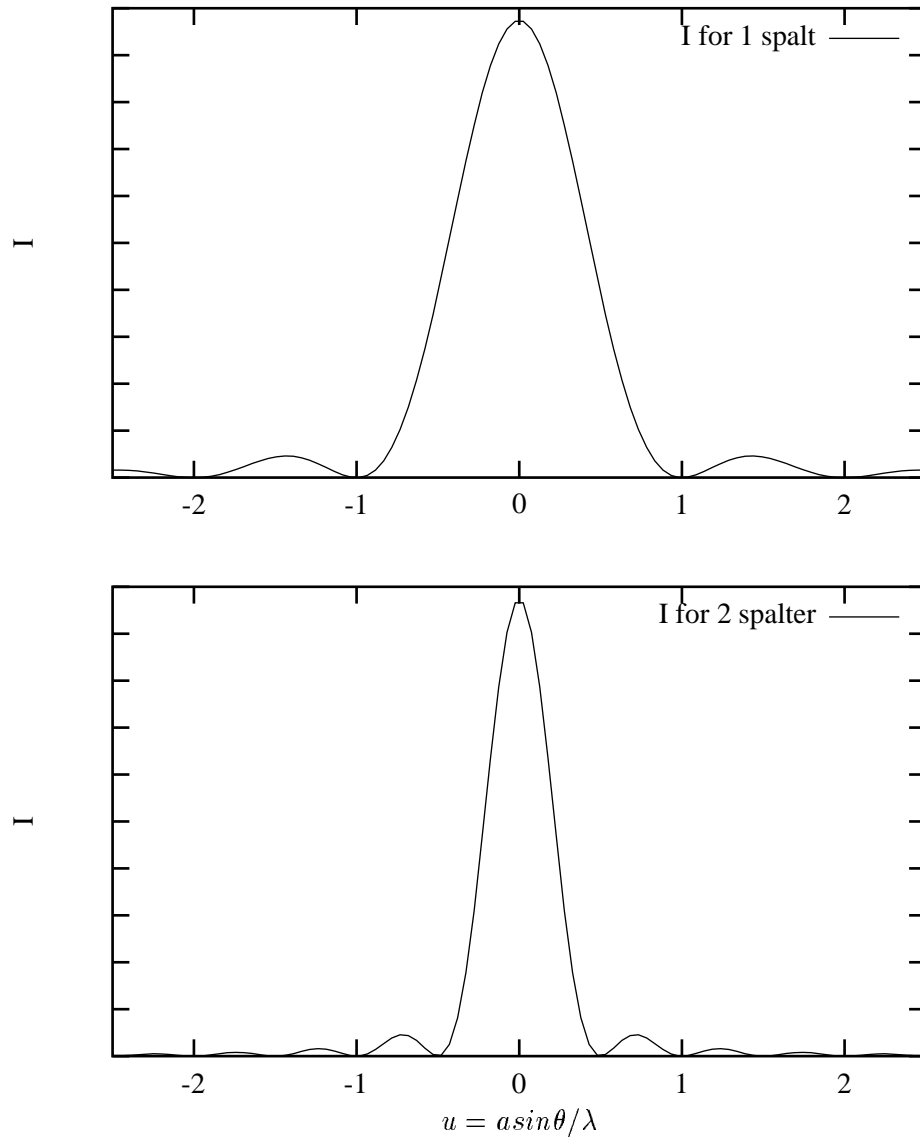
Anta at du er i stand til å lage en firkantpuls som vist i neste figur. Denne pulsen er sentrert rundt et bestemt bølgetall k_0 (eller frekvens om du foretrekker det). Den er null når $k < k_0 - \Delta$ og $k > k_0 + \Delta$. Vi kan nå tenke oss at vi har en bølgefunksjon $\psi(x)$ ved tida $t = 0$ gitt som et integral over alle mulige bølgetall k . Vi antar også at pulsen vår har en amplitude lik $A(k) = 1$ for hvert bølgetall som faller innenfor det tillatte intervallet, slik at bølgefunksjonen blir da

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \cos(2\pi kx) dk = \int_{k_0 - \Delta}^{k_0 + \Delta} \cos(2\pi kx) dk. \quad (3.65)$$

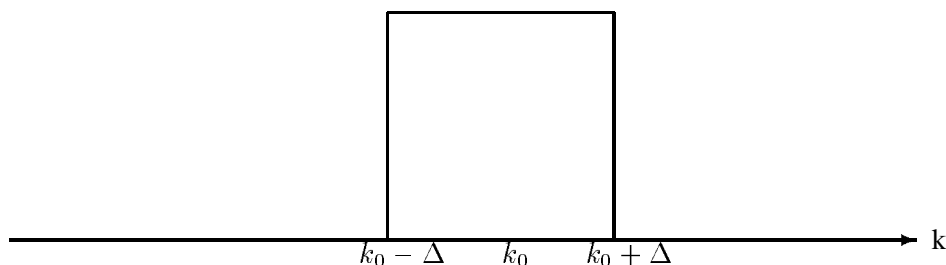
Her har vi valgt en cosinus funksjon for hver k -verdi. I tillegg så er pulsen vår forskjellig fra null for kun bestemte verdier av k , slik at vi kan redusere integralet til et lite område.

Dette integralet kan lett løses, og vi finner

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi x} \int_{2\pi(k_0 - \Delta)x}^{2\pi(k_0 + \Delta)x} \cos(2\pi kx) d(2\pi kx), \quad (3.66)$$



Figur 3.11: Eksempel på interferensmønster med henholdsvis 1 og 2 spalteåpninger. Her har vi for enkelthetsskyld satt $a = d$ for tilfellet med to spalter.



Figur 3.12: Eksempel på firkantpuls sentrert rundt et bølgetall k_0 .

som gir

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi x} [\sin(2\pi(k_0 + \Delta)x) - \sin(2\pi(k_0 - \Delta)x)], \quad (3.67)$$

som gir

$$\psi(x) = \frac{1}{\pi x} [\cos(2\pi k_0 x) \sin(2\pi \Delta x)], \quad (3.68)$$

eller

$$\psi(x) = 2\Delta \cos(2\pi k_0 x) \frac{\sin(2\pi \Delta x)}{2\pi \Delta x}. \quad (3.69)$$

La oss plote ψ som funksjon av x for to ulike verdier av Δ . Velg først $\Delta = 0.001$, dvs. at vår puls er skarpt bestemt rundt verdien k_0 . Deretter velger vi $\Delta = 100$, som betyr at vi integrerer over mange flere frekvenser.

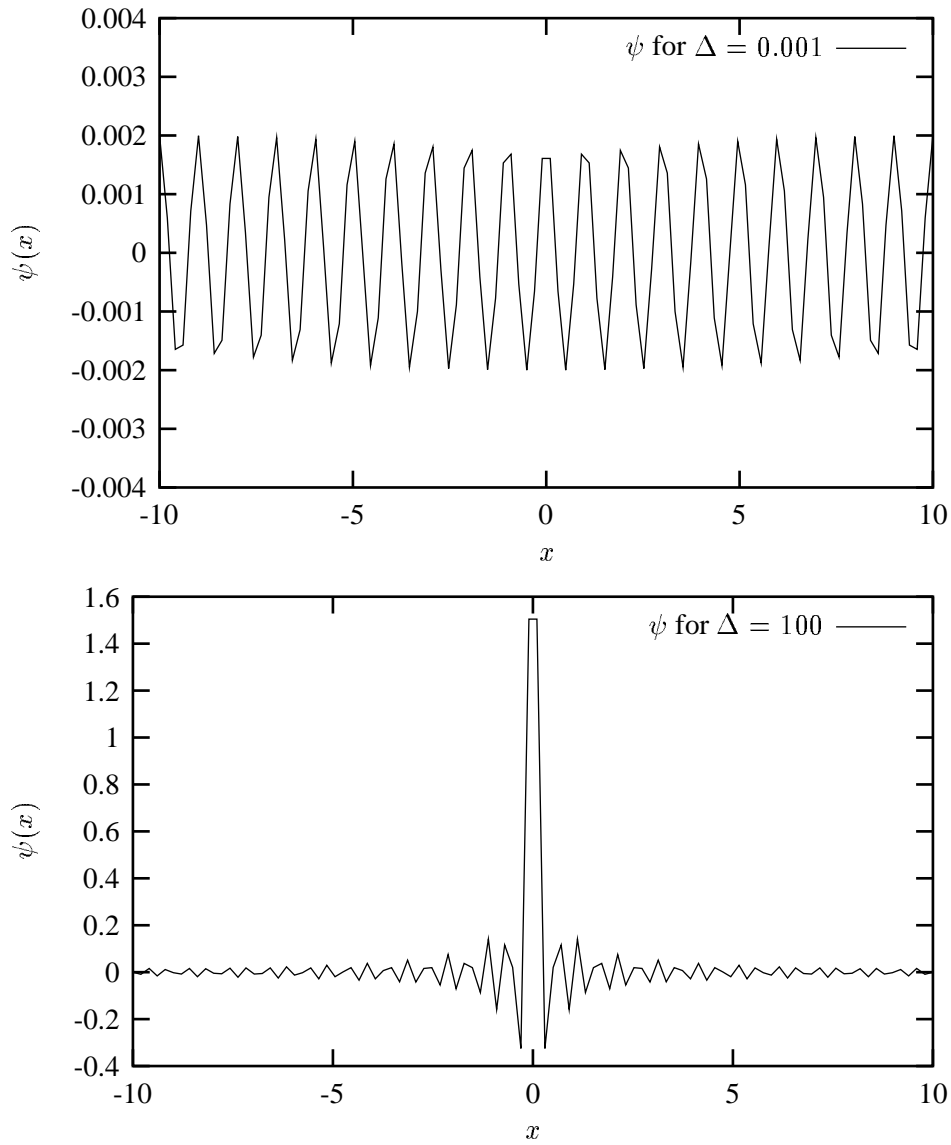
Vi legger merke til følgende:

- Dersom vi gjør Δ liten, som betyr at vi bestemmer k skarpt nær k_0 , resulterer dette i en bølgefunksjon $\psi(x) \propto \cos(2\pi k_0 x)$. Dette vil svare til vår harmoniske svingning i Figur 3.5 og en bølge av uendelig utstrekning. Integrerer vi over få bølgetall, får vi altså en bølge sentrert rundt kun et bølgetall. Vi kan si at sinus-delen svarer til den modulerte bølgefunksjonen, mens cosinus delen representerer de enkelte bølgene som settes sammen.
- Ønsker vi derimot en bølge som er sterkt lokalisert i rom og null eller liten for de fleste verdier av x , må vi øke intervallet over k -verdier i integrasjonen vår.
- Det sistnevnte gir oss den nødvendige koplingen til vår diskusjon om gruppehastighet og fasehastighet og en bølgepakkes utbredelse.
- Dersom vi nå ønsker å kople dette resultatet med fysikk har vi at siden

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h2\pi}{h\lambda} = \frac{p2\pi}{h}$$

eller

$$\hbar k = p$$

Figur 3.13: Eksempel på bølgefunksjon ψ for ulike verdier av Δ .

så betyr det at dersom vi ønsker å fikse bevegelsesmengden skarpt, dvs. $\Delta \rightarrow 0$, resulterer det i en bølgefunksjon av uendelig utbredelse. Ønsker vi at denne bølgefunksjonen skal representere en partikkel, betyr det igjen at vi ikke kan fikse posisjon og bevegelsesmengde skarpt samtidig. Tilsvarende, ønsker vi å fikse posisjonen skarpt, finner vi at uskarpheten til partikkelen øker.

Det siste leder oss til neste avsnitt om Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

3.4 Heisenbergs uskarphetsrelasjon

La oss først anvende⁷ resultatet fra avsnittet om diffraksjon på en innkommende bølge av elektroner med bølgelengde λ mot en spalteåpning med størrelse $d = \Delta y$. Et eksempel på et slikt oppsett er vist i Figur 3.14.

Når monokromatiske bølger med bølgelengde λ passerer åpningen vil det dannes et diffraksjonsmønster på skjermen. Det innfallende elektron har bevegelsesmengde kun i x -retningen før det treffer spalteåpningen. Første punkt hvor vi har destruktiv interferens er gitt ved

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{d} = \frac{\lambda}{\Delta y} = \frac{h}{p\Delta y}, \quad (3.70)$$

siden $\lambda = h/p$. Etter at elektronet har passert åpningen vil det også ha en bevegelsesmengde i y -retningen som vi ikke kjenner. Vi veit ikke med nøyaktighet hvor elektronet vil treffe skjermen, det eneste vi kan si er at det er en stor sannsynlighet for at det treffer i et område hvor intensiteten er maksimal. **Her har vi innført et sannsynlighetsbegrep som vi skal diskutere nærmere etter dette eksemplet.**

Vi kan anta at y -komponenten til bevegelsesmengden har en verdi mellom 0 og $p\sin\theta$, dvs.

$$\Delta p_y = p\sin\theta = \frac{h\lambda}{\lambda\Delta y} = \frac{h}{\Delta y}, \quad (3.71)$$

som gir en uskarphet

$$\Delta p_y \Delta y = h, \quad (3.72)$$

som på en konstant nær ($h = 2\pi\hbar$) er gitt ved Heisenbergs uskarphetsrelasjon

$$\Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.73)$$

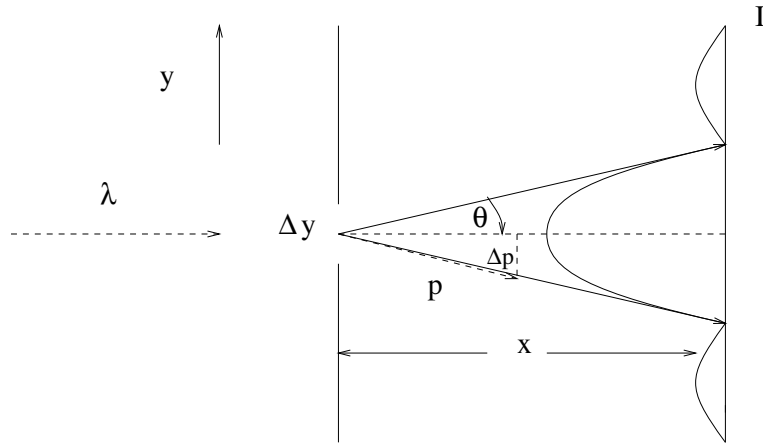
eller mer generelt

$$\Delta \mathbf{p} \Delta \mathbf{x} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.74)$$

Dette uttrykket skal vi utlede senere, under kapitlet om kvantemekanikkens formelle grunnlag.

Det vi skal merke oss her er at dette resultatet som kun er basert på bølgelære forteller oss at dersom vi ønsker å lokalisere skarpt på skjermen hvor elektronet treffer, dvs. at dersom vi setter $\Delta y = 0$ så vil Δp_y divergere. Vi kan altså ikke fikse skarpt både posisjon og bevegelsesmengde. Vi merker oss dog at dersom $\hbar = 0$, ville vi ikke hatt noe slikt problem. Klassisk er det slik at \mathbf{x} og \mathbf{p} er uavhengige

⁷Lesehenvisninger er kapitlene 4-3, 4-4 og 4-5, sidene 188-205. To små oppfordringer: den første med et snev av moralisme i seg. Jeg tar meg nemlig den frihet å anbefale sterkt at dere leser disse avsnittene i boka, da de danner et viktig grunnlag for bruddet med klassisk fysikk og introduksjonen av kvantemekanikken som teori. Vi kommer ikke til å gå noe i dybden på de filosofiske aspektene i disse notatene. Derfor den andre oppfordringen. Jeg setter pris på dersom dere tar disse emnene opp til diskusjon enten under forelesningene eller under oppgaveløsning.



Figur 3.14: Diffraksjon for materiebølge med bølgelengde λ som sendes mot en spalteåpning.

størrelser. Kvantemekanisk derimot, siden $h \neq 0$, så er avhengighets forholdet gitt ved Heisenbergs uskarphets relasjon. Dette impliserer igjen at vi ikke kan lokalisere en partikkel og samtidig bestemme dens bevegelsesmengde skarpt. En ytterligere konsekvens er at vi ikke kan i et bestemt eksperiment observere både partikkel og bølgeegenskaper. Vi skal se et eksempel på dette i diskusjonen lenger nede, men først noen ord om partikkel-bølge dualiteten.

3.4.1 Partikkel-Bølge dualitet

I det siste eksemplet innførte vi at diffraksjonsmønsteret som vi ser på skjermen skal representere en sannsynlighet for at elektronet er å finne et bestemt sted. Vi skal nå anskueliggjøre dette ved å se på uttrykket for intensiteten for det elektromagnetiske feltet.

Klassisk, dvs. fra e.m. teori og dermed FY101, har vi at bølgefunksjonen til f.eks. det elektriske feltet er gitt ved

$$\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}_0 \sin(kx - \omega t), \quad (3.75)$$

og at intensiteten til det e.m. feltet, dvs. energi som kommer inn per areal per sekund, er gitt ved

$$I = c\epsilon_0 \mathcal{E}_0^2, \quad (3.76)$$

hvor \mathcal{E}_0 er amplituden til feltet. Et eksempel på uttrykk for I er gitt ved likning (3.64). Vi kan si at intensiteten er proporsjonal med bølgefunksjonen kvadrert, dvs.

$$I \propto \mathcal{E}^2. \quad (3.77)$$

Dette er et resultat som baserer seg kun på klassisk bølgelære, dvs. et reint bølgebilde av e.m. stråling.

Dersom vi tar utgangspunkt i Einsteins og Plancks kvantseringshypoteser for det e.m. felt, så tilordner vi partikkel egenskaper til intensiteten. I dette tilfellet har vi at

$$I = h\nu N_\gamma, \quad (3.78)$$

hvor $h\nu$ er det velkjente uttrykket for energien til et foton mens N_γ er midlere antall fotoner per areal per sekund som kommer inn i et område. Denne størrelsen er igjen et uttrykk for en sannsynlighet for å finne et gitt antall fotoner i et bestemt område. **Det er dette begrepet vi nå skal kople til det klassiske resultatet for I .**

Dersom vi nå går tilbake til diffraksjonsmønsteret i likning (3.64) kan vi kople til interferensmaksima et begrep om at det er der flest fotoner treffer plata.

Interferensmaksima er kopla til bølgeegenskapen til fotonene, men når vi setter

$$I = h\nu N_\gamma = c\epsilon_0 \mathcal{E}_0^2, \quad (3.79)$$

så relaterer vi partikkelegenskaper til bølgeegenskaper og vi sier at relasjonen

$$N_\gamma \propto \mathcal{E}_0^2 \quad (3.80)$$

skal uttrykke et forhold mellom en intensitetsfordeling fra bølgeoppførsel og en sannsynlighet for å detektere fotoner.

Mere generelt, når vi erstatter det elektriske felt med bølgefunksjonen ψ , så skal størrelsen

$$|\psi(x, t)|^2 dx, \quad (3.81)$$

uttrykke sannsynligheten for å finne en partikkel (hvis bevegelseslikninger er beskrevet av en bølge ψ) i et område mellom x og $x + dx$. Det er denne tolkningen som danner basis for kvantemekanikken.

To spalteåpninger

Anta at vi har to spalteåpninger som vi sender elektroner mot. Avstanden mellom spalteåpningene kaller vi igjen for a . Intensiteten ved skjermen var da gitt ved likning (3.64), som igjen fortalte oss at vi kan ha konstruktiv interferens når betingelsen

$$\sin\theta_n = n\frac{\lambda}{a}, \quad (3.82)$$

er oppfylt med gitt bølgelengden λ . Dersom vi kaller avstanden fra spalteåpningene til skjermen hvor vi observerer et diffraksjonsmønster for b , så har vi at avstanden mellom to interferensmaksima er gitt ved

$$b(\sin\theta_n - \sin\theta_{n-1}) = \frac{b\lambda}{a}. \quad (3.83)$$

La oss anta at vi krever at vi er istand til å måle elektronets posisjon med en presisjon som er mindre en halvparten av avstanden mellom spaltene, dvs.

$$\Delta y < \frac{a}{2}. \quad (3.84)$$

Vi kan f.eks. anta at vi har en eller annen monitor rett ved skjermen som forteller oss hvilken spalteåpning elektronet passerte. Ved bruk av en slik monitor tilføres elektronet en bevegelsesmengde i y -retningen (parallelt med skjermen) hvis størrelse er uskarpt og gitt ved

$$\Delta p_y > \frac{2h}{a}. \quad (3.85)$$

En slik uskarphet i bevegelsesmengde resulterer i en relativ uskarphet

$$\frac{\Delta p_y}{p} > \frac{2h}{ap} = \frac{2\lambda}{a}. \quad (3.86)$$

En slik uskarphet medfører en uskarphet i elektronets posisjon på skjermen som ihvertfall er gitt ved

$$\frac{2\lambda b}{a}, \quad (3.87)$$

som er større enn avstanden mellom interferensmaksima i likning (3.83). Det betyr igjen at dersom vi ønsker å måle elektronets posisjon presist, vil vi komme til å ødelegge interferensmønsteret. Vi kan ikke observere fra et enkeltstående eksperiment både bølge og partikkelegenskapene til materie, eller e.m. stråling for den saks skyld. Bølge og partikkelegenskapene er altså to komplementære egenskaper ved materien.

Dersom vi ønsker å formulere matematisk konsekvensene av det siste eksemplet så må vi ha

$$\Delta p_y \Delta y > h. \quad (3.88)$$

3.4.2 Størrelsesorden estimerer, leik med uskarphetsrelasjonen

Hensikten med dette avsnittet er å vise at når vi kjenner til formen for energien et system har, så kan vi bruke uskarphetsrelasjonen til å estimere størrelser slik som bindingsenergien til et elektron i et hydrogennatom, eller hvor stor massen til en nøytronstjerne er!

“Realiteten” til Bohrs orbitaler

Vi så i forrige kapittel at Bohrs atommodell ga oss en definisjon på Bohrradiene gitt ved

$$r_n = \frac{\hbar n^2}{\alpha m_e c}, \quad (3.89)$$

hvor α er finstrukturkonstanten. Anta at vi er interessert i å måle hvor elektronet befinner seg i et atom. Vi krever at nøyaktigheten er slik at

$$\Delta x \ll r_n - r_{n-1} = \frac{\hbar(2n-1)}{\alpha m_e c}, \quad (3.90)$$

for at vi skal kunne fastslå med rimelig nøyaktighet at et elektron er i en bestemt orbital med kvantetall n . Men dette kravet leder til en uskarphet i bevegelsesmengde⁸ gitt ved

$$\Delta p \gg \frac{\alpha m_e c}{2(2n-1)}. \quad (3.91)$$

Dersom vi bruker resultatet fra Bohrs atommodell for hastigheten til et elektron i en gitt bane, v_n , har vi en bevegelsesmengde

$$p = m_e v_n = \frac{\alpha m_e c}{n} \quad (3.92)$$

som er på størrelse med Δp ! Vi kan så prøve å regne ut uskarpheten i energien til elektronet. Da trenger vi det ikke-relativistiske uttrykket for $E = p^2/2m_e$, som gir at

$$\Delta E = \frac{p \Delta p}{m_e}, \quad (3.93)$$

som gir

$$\Delta E = \frac{p \Delta p}{m_e} \gg \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 m_e c^2}{n^2 (2n-1)} = 13.6 \frac{1}{2n^2 - 1}, \quad (3.94)$$

som betyr at uskarpheten i energien er mye større enn bindingsenergien til elektronet. En slik måling av elektronet vil sparke elektronet ut av sin orbital, dvs. vi er ikke i stand til å måle hvor det befinner seg i atomet.

⁸Her bruker vi det eksakte uttrykket for Heisenbergs uskarphetsrelasjon gitt i likning (3.74).

Bindingsenergien til elektronet i hydrogenatomet

La oss anta at elektronet er i sin grunntilstand i hydrogenatomet. Vi antar også basert på Heisenbergs uskarphetsrelasjon at vi kan sette

$$p \sim \frac{\hbar}{r}. \quad (3.95)$$

Energien til dette elektronet vil være gitt av summen av kinetisk og potensiell energi, dvs.

$$E = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.96)$$

Setter vi inn uttrykket for p finner vi

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2r^2 m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.97)$$

Nå kan vi betrakte r som en variabel som kan varieres. Dersom vi ønsker å finne energiens minimum, trenger vi kun å finne radien når

$$\frac{dE}{dr} = 0. \quad (3.98)$$

Dette gir

$$r = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2}, \quad (3.99)$$

og setter vi r i uttrykket for energien har vi

$$E \sim -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(\hbar 4\pi\epsilon_0)^2} = -13.6 \text{ eV}, \quad (3.100)$$

akkurat den eksperimentelle verdien!

Det kan da ikke stemme at en så enkel antagelse som den gitt i likning (3.95) skal kunne gi oss den eksperimentelle energien til hydrogenatomet. Selv om vi var heldige ved valget, ser vi at dersom vi hadde valgt en annen verdi for forholdet mellom p , \hbar og r , så ville energien avvekke bare på en konstant nær. Dvs. at vi får ut en energi som har riktig størrelsesorden. Når vi kommer til Kap 7 i boka, skal vi faktisk regne ut Δp og Δr for hydrogenatomet og se at den antagelsen vi gjorde faktisk er fornuftig. Men, det viktige her er at uskarphetsrelasjonen gir oss en energi som har riktig størrelsesorden.

Vi skal ikke slippe dette eksemplet helt, fordi det er noen sider ved uskarphetsrelasjonen og bindingsenergien til et system som er av betydning for den videre forståelse. Det første dere skal bite dere merke i er at uskarphetsrelasjonen begrenser nedad bindingsenergien, den kan ikke bli uendelig stor i absoluttverdi. Det andre er at dersom vi tenker tilbake på Bohrs tredje postulat og ser for oss muligheten for at elektronet skulle deaksellereres og miste all sin energi, så vil det bety at det til slutt ville klappe sammen på atomkjernen. Når avstanden til kjernen minsker, kan vi også anta at Δx minsker. Men det betyr igjen at Δp øker slik at økningen i potensiell energi kompenseres ved en økning i kinetisk energi.

Massen til en nøytronstjerne

Nå har vi fått blod på tann. Vi kaster oss derfor friskt og freidig ut i verdensrommet og påstår at vi kan estimere massen til en nøytronstjerne. Ei nøytronstjerne består i all hovedsak av nøytroner, samt en liten innmiksing av protoner, elektroner, og andre baryoner, og kanskje muligens en fase av kvarkmaterie i sitt indre, hvor tettheten er ekstremt høy. Her skal vi anta at den består av bare nøytroner. Radiusen til ei slik

stjerne kaller vi for R . Vi bruker den gjennomsnittlige massen til protoner og nøytroner, og setter massen til nøytronet $m_n = 938 \text{ MeV}/c^2$. Vi antar at vi har N nøytroner i stjerna, dermed er antallstettheten n gitt ved

$$n \sim \frac{N}{R^3}, \quad (3.101)$$

noe som gir et volum per nøytron ved $1/n$. Radien til det volumelementet et enkelt nøytron da opptar er tilnærminingsvis gitt ved $r \sim 1/n^{1/3}$. Med en slik radius kan vi nå bruke Heisenbergs uskarphets relasjon på nytt

$$p \sim \frac{\hbar}{r} \sim \hbar n^{1/3}. \quad (3.102)$$

La oss så anta at nøytronene våre er ekstremt relativistiske og at de ikke vekselvirker. Da er den kinetiske energien til et nøytron gitt ved

$$E_n = \sqrt{p^2 c^2 + m_n^2 c^4} \approx pc \sim \hbar n^{1/3} c \sim \hbar c \frac{N^{1/3}}{R}. \quad (3.103)$$

Den gravitasjonelle energien per nøytron, når den totale massen til stjerna er gitt ved

$$M = Nm_n, \quad (3.104)$$

er gitt ved

$$E_G \sim -\frac{GMm_n}{R}, \quad (3.105)$$

hvor G er gravitasjonskonstanten. Energien må da være gitt ved energien til nøytronene og den gravitasjonelle energien. Vi har da

$$E = E_n + E_G = \hbar c \frac{N^{1/3}}{R} - \frac{GNm_n^2}{R}. \quad (3.106)$$

Likevekt oppnås når energi er et minimum, noe som forteller om balansen mellom gravitasjonskreftene og den kinetiske energien til nøytronene. Deriverer vi E mhp. R finner vi det totale antall partikler ved likevekt er gitt ved

$$N_{likevekt} \sim \left(\frac{\hbar c}{Gm_n^2} \right)^{3/2} \sim 2 \times 10^{57}. \quad (3.107)$$

Massen ved likevekt er da gitt ved

$$M_{likevekt} \sim N_{likevekt} m_n = 2 \times 10^{57} \cdot 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg} = 3.3 \times 10^{30} \text{ kg}. \quad (3.108)$$

Massen til sola er $M_\odot = 1.98 \times 10^{30} \text{ kg}$. Dvs. at vi finner at massen til vår nøytronstjerne er ca. $1.66 M_\odot$. Massen til nøytronstjerner målt i binære systemer⁹ ligger på ca. $1.4 M_\odot$. Ikke verst hva?

Estimat for kjernekreftenes størrelse

For elektroner, og dermed for systemer som behandles i atomfysikk, faste stoffers fysikk og molekylfysikk, opererer vi med en energi skala på noen få til kanskje noen tusen eV. Dette gir igjen lengdeskalaer på noen nanometer.

For kjernekreftene, dvs de kreftene som uttrykker vekselvirkningene mellom f.eks protoner og nøytroner, veit vi at rekkevidden til kreftene er bare noen få femtometer, $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$. Dette impliserer en ny

⁹Nobelpris i Fysikk 1993 til Hulse og Taylor.

energiskala som er forskjellig fra den vi kjenner til i Bohrs atommodell. For å se dette kan vi igjen bruke uskarphetsrelasjonen på forma

$$p \sim \frac{\hbar}{r}.$$

Setter vi $r \sim 1$ fm, får vi at den kinetiske energien som et proton eller et nøytron kan ha i en atomkjerne blir

$$\frac{p^2}{2m_p} \sim \frac{\hbar^2}{2m_p r^2}. \quad (3.109)$$

Setter vi inn $m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$ og at $\hbar c = 197 \text{ MeVfm}$, finner vi

$$\frac{\hbar^2}{2m_p r^2} = \frac{197^2}{2 \times 938} \text{ MeV} = 21 \text{ MeV}. \quad (3.110)$$

Det første vi merker oss er at energien måles nå i MeV, en million eV. Av denne grunn kalles også kjernekreftene for de sterke krefter. Nå er det slik, akkurat som for elektroner i atomer, at protoner og nøytroner er bundet sammen i en atomkjerne. Dvs. at vi også må ta med en potensiell energi, som igjen må være større (i absoluttverdi) enn den kinetiske energien til protoner og nøytroner for at disse partiklene skal holde sammen. Dvs. at den potensielle energien bør være større en 21 MeV.

3.4.3 Energi-tid uskarphetsrelasjonen

Gitt

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2},$$

har vi når vi bruker

$$\Delta E = \frac{p \Delta p}{m},$$

og

$$v = \frac{\Delta x}{\Delta t},$$

sammen med $p = mv$ at

$$\frac{p \Delta p}{m} \frac{\Delta x m}{p} = \Delta E \frac{\Delta x}{v} \quad (3.111)$$

som gir oss

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.112)$$

som er den tilsvarende energi-tid uskarphetsrelasjonen.

3.5 Oppgaver

3.5.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 3.1

I et elektronmikroskop får elektronene stor kinetisk energi ved at de akselereres i et elektrostatiske potensial V .

- a) Vis at de Broglie bølgelengden for et slikt ikke-relativistisk elektron er gitt ved formelen

$$\lambda = \frac{1,23}{\sqrt{V}} \text{ nm}$$

når V måles i volt.

- b) Hva blir den tilsvarende formelen hvis elektronet er relativistisk?
 c) For hvilken spenning V gir den ikke-relativistiske formelen et svar som er 5 % feil?

Oppgave 3.2

En partikkel med ladning e og masse m_0 akselereres av en elektrisk potensial V til en relativistisk hastighet.

- a) Vis at de Broglie bølgelengden for partikkelen er gitt ved

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV}} \left(1 + \frac{eV}{2m_0 c^2} \right)^{-1/2}$$

- b) Vis at dette gir $\lambda = h/p$ i den ikke-relativistiske grense.
 c) Vis at for en relativistisk partikkel med hvileenergi E_0 er de Broglie bølgelengden gitt ved

$$\lambda = \frac{1,24 \times 10^{-2}}{E_0 (\text{MeV})} \cdot \frac{\sqrt{1 - \beta^2}}{\beta} \text{ \AA},$$

hvor $\beta = v/c$.

Oppgave 3.3

Fra optikken vet vi at for å observere små objekter med lys, må bølgelengden maksimalt være av samme størrelsesorden som objektets utstrekning.

- a) Hva er den laveste frekvensen på lys som kan benyttes til å undersøke et objekt med radius 0.3 nm i et mikroskop?
 b) Hva er den tilsvarende energien?
 c) Hvis man i stedet ville bruke et elektronmikroskop, hva er da den laveste energien elektronene kan ha for at partikkelen skal kunne studeres i detalj?
 d) Er lys- eller elektronmikroskop å foretrekke for denne typen arbeid?

Oppgave 3.4

Lyd med frekvens 440 Hz og hastighet 340 ms^{-1} sendes normalt mot en smal spalte i en vegg. Spalten har en slik bredde at lydintensiteten har avtatt til det halve i en retning på 45° fra innfallsvinkelen bak veggen. Hvor bred er spalten?

Oppgave 3.5

Et fysisk system beskrevet ved hjelp av bølgeligninger som tillater $y = A \cos(kx - \omega t)$ som løsninger, der sirkelfrekvensen ω er en reell funksjon av bølgetallet k , kalles for et lineært, dispersivt system. Funksjonen $\omega(k)$ kalles for *dispersjonsrelasjonen* til systemet.

- a) Vis at dispersjonsrelasjonen for frie, relativistiske elektronbølger er gitt ved

$$\omega(k) = c \cdot \sqrt{k^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2},$$

der m er elektronets hvilemasse.

- b) Finn et uttrykk for fasehastigheten $v_f(k)$ og gruppehastigheten $v_g(k)$ til disse bølgene, og vis at produktet $v_f(k) \cdot v_g(k)$ er en konstant (uavhengig av k).
- c) Fra uttrykket for v_f ser vi at $v_f > c$! Kommenter dette fenomenet og hva det har å si for tolkningene av v_f og v_g ut fra den spesielle relativitetsteorien.

Oppgave 3.6

- a) En partikkel med masse 1 g har en uskarphet i hastigheten på $\Delta v = 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$. Hva blir den kvantemekaniske uskarpheten i posisjonen?
- b) Et elektron med energi 10 keV er lokalisert i et område med utstrekning 0,1 nm. Hva blir uskarpheten i bevegelsesmengden til elektronet?
- c) Hva blir uskarpheten i elektronets energi?
- d) Et proton i en atomkjerne kan bevege seg i et område med en utstrekning av størrelsesorden 10^{-15} m. Hvis vi antar at protonet er fanget i et uendelig potensial, hva er den minste kinetiske energien det kan ha? Anslå en størrelsesorden for styrken av potensialet hvis dette likevel kan antas å være endelig.

Oppgave 3.7. Eksamen H-1995

Den relativistiske sammenhengen mellom en partikkels bevegelsesmengde p og energi E er gitt ved

$$E = \sqrt{E_0^2 + (pc)^2},$$

hvor c er lyshastigheten.

- a) Forklar hva $E_k = E - E_0$ står for. Hva er E_0 og E_k for et foton? Finn sammenhengen mellom bølgelengden λ og bevegelsesmengden p for et foton.
- b) Gjør kort rede for de Broglie's ideer om materiebølger og sett opp uttrykket for de Broglie bølgelengden for en materiell partikkel med bevegelsesmengde p .
- c) Finn de Broglie bølgelengden for et elektron som funksjon av elektronets kinetiske energi. Bruk i dette tilfelle det ikke-relativistiske uttrykk for den kinetiske energien.

En mono-energetisk elektronstråle blir sendt skrått inn mot overflaten av en Al -krystall, og spres i visse retninger fra krystallen. Under behandlingen av et slikt spredningsproblem gjør en bruk av den såkalte Braggbetingelsen

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

- d) Forklar de størrelsene som inngår og lag en enkel skisse av det eksperimentelle oppsettet.

Kort fasit

- a) $E_k = E - E_0 = \sqrt{E_0^2 + (pc)^2}$ = kinetisk energi. For et foton er $E_0 = \text{hvileenergi} = 0$, $E_k = pc$, $\lambda = h/p$.
- b) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 4.1, $\lambda = h/p$.
- c) $E_k = p^2/2m \rightarrow p = \sqrt{2mE_k}$, innsatt i $\lambda = h/p$.
- d) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 2.6

Del II

ENKLE KVANTEMEKANISKE SYSTEMER, FRA PARTIKKEL I BOKS TIL HYDROGENATOMET

Kapittel 4

INTRODUKSJON TIL KVANTEMESKANIKKEN

Lasciate ogni speranza, voi che entrate. *Dante Alighieri, Divina Commedia, Inferno, canto 3*

Hensikten med dette kapitlet er å gi dere en introduksjon til Schrödingers likning, tolkning av bølgefunksjonen slik Born ga og sakte men sikkert diskutere anvendelser av Schrödingers likning for systemer hvor den potensielle energien er gitt på enkel form slik at vi kan finne analytiske løsninger av Schrödingers likning. Slike systemer er f.eks. et harmonisk oscillator potensial eller et såkalla kassepotensial. Felles for disse systemene er at de utviser viktige egenskaper ved et kvantemekanisk system slik som energikvantisering. I tillegg gir disse systemene en brukbar første approksimasjon til virkelige systemer. I en slik en forstand, og dette er noe jeg virkelig vil stresser for dere, dersom dere forstår tilnærmingene som vi gjør for disse enkle systemene, og får et grep om fysikken bak, så er min påstand at dere langt på vei vil nærme dere en bedre forståelse av Schrödingers likning og kvantemekaniske systemer.

4.1 Schrödingers likning

I dette avsnittet¹ skal vi sannsynliggjøre hvordan vi kan komme fram til Schrödingers likning. Schrödingers likning er en bevegelseslikning som baseres seg på kreftene som virker på en partikkel og som skal gi oss en bølgefunksjon til beskrivelsen av en partikkels ulike egenskaper slik som posisjon, bølgesinn, energi etc. Schrödingers likning kan ikke utledes fra basale prinsipper, noe som er også felles for Maxwells likninger. Derimot rettferdiggjør vi Schrödingers likning ved å anvende den for å beskrive ulike fysiske systemer.

Selv om vi ikke har noen basale prinsipper (det hadde ikke Newton heller) for utledningen av Schrödingers likning, kan vi si at den viten om kvantemekaniske effekter som var akkumulert fram til presentasjonen av Schrödingers likning ga oss et sett av hypoteser og postulater for å utlede en bølgelikning for materie på mikronivå.

Bakgrunnen kan vi oppsummere i følgende fire punkter

1. Konsistens med de Broglie-Einstein postulater

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \nu = \frac{E}{h} \quad (4.1)$$

¹Lesehenvisning er kap 5-1 sidene 220-226.

2. Energien (ikke-relativistisk) er gitt ved

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (4.2)$$

3. Dersom $\Psi_1(x, t)$ og $\Psi_2(x, t)$ er løsninger er også

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) \quad (4.3)$$

Dette kalles for krav om lineæritet, som igjen sikrer interferensmønster og diffraksjonsmønster slik vi observerte i forrige kapittel for materiebølger. Dette skal vi vise eksplisitt i neste avsnitt.

4. Dersom $V(x, t) = V_0$ en konstant, har vi

$$F = -\frac{\partial V_0}{\partial x} = 0 \quad (4.4)$$

og Newtons bevegelseslov forteller at p er konstant som igjen betyr at E er konstant. Løsningen blir da av typen

$$\Psi \propto \sin(kx - \omega t) \quad (4.5)$$

Det er denne syntesen, basert på bestemte postulater og med en tilhørende teoretisk beskrivelse som gir, sammen med eksperiment, essensen i den vitenskapelige framgangsmåte i fysikk. Vi kan trygt si at fysikk er et eksperimentelt fag. Dog, siden vi tar mål av oss å avdekke naturens lover, så blir konsekvensene av denne syntesen ytterste spennende, fra teorier om universets tilblivelse til måten PC'en på labben eller hjemme virker. Arbeidshesten i PC'en er en halvleder transistor, CMOS, som igjen er et vakkert eksempel på et kvantemekanisk system.

Dersom vi nå anvender de Broglie-Einstein hypotesen på uttrykket for energien får vi

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x, t), \quad (4.6)$$

hvor vi har brukt at $p = \hbar k$. Innfører vi deretter at $E = h\nu = \hbar\omega$ finner vi at

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x, t) = \hbar\omega. \quad (4.7)$$

Her har vi overført $E = \hbar\omega$ fra fotoner til materiebølger dvs.

$$\omega = \omega(k), \quad (4.8)$$

som kalles en dispersjonsrelasjon for ω .

Det vi skal legge merke til er at energien er proporsjonal med ω og k^2 .

I bølgelikningen fra klassisk fysikk har vi et ledd med den andre deriverte av bølgefunksjonen mhp. tid og et med den andre deriverte mhp. posisjon. Det skulle tilsi at dersom vi antar at bølgefunksjonen har ei løsning på formen

$$\Psi(x, t) = \sin(kx - \omega t) \quad (4.9)$$

og at denne bølgefunksjonen kan representere en partikkel, har vi at

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -k^2 \sin(kx - \omega t) = -k^2 \Psi(x, t) \quad (4.10)$$

og

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} = \omega^2 \sin(kx - \omega t) = \omega^2 \Psi(x, t). \quad (4.11)$$

Men vi ser at dette gir et uttrykk som relaterer k^2 til ω^2 , som passer dårlig med uttrykket for E .
 Rekner vi ut den første deriverte mhp. tid finner vi

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\omega \cos(kx - \omega t) \neq -\omega \Psi(x, t). \quad (4.12)$$

Dette eksemplet viser at for å få et uttrykk for energien som går som $E = \hbar\omega$ trenger vi altså den første deriverte av bølgefunksjonen mhp. tid t . For å få et uttrykk for kinetisk energi som er i samsvar med k^2 trenger vi den andre deriverte av bølgefunksjonen mhp. posisjon x .

Dersom vi nå setter $V(x, t) = V_0$, som er en konstant, kan vi altså gjette på ei bølgelikning som har form som

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 \Psi(x, t) = \beta \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (4.13)$$

Siden likning (4.12) ikke er proporsjonal med bølgefunksjonen, prøver vi oss med

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma \sin(kx - \omega t). \quad (4.14)$$

Vi ser da at

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -k^2 \Psi(x, t) \quad (4.15)$$

og at

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \omega \sin(kx - \omega t) - \omega \gamma \cos(kx - \omega t), \quad (4.16)$$

som innsatt i likning (4.13) gir

$$-\alpha k^2 (\cos(kx - \omega t) + \gamma \sin(kx - \omega t)) + V_0 (\cos(kx - \omega t) + \gamma \sin(kx - \omega t)) = \beta \omega (\sin(kx - \omega t) - \gamma \cos(kx - \omega t)), \quad (4.17)$$

eller

$$[-\alpha k^2 + V_0 + \beta \gamma \omega] \cos(kx - \omega t) + [-\alpha k^2 \gamma + V_0 \gamma - \beta \omega] \sin(kx - \omega t) = 0 \quad (4.18)$$

som gir

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta \gamma \omega, \quad (4.19)$$

og

$$-\alpha k^2 \gamma + V_0 \gamma = \beta \omega, \quad (4.20)$$

som leder til

$$-\beta \gamma^2 \omega - \beta \omega = 0, \quad (4.21)$$

eller

$$-\gamma^2 = 1, \quad (4.22)$$

som igjen betyr at $\gamma = \pm i$, dvs.

$$-\alpha k^2 + V_0 = \pm i \beta \omega, \quad (4.23)$$

som skal sammenliknes med

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar \omega.$$

Det betyr at

$$-\alpha = \frac{\hbar^2}{2m}, \quad (4.24)$$

og

$$\pm i\beta = \hbar, \quad (4.25)$$

eller

$$\beta = \pm i\hbar, \quad (4.26)$$

Dette betyr at

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t) = e^{i(kx - \omega t)}, \quad (4.27)$$

og at vi kan skrive likning (4.13) som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (4.28)$$

Til nå har vi antatt at V_0 er konstant. Vi postulerer at siste likning også skal gjelde for et generelt potensial slik at Schrödingers likning kan skrives på generell form som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (4.29)$$

Dette er den kvantemekaniske bevegelseslikning som er analog til f.eks. Newtons lover eller Maxwells likninger. Bølgefunksjonen skal altså inneholde opplysninger om partikkelens posisjon og bevegelsesmengde innafor den usikkerhet som er diktert av Heisenbergs uskarphets relasjon.

Vi merker oss at Schrödingers likning ikke er en fullstendig likning for kvantemekaniske systemer, bla. kan vi ikke bruke den til å beskrive fotoner, som tilhører en partikkelgruppe som går under navnet bosoner. I tillegg er den basert på et ikke-relativistisk uttrykk for energien. Det var Dirac som introduserte en relativistisk kvantemekanisk likning for både elektroner og fotoner ved å starte med uttrykket for energien

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + (mc^2)^2} + V. \quad (4.30)$$

4.2 Borns sannsynlighetstolkning

Her skal vi introdusere Borns tolkning². Vi har altså sett at

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t) = e^{i(kx - \omega t)},$$

dvs. at bølgefunksjonen er kompleks, siden vi har at den første deriverte av tiden forholder seg til den andre deriverte mhp. posisjon x . At det er slik følger av uttrykket for energien som er utleda basert på de Broglie-Einstein hypotesen, som gir oss $p^2 \sim \hbar\omega$.

En kompleks bølgefunksjonen kan ikke måles, ei heller er vi i stand til å trekke paralleller til en klassisk bølgefunksjonen I Schrödingers likning kan vi betrakte bølgefunksjonen som et abstrakt matematisk begrep, et beregningsverktøy, som har mening innenfor rammen av Schrödingers likning og som skal gi oss matematisk reelle størrelser som energi, bevegelsesmengde og posisjon, for å nevne noen. Den inneholder all informasjon som uskarphetsprinsippet tillater oss å vite om den tilordnede partikkelen.

²Lesehenvising er kap 5-2 sidene 226-231.

For å gi bølgefunksjonen en tolkning dro Born veksel på partikkel-bølge dualiteten som vi diskuterte i forrige kapittel, se avsnitt 3.4.1, og foreslo at

$$P(x, t) = \Psi(x, t)^* \Psi(x, t), \quad (4.31)$$

hvor stjernesymbolet skal representere komplekskonjugering, skulle tolkes som en sannsynlighetstetthet hvor

$$P(x, t)dx = \Psi(x, t)^* \Psi(x, t)dx \quad (4.32)$$

gir oss sannsynligheten for å finne partikkelen innafor et område x til $x + dx$. Sannsynligheten må alltid være reell, noe vi kan se fra følgende. Antar vi at vi kan skrive

$$\Psi(x, t) = R(x, t) + iI(x, t) \quad (4.33)$$

hvor R og I er reelle funksjoner, gir det

$$\Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = (R - iI)(R + iI) = R^2 + I^2 \quad (4.34)$$

hvor vi har brukt at $i^2 = -1$.

Siden bølgefunksjonen skal representere en partikkel må den være av endelig utstrekning, ellers kan vi ikke snakke om muligheten for å finne partikkelen et bestemt sted, se f.eks. figur 5.3 i boka. Dette gir oss noen føringer på selve bølgefunksjonen

1. For at vi skal kunne gi den en sannsynlighetstolkning må den altså være endelig. I tillegg må summen (integral her da bølgefunksjonen er en kontinuerlig funksjon) av alle sannsynligheter være lik 1. Vi sier da at den er normerbar. Matematisk uttrykkes dette som

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x, t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* \Psi(x, t)dx = 1 \quad (4.35)$$

som betyr igjen at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* \Psi(x, t)dx < \infty \quad (4.36)$$

dvs. at bølgefunksjonen er kvadratisk normerbar, og $\Psi(x, t)$ må gå raskere mot null enn $x^{-1/2}$.

2. $\Psi(x, t)$ må være entydig, ellers vil vi ikke være i stand til å tilordne bølgefunksjonen f.eks. en bestemt bevegelsesmengde.
3. $\Psi(x, t)$ og $\partial \Psi(x, t) / \partial x$ må være kontinuerlige, for ellers vil Schrödingers likning divergere når vi rekner ut den andre deriverte mhp. x . Merk at disse to krav ikke gjelder når $V = \pm \infty$. Vi skal se eksempler på det i avsnitt 4.4

Vi nevnte i forrige avsnitt at bølgefunksjonen skal være lineær, dvs. at dersom Ψ_1 og Ψ_2 er to løsninger av Schrödingers likning, så er også $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ en løsning. Dette har konsekvenser dersom vi er interesserte i å observere et interferensmønster. Vi vet fra forrige kapittel at intensiteten er proporsjonal med $\Psi(x, t)^* \Psi(x, t)$, og for bestemte verdier av $k(x_1 - x_2)$ kunne vi ha konstruktiv eller destruktiv interferens. La oss anta at vi har to bølgefunksjonen ved $t = 0$ ved et punkt P . Den første bølgefunksjonen er da gitt ved

$$\Psi_1(x_1, t = 0) = A_1 e^{ikx_1}, \quad (4.37)$$

mens den andre er gitt ved

$$\Psi_2(x_2, t = 0) = A_2 e^{ikx_2}. \quad (4.38)$$

Definerer vi deretter

$$\Theta_1 = kx_1, \quad \Theta_2 = kx_2 \quad (4.39)$$

så har vi at

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \quad (4.40)$$

gir

$$|\Psi(x, t = 0)|^2 = (A_1 e^{-i\Theta_1} + A_2 e^{-i\Theta_2})(A_1 e^{i\Theta_1} + A_2 e^{i\Theta_2}), \quad (4.41)$$

som resulterer i

$$A_1^2 + A_2^2 + 2A_1 A_2 \cos(\Theta_1 - \Theta_2). \quad (4.42)$$

Vi merker oss at dette uttrykket har samme form som når vi adderte to bølger i avsnitt 3.3. Dersom vinkelen

$$\Theta_1 - \Theta_2 = 2n\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.43)$$

har vi

$$|\Psi(x, t = 0)|^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1 A_2, \quad (4.44)$$

og får dermed konstruktiv interferens. For

$$\Theta_1 - \Theta_2 = (2n + 1)\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.45)$$

fås

$$|\Psi(x, t = 0)|^2 = A_1^2 + A_2^2 - 2A_1 A_2, \quad (4.46)$$

som gir destruktiv interferens (dersom $A_1 = A_2$ får vi null).

Vi ser at kravet til linæritet som vi satte opp i avsnitt 4.1 gir oss muligheter for interferens, noe som er ønskelig utifra det vi har observert om materiebølger.

4.3 Egenfunksjoner og egenverdier

Vi skal³ nå ta vårt første skritt i retning av å løse Schrödingers likning gitt ved likning (4.29)

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

Dette er en såkalt partiell differensiallikning hvis løsning ikke alle har sett. I et kurs som FYS 211, vil teorien for slike likninger gjennomgås i detalj. Her skal vi anvende en teknikk som heter separasjon av variable, en teknikk som reduserer en differensiallikning med flere variable til et sett av ordinære differensiallikninger med kun en variabel. Teknikken består i å prøve en ansats for løsningen gitt ved

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \phi(t). \quad (4.47)$$

I tillegg, og dette er noe som dere sannsynligvis har sett fra klassisk fysikk også (tenk på Coulomb potensialet), skal vi anta at

$$V(x, t) = V(x). \quad (4.48)$$

³Lesehenviisning er kap 5-3 sidene 231-234.

Kvantemekanikken avviker ikke noe særlig fra klassisk fysikk hva angår den potensielle energiens variabel avhengighet. En slik forenkling av potensialet tillater oss å finne en løsning på formen angitt i likning (4.47). Dersom vi setter denne ansatsen for bølgefunksjonen inn i Schrödingers likning finner vi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x) \phi(t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) \phi(t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x) \phi(t)}{\partial t}, \quad (4.49)$$

som gir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi(t) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) \phi(t) = i\hbar \psi(x) \frac{\partial \phi(t)}{\partial t}, \quad (4.50)$$

og dividerer vi begge sider med $\psi(x) \phi(t)$ kommer vi fram til

$$\frac{1}{\psi(x)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) \right\} = \frac{i\hbar}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t}. \quad (4.51)$$

Vi merker oss at høyre side avhenger ikke av x og venstre side avhenger ikke av t . Det betyr igjen at deres felles verdi kan ikke avhenge av x eller t , noe som igjen leder til at den felles verdien må være en konstant. Vi kan skrive henholdsvis venstre og høyre side som to adskilte ordinære differensiallikninger hvor vi nå dropper symbolet for partiell derivasjon

$$\frac{1}{\psi(x)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) \right\} = C \quad (4.52)$$

og

$$\frac{i\hbar}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = C \quad (4.53)$$

som er en første ordens differensiallikning. C kalles for separasjonskonstanten, av samme grunn som denne teknikken kalles for separasjon av variable.

Vi kan omskrive siste likning som

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = C \frac{-i\phi(t)}{\hbar}$$

hvis løsning er gitt ved

$$\phi(t) = e^{-iCt/\hbar} = \cos(Ct/\hbar) - i \sin(Ct/\hbar). \quad (4.54)$$

Bruker vi deretter

$$\frac{C}{\hbar} = \omega, \quad (4.55)$$

finner vi ved å bruke $E = \hbar\omega$, at dette impliserer at $C = E$, energien til systemet. Vi kunne også sett at konstanten C har dimensjon energi fra en dimensjonsanalyse av eksponenten Ct/\hbar . En funksjon slik som $\ln(x)$, e^x , $\sin(x)$ osv. må alltid et argument som er dimensjonsløst. Vi kan ikke si at energien til systemet er $\ln(10\text{eV})$! Siden \hbar har dimensjon energi-tid og t har dimensjon tid, må C ha dimensjon energi.

Med $C = E$ ledes vi til den tidsuavhengige Schrödinger likning gitt ved

$$\frac{1}{\psi(x)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) \right\} = E \quad (4.56)$$

hvor nå $\psi(x)$ kalles egenfunksjoner og E kalles egenverdier. Merk at det er $\Psi(x, t)$ som kalles selve bølgefunksjonen. Den siste likning inneholder ikke i og gir dermed ikke nødvendigvis komplekse løsninger. I all hovedsak likner denne likningen på den klassiske likning for en svingende streng. Dette skal vi se

på i neste avsnitt når vi løser Schrödingers likning for en partikkel i en en-dimensjonal potensialbrønn. Vi skal se at også et klassisk system som en svingende streng utviser kvantisering av energien, dvs. at vi har diskrete egenenergier.

Vi kan nå prøve å anskueliggjøre den tidsuavhengige Schrödingers likning i likning (4.56) ved å sette $V(x) = V_0$. Da er energien gitt ved, dersom vi anvender de Broglies og Einsteins hypotese

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0, \quad (4.57)$$

som gir

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0). \quad (4.58)$$

Antar vi deretter at den romlige delen av bølgefunksjonen er gitt ved

$$\psi(x) = \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) = \sin(kx) \quad (4.59)$$

har vi

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -k^2 \psi(x), \quad (4.60)$$

som innsatt i den tidsuavhengige Schrödingers likning fra likning (4.56) gir

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x) = -k^2 \psi(x), \quad (4.61)$$

som igjen gir oss

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0),$$

i samsvar med likning (4.58).

4.4 Schrödinger likning for et uendelig bokspotensial

Vi skal nå prøve å løse⁴ den tidsuavhengige Schrödingers likning for noen enkle systemer. Konkret skal vi se på det idealiserte tilfellet med en partikkel i en uendelig potensialbrønn, for bla. å vise at Schrödingers likning gir kvantisering av energien. I tillegg, likner dette eksemplet mye på løsningen for en svingende streng som er fastspennet i begge ender. Men først skal vi se på løsningen av den tidsuavhengige Schrödingers likning for fri partikkel.

4.4.1 Fri partikkel

Vi kan her tenke oss at vi sender monoenergetiske (med bestemt bevegelsesmengde) protoner fra en syklotron mot en eller annen target, en blykjerne f.eks. Protonene har kun kinetisk energi og den tidsuavhengige Schrödingers likning reduseres til

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x), \quad (4.62)$$

som igjen gir en løsning som vi diskuterte i avsnitt 4.1, nemlig

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t), \quad (4.63)$$

⁴Lesehenvisning: kap 5-4.

eller dersom vi ønsker kan vi skrive løsningen på eksponensial form

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}, \quad (4.64)$$

hvor vi har definert bølgetallet

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (4.65)$$

og vinkelfrekvensen $\omega = E/\hbar$. Splitter vi eksponensialfunksjonen i en x -avhengig og en t -avhengig del har vi

$$\Psi(x, t) = e^{ikx} e^{-i\omega t} = e^{ikx} e^{-iEt/\hbar} = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}, \quad (4.66)$$

hvor $\psi(x) = e^{ikx}$. Denne representerer en bølge som reiser i retning økende x . På tilsvarende vis har vi ei bølge som reiser i retning minkende x gitt ved

$$\Psi(x, t) = e^{-ikx} e^{-iEt/\hbar}, \quad (4.67)$$

slik at vi kan skrive den generelle egenfunksjonen⁵ som

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (4.68)$$

hvor A og B er to konstanter som bestemmes fra normeringsbetingelsen diskutert i avsnitt 4.2. Vi skal merke oss her at dersom vi velger løsningen for en partikkel som beveger seg i positiv x -retning har vi at

$$\Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = A^* A e^{-i(kx - \omega t)} e^{i(kx - \omega t)} = A^* A, \quad (4.69)$$

en konstant. Dvs. at sannsynligheten for å finne partikkelen er like stor for alle x , noe som igjen betyr at uskarpheten i posisjon $\Delta x = \infty$. Det vil igjen si at $\Delta p = 0$ i henhold til Heisenbergs uskarphetsrelasjon. Selv om vi sier at uskarpheten i x er uendelig, så vil vi alltid assosiere en bestemt partikkel til en bølgefunksjon. I vårt tilfelle kan det være protonene som blir aksellerert i en syklotron og treffer en target av bly etter en viss avstand. Selv om vi ikke kan si eksakt hvor protonet er, så har en slik protonstråle en endelig utstrekning, fra syklotronen til den treffer blykjerne. I den forstand kan vi si at normaliseringsbetingelsen blir

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = \int_{-L/2}^{L/2} \Psi^* \Psi dx = LA^* A = 1, \quad (4.70)$$

hvor L er avstanden fra syklotronen til target, og $\Delta x < L$. Vi setter $\Psi = 0$ i områdene $-L/2 < x$ og $x > L/2$.

Virkemåten til en syklotron

I Michigan State University ved East Lansing, finnes det en supraledeende syklotron⁶ som produserer stråler med energier fra 20 MeV per nukleon (nøytron eller proton) til 200 MeV per nukleon. Radiofrekvensen (rf) til systemet sørger for et aksellerende potensial med en frekvens, som svarer til de ovennevnte energiene, mellom 9 MHz og 26.5 MHz. En supraledeende magnet setter opp magnetfelt mellom 3 og 5 Tesla. Syklotronen brukes til å aksellerere enkeltatomer, men kan også brukes til å aksellerere molekyler. For å produsere en stråle av protoner brukes f.eks H_2^+ molekyler.

En ladd partikkel i et magnetfelt påvirkes av en kraft F

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad (4.71)$$

⁵Merk at med egenfunksjonen mener vi $\psi(x)$ og ikke $\Psi(x, t)$, som er selve bølgefunksjonen.

⁶Se <http://intra.nscl.msu.edu/facility/k1200/>

hvor v er hastigheten, q ladingen og B magnetfeltet. Sentripetalaksellerasjonen er gitt ved

$$a_r = \frac{v^2}{r}, \quad (4.72)$$

som gir

$$F = m \frac{v^2}{r} = qvB. \quad (4.73)$$

Avstanden til sentrum av syklotronen er dermed gitt ved

$$r = \frac{mv}{qB}. \quad (4.74)$$

Dersom radien til syklotronen settes lik R , finner vi at den maksimale hastigheten som en ladd partikkel kan ha er gitt ved

$$v_{\text{maks}} = \frac{qBR}{m}, \quad (4.75)$$

som gir en resulterende kinetisk energi

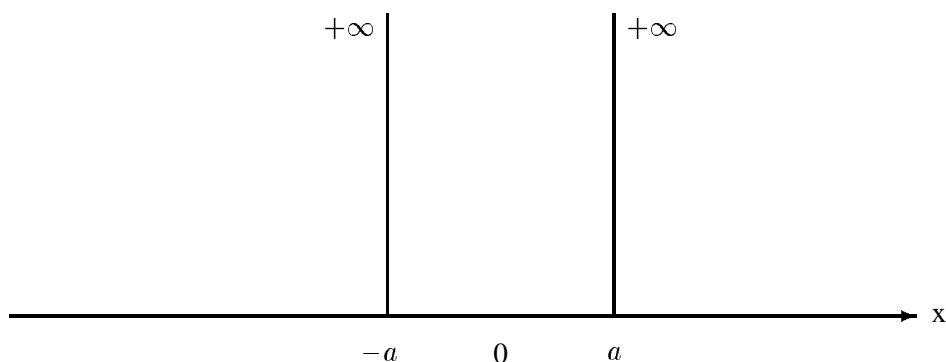
$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \frac{q^2 B^2 R^2}{m}. \quad (4.76)$$

4.4.2 Uendelig potensialbrønn

Vi skal nå se på et system hvor en partikkel kan antas å bevege seg i et såkalt uendelig kassepotensial gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x \leq -a \\ 0 & -a < x < +a \\ +\infty & x \geq +a, \end{cases} \quad (4.77)$$

med en skjematisk skisse som vist i Figur 4.1. Den tidsuavhengige Schrödingers likning blir dermed



Figur 4.1: Eksempel på et uendelig kassepotensial, med $V(x) = \infty$ ved $x = -a$ og $x = a$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \quad (4.78)$$

for området $-a < x < +a$. Vi kan omskrive siste likning som

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right) \psi(x) = 0, \quad (4.79)$$

og med

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.80)$$

som systemets energi har vi

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \psi(x) = 0. \quad (4.81)$$

Vi ser at den tidsavhengige Schrödingers likning reduserer seg i området $-a < x < +a$ til Schrödingers likning for en fri partikkel. En generell løsning til denne likningen blir dermed (siden vi har å gjøre med en andre ordens differensiallikning får vi to konstanter A og B , se det foregående eksemplet for fri partikkel)

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \quad (4.82)$$

eller

$$\psi(x) = A' e^{i(kx - \omega t)} + B' e^{-i(kx + \omega t)}, \quad (4.83)$$

hvor det første leddet representerer ei bølge som reiser i positiv x -retning mens det andre leddet er ei bølge som reiser i negativ x -retning.

Fra avsnitt 4.2 har vi betingelsen om at bølgefunksjonen og dens deriverte $d\psi(x)/dx$ skal være kontinuerlig. Men siden vi har et potensial av uendelig utstrekning ved $|x| = a$, byr dette på noen problemer. I områdene $|x| \geq |a|$ er $V(x) = +\infty$ overalt. Klassisk og konkret svarer det til å sette en uigjennomtrenelig vegg foran partikkelen. Partikkelen kan da umulig befinne seg i dette området. Dette vil også gjelde kvantemekanisk, det må være null sannsynlighet for å finne partikkelen i et punkt i dette området. Dette betyr at

$$\psi(x) \equiv 0$$

for alle $|x| \geq |a|$. Fysisk er dette fullstendig rimelig, men vi kan også sannsynliggjøre det ut i fra Schrödingers likning :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (4.84)$$

Siden $V(x) = +\infty$ betyr det at venstresiden av likningen vil være uendelig stor. Vi kan da tenke oss to måter å få likningen til å gå opp på :

1. Vi kan la $\psi(x) = \infty$.
2. Vi kan la $\psi(x) \equiv 0$.

Den første muligheten er fullstendig ufysikalsk, da den gir en uendelig sannsynlighet for å finne partikkelen i ethvert punkt $|x| \geq |a|$. Bare den siste muligheten er akseptabel, og derfor er

$$\psi(x) = 0 \quad (4.85)$$

for alle $|x| \geq |a|$. I følge kravene til bølgefunksjonen må ψ være kontinuerlig i $|x| = a$. Det betyr at

$$\psi(x = a) = 0 \quad (4.86)$$

Siden $V(x)$ er uendelig for $|x| \geq |a|$ kan vi ikke kreve at ψ skal være kontinuerlig deriverbar i $x = a$.

Den siste betingelsen leder til

$$\psi(x = a) = 0 = A\cos(ka) + B\sin(ka), \quad (4.87)$$

og

$$\psi(x = -a) = 0 = A\cos(ka) - B\sin(ka), \quad (4.88)$$

Dersom vi subtraherer de to siste likninger finner vi

$$2B\sin(ka) = 0, \quad (4.89)$$

og adderer vi har en

$$2A\cos(ka) = 0. \quad (4.90)$$

Vi kan ikke ha både A og B lik null for da vil ψ være null for en gitt verdi av k . Ei heller klarer vi å finne ei løsning hvor både $\cos(ka) = 0$ og $\sin(ka) = 0$. Vi velger derfor to forskjellige løsninger, en hvor $B = 0$ som gir

$$\psi(x) = A\cos(kx), \quad (4.91)$$

som er null når $ka = n\pi/2$, med $n = \pm 1, \pm 3, \dots$, dvs

$$k = \frac{n\pi}{2a}, \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots, \quad (4.92)$$

slik at vi har

$$\psi(x) = A\cos\left(x\frac{n\pi}{2a}\right). \quad (4.93)$$

Tilsvarende har vi en løsning når $A = 0$ som gir

$$\psi(x) = B\sin(kx), \quad (4.94)$$

som er null når $ka = n\pi/2$, med $n = \pm 2, \pm 4, \dots$, dvs

$$k = \frac{n\pi}{2a}, \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots, \quad (4.95)$$

slik at vi har

$$\psi(x) = B\sin\left(x\frac{n\pi}{2a}\right). \quad (4.96)$$

Merk at vi ikke tar med $n = 0$ da det gir den trivielle løsningen $\psi(x) = 0$, som igjen betyr når vi bruker Borns tolkning av bølgefunksjonen at det er null sannsynlighet for å finne partikkelen.

Med uttrykket for k har vi dermed at energien blir kvantisert siden E er gitt ved

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2. \quad (4.97)$$

Den generelle bølgefunksjonen blir dermed

$$\Psi_n(x, t) = A\cos\left(x\frac{n\pi}{2a}\right)e^{-iE_n t/\hbar} \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots, \quad (4.98)$$

og

$$\Psi_n(x, t) = A\sin\left(x\frac{n\pi}{2a}\right)e^{-iE_n t/\hbar} \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots, \quad (4.99)$$

La oss se på normaliseringsbetingelsen for bølgefunksjonen for å kunne bestemme konstantene A og B . La oss se på cosinus-løsningen først. Vi krever altså at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \psi(x) dx = \int_{-a}^a A^2 \cos^2(k_n x) dx = 1, \quad (4.100)$$

som gir oss at

$$\int_{-a}^a A^2 \cos^2(k_n x) dx = \int_{-a}^a \frac{1}{2} A^2 (1 + \cos(2k_n x)) dx = 1, \quad (4.101)$$

som resulterer i

$$\frac{1}{2} A^2 \left(2a + \frac{1}{2k_n} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \right) \Big|_{-a}^a = A^2 a = 1, \quad (4.102)$$

dvs.

$$A = \sqrt{\frac{1}{a}}. \quad (4.103)$$

Det gir oss en bølgefunksjon

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(x \frac{n\pi}{2a}\right) e^{-iE_n t/\hbar} \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots \quad (4.104)$$

På tilsvarende vis finner vi (vis dette!) at

$$B = \sqrt{\frac{1}{a}}, \quad (4.105)$$

slik at sinus-løsningen er gitt ved

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(x \frac{n\pi}{2a}\right) e^{-iE_n t/\hbar} \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots \quad (4.106)$$

Sjøl om vi kun har tatt for oss et idealisert potensial, med liten rot i den virkelige verden, så utviser dette eksemplet en del viktige egenskaper ved et kvantemekanisk system som dere bør legge merke til.

- Vi finner en tilstand med lavest energi, gitt ved $n = 1$

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}. \quad (4.107)$$

Denne tilstanden kalles grunntilstanden. Klassisk er tilstanden med lavest energi gitt når partikkelen er i ro. Det svarer til at både bevegelsesmengden p og potensialet V er lik null, som igjen betyr at grunntilstandsenergien utifra et klassisk bide er lik null. Det faktum at denne energien ikke er null kvantemekanisk skyldes at vi har alltid en uskarphet i posisjon og bevegelsesmengde.

Vi kan vise dette dersom vi antar at vi kjenner x med en uskarphet $\Delta x \approx 2a$, utstrekningen av potensialet. Vi kjenner også bevegelsesmengden til den tilstanden som har lavest energi. For $n = 1$ har vi

$$p_1 = \pm \sqrt{2mE_1} = \pm \frac{\hbar\pi}{2a}. \quad (4.108)$$

Siden partikkelen kan ha både negativ og positiv bevegelsesmengde har vi at

$$\Delta p \approx 2|p_1| = \frac{\hbar\pi}{a}, \quad (4.109)$$

som innsatt i Heisenbergs uskarphetsrelasjon gir

$$\Delta p \Delta x \approx \frac{\hbar \pi}{a} 2a = 2\pi \hbar = h, \quad (4.110)$$

på en konstant nær $\hbar/2$.

- At det finnes en slik null-punkts energi (laveste energi) og null-punkts bevegelsesmengde, er i strid med klassisk fysikk, hvor all bevegelse opphører ved null temperatur. Denne null-punkts energien er ansvarlig for flere interessante kvantefenomener. Et slående eksempel er flytende helium, som forblir flytende helt ned til oppnåelige temperatur i labben, $\sim 0.001\text{K}$. Kun dersom et stort trykk anvendes vil en overgang til fast stoff forekomme. Som en digresjon, tenk bare på at den kosmiske bakgrunnsstrålingen er på 3 K. Vi er altså i stand til skape temperaturer som aldri har eksistert i universet!
- Legg også merke til at energien er bestemt av dimensjonene til systemet, dvs. massen til partikkelen og utstrekningen av potensialet. Kun to parametre som dikterer fysikken!
- Selv om dette systemet er fjernt fra virkeligheten, kan vi ha fysiske situasjoner som likner på en uendelig potensialbrønn. Mer om dette senere.

De løsningene som vi fant fram til er ortogonale, dvs. at

$$\int \psi_{n'}^* \psi_n dx = \delta_{n',n}, \quad (4.111)$$

hvis $\psi_{n'}$ og ψ_n hører til to forskjellige egenverdier $E_{n'}$ og E_n .

4.5 Endelig bokspotensial

Vårt neste eksempel er et endelig bokspotensial. Her skal vi studere en partikkel som beveger seg langs x -aksen i et potensial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x > a \\ -V_0 & 0 < x \leq a \\ \infty & x \leq 0 \end{cases}, \quad (4.112)$$

vist i Figur 4.2.

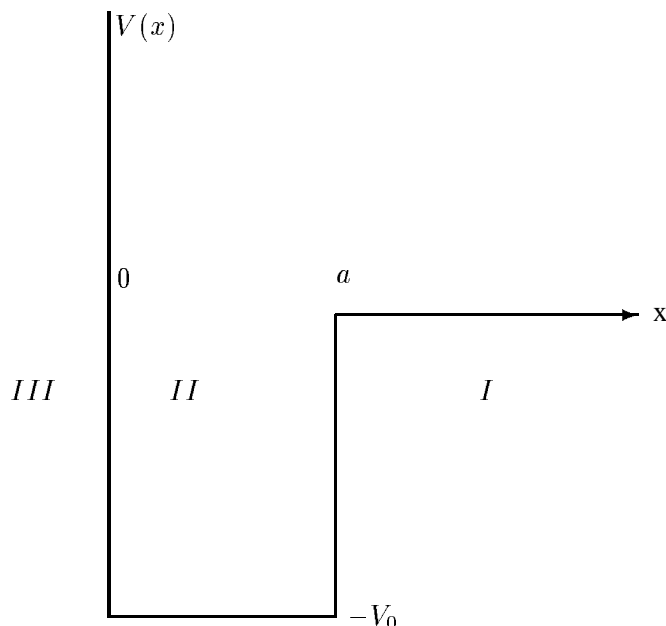
Først litt notasjon. Vi kaller området på x -aksen der $x > a$ for område I, området der $0 < x \leq a$ for II, og området der $x \leq 0$ for III. Bølgefunksjonen i de tre områdene kalles henholdsvis ψ_I , ψ_{II} og ψ_{III} . For å bestemme løsningene trenger vi altså de generelle krav vi har til en fysisk akseptabel bølgefunksjon. Disse kan formuleres slik i den 1D-dimensjonale utgaven:

1. $\psi(x)$ må være kontinuerlig.
2. $\psi(x)$ må være normaliserbar, dvs vi må kunne finne en konstant C_N slik at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (C_N \psi(x))^* (C_N \psi(x)) dx = 1, \quad (4.113)$$

når fysikken i problemet er slik at systemet er begrenset i rommet.

3. $\frac{d}{dx} \psi(x) = \psi'(x)$ må være kontinuerlig når potensialet $V(x)$ er endelig.



Figur 4.2: Eksempel på et endelig kassepotensial med verdi $-V_0$ i området $0 < x \leq a$, uendelig for $x \leq 0$ og null ellers.

Vi skal se på tilfellet der partikkelen har negativ energi, $E < 0$. I klassisk fysikk betyr dette at partikkelen ikke kan befinne seg i område I, der $V(x) = 0$. Dette ser vi med en energibetraktning: Partikkelens energi er summen av kinetisk og potensiell energi:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (4.114)$$

og dersom partikkelen er i område I vil bare det kinetiske leddet bidra:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (4.115)$$

Men dersom $E < 0$ er dette ikke mulig, det ville i så fall bety at partikkelen hadde imaginær bevegelsesmengde p . Klassisk er derfor område I et forbudt område for partikkelen. Vi skal se at kvantemekanisk kan partikkelen allikevel ha en viss sannsynlighet for å befinne seg i dette området.

Vi ser først på situasjonen i område I:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) = E \psi_I(x) = -|E| \psi_I(x), \quad (4.116)$$

der den siste likheten gjelder fordi $E < 0$. Denne likningen skrives så som

$$\psi_I''(x) = \beta^2 \psi_I(x) \quad (4.117)$$

der $\beta^2 = 2m|E|/\hbar^2 > 0$. Denne 2. ordens differensiallikningen har som generell løsning

$$\psi_I(x) = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x} \quad (4.118)$$

der A og B er integrasjonskonstanter. Vi ser at leddet $Ae^{\beta x}$ vokser over alle grenser når $x \rightarrow \infty$. Vi har et generelt krav om at bølgefunksjonen skal være begrenset, slik at dersom dette leddet er med i bølgefunksjonen betyr det at sannsynligheten for å finne partikkelen uendelig langt ute i det klassisk forbudte området er uendelig stor! Dette er u fysikalsk og uakseptabelt. Vi må forlange at dette leddet ikke er med i bølgefunksjonen, dvs. $A = 0$. Konklusjon:

$$\psi_I(x) = Be^{-\beta x}. \quad (4.119)$$

Schrödingers likning i område II er:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) - V_0 \psi_{II}(x) = -|E| \psi_{II}(x) \quad (4.120)$$

som vi skriver som

$$\psi_{II}''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) \psi_{II}(x) = -k^2 \psi_{II}(x), \quad (4.121)$$

der $k^2 = 2m(V_0 - |E|)/\hbar^2$. Vi har at $k^2 > 0$ siden $V_0 > |E|$. At det siste er tilfellet kan vi se ved en klassisk energibetraktning: I område II har partikkelen energi

$$E = \frac{p^2}{2m} - V_0. \quad (4.122)$$

Bidraget fra kinetisk energi, $p^2/2m \geq 0$, slik at

$$E \geq -V_0. \quad (4.123)$$

Siden $E = -|E| < 0$ medfører dette at

$$V_0 - |E| \geq 0. \quad (4.124)$$

Dette gjelder også kvantemekanisk.

Differensiallikningen vår har da som generell løsning

$$\psi_{II}(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (4.125)$$

der C og D er integrasjonskonstanter.

La oss så se på område III. Her er $V(x) = +\infty$ overalt. Som diskutert i forrige avsnitt svarer det til

$$\psi_{III}(x) \equiv 0 \quad (4.126)$$

for alle $x \leq 0$.

I følge krav 1 til bølgefunksjonen må ψ være kontinuerlig i $x = 0$. Det betyr at

$$\psi_{II}(0) = \psi_{III}(0) = 0 \quad (4.127)$$

og dermed må $D = 0$. Dermed er løsningen i område II gitt ved

$$\psi_{II}(x) = C \sin(kx). \quad (4.128)$$

Siden $V(x)$ er uendelig for $x \leq 0$ kan vi ikke kreve at ψ skal være kontinuerlig deriverbar i $x = 0$.

I punktet $x = a$ har potensialet en *endelig* diskontinuitet. Der må både krav 1 og 3 til bølgefunksjonen være oppfylt:

$$\begin{aligned} \psi_I(a) &= \psi_{II}(a) \\ \psi_I'(a) &= \psi_{II}'(a), \end{aligned}$$

som gir

$$Be^{-\beta a} = -C \sin(ka) \quad (4.129)$$

$$-\beta Be^{-\beta a} = kC \cos(ka) \quad (4.130)$$

Vi kan finne konstantene B og C vha. likningene (4.130) og (4.129), dvs.

$$B = -C \sin(ka) e^{\beta a}, \quad (4.131)$$

som innsatt i likning (4.130) gir

$$k \cot(ka) = -\beta. \quad (4.132)$$

Denne likningen bestemmer de tillatte energiene for partikkelen. Siden $\hbar\beta = \sqrt{2m|E|}$ og $\hbar k = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}$ ser vi nemlig at den eneste ukjente størrelsen som inngår i likning (4.132) er energien E .

Nå skal vi forsøke å finne løsningene av likning (4.132). Denne likningen er dessverre en såkalt transcendent likning, i praksis betyr det at vi må finne løsningene numerisk eller grafisk. Det er det siste vi skal forsøke her. Men først skriver vi den om litt. Vi multipliserer først begge sider med a slik at

$$ka \cot(ka) = -\beta a. \quad (4.133)$$

La oss videre innføre $\eta = ka$. Nå ser vi at

$$\eta^2 = (ka)^2 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} - \frac{2ma^2|E|}{\hbar^2} = \alpha - (\beta a)^2, \quad (4.134)$$

der $\alpha = 2ma^2V_0/\hbar^2$, og dermed

$$(\beta a)^2 = \alpha - \eta^2. \quad (4.135)$$

Likningen kan derfor skrives

$$\eta \cot \eta = \eta \frac{\cos \eta}{\sin \eta} = -\sqrt{\alpha - \eta^2}. \quad (4.136)$$

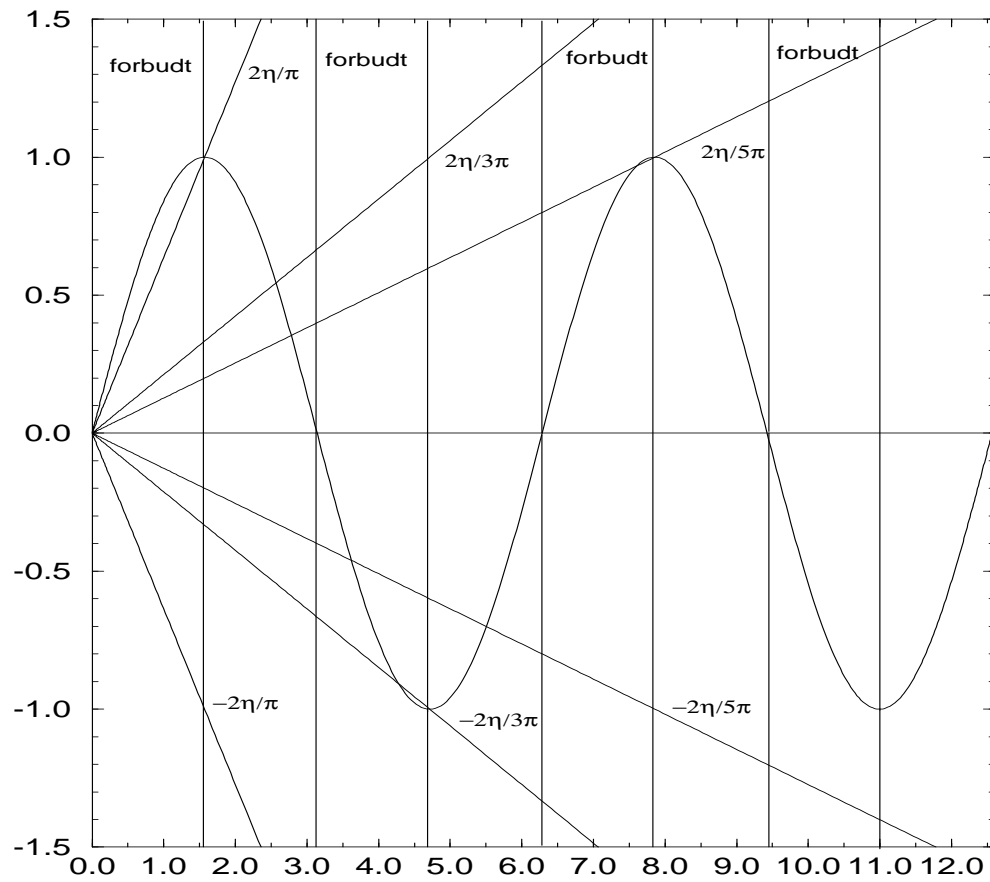
Vi kvadrerer begge sider og utnytter at $\cos^2 \eta = 1 - \sin^2 \eta$. Det gir

$$\begin{aligned} \eta^2 - \eta^2 \sin^2 \eta &= \alpha \sin^2 \eta - \eta^2 \sin^2 \eta \\ \sin^2 \eta &= \frac{\eta^2}{\alpha} \\ \sin \eta &= \pm \frac{\eta}{\sqrt{\alpha}} = \pm K\eta, \end{aligned} \quad (4.137)$$

der vi har definert $K = 1/\sqrt{\alpha}$. Når vi kvadrerer en likning risikerer vi imidlertid at vi får med oss falske løsninger. Vi må gå tilbake til den opprinnelige likningen (4.136) for å se hva slags løsninger vi kan godta. Siden $\eta = ka > 0$ ser vi at vi må ha $\cos \eta / \sin \eta < 0$ for at likningen skal være oppfylt. Det betyr at $\cos \eta$ og $\sin \eta$ må ha motsatt fortegn. Dette skjer når η ligger i intervallene $[\pi/2, \pi], [3\pi/2, 2\pi], [5\pi/2, 3\pi]$ osv. I Figur 4.3 er funksjonene $f(\eta) = \sin \eta$, $g^+(\eta) = C\eta$ og $g^-(\eta) = -C\eta$ skissert for forskjellige verdier av C . Energieigenverdiene er gitt som skjæringspunktene mellom f og g^\pm , forutsatt at de ligger innenfor de tillatte intervallene for η . Vi ser at antall egenverdier varierer med C , når C avtar, som svarer til å øke styrken på V_0 , får vi flere løsninger. Vi skal også bestemme verdien av C som gir (minst) én bundet tilstand. Den minste η -verdien som er en akseptabel løsning av likningen er $\eta = \pi/2$. I dette punktet er $\sin \eta = 1$. Linjen som går gjennom origo og skjærer f i punktet $(\pi/2, 1)$ har likning

$$g^+(\eta) = \frac{2}{\pi}\eta, \quad (4.138)$$

2



Figur 4.3: Grafisk løsning av likning (4.137).

som altså svarer til $C = 2/\pi$. Vi ser av figuren at dersom $C > 2/\pi$ vil vi ikke ha noen løsning, mens vi for $C \leq 2/\pi$ alltid har minst én løsning. $C = 2/\pi$ svarer til, siden $C = 1/\sqrt{\alpha}$ og $\alpha = 2ma^2V_0/\hbar^2$,

$$V_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}. \quad (4.139)$$

Dersom V_0 er større enn denne verdien har vi minst én bundet tilstand, hvis V_0 er mindre har vi ingen.

I grensen $V_0 \rightarrow \infty$ vil likningen for egenverdiene bli

$$\sin \eta = 0 \quad (4.140)$$

som gir

$$\eta = ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.141)$$

som løsninger. Så

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|) = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \quad (4.142)$$

som gir (husk at $E = -|E|$)

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2} - V_0. \quad (4.143)$$

Ved å definere nullpunkt for energien i $-V_0$ kan vi sette $E' = E + V_0$, og ved så å la $V_0 \rightarrow \infty$ ser vi at den fysiske situasjon er nøyaktig den samme som for en partikkel i en uendelig potensialbrønn med lengde a , og energiegenverdiene er

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.144)$$

slik de bør være. Legg merke til at i dette tilfellet er potensialets utstrekning gitt ved a , mens for uendelig potensial brukte vi en utstrekning gitt ved $2a$. Setter vi inn denne utstrekningen i uttrykket for energien i likning (4.97), finner vi at

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

4.6 Deuterium og endelig bokspotensial

Nå kan vi prøve oss på en anvendelse av resultatene fra den endelige potensialbrønnen på et virkelig fysisk system. Vi skal selvsagt foreta en del forenklinger, men resultatet vårt kommer ikke til å være så fjernt fra eksperimentelle størrelser. I tillegg, skal vi prøve oss på en numerisk løsning vha. Maple.

Systemet vi skal ta for oss er deuterium⁷, som består av et proton og et nøytron. Deuterium har en bindingsenergi på -2.2 MeV, dvs. at protonet og nøytronet holder sammen pga. tiltrekningen fra de sterke kjernekraftene (ikke Coulomb, siden nøytronet har null ladning).

Det første vi skal gjøre er å forenkle vekselvirkningen mellom et proton og et nøytron til å være gitt ved et kassepotensial som vist i Figur 4.2. Variabelen x er nå avstanden mellom protonet og nøytronet. Vi har dermed valgt et massesenter mellom protonet og nøytronet, slik at x er nå den relative avstanden mellom protonet og nøytronet. Merk at vi fremdeles betrakter dette problemet som et en-dimensjonalt problem.

Den reduserte massen blir

$$\mu = \frac{m_p m_n}{m_n + m_p}, \quad (4.145)$$

⁷Utfyllende lesning finner dere i kap 14.8, sidene 705-710.

hvor m_n er massen til nøytronet og m_p er massen til protonet. Her skal vi neglisjere den lille masseforskjellen som finnes mellom protonet og nøytronet og sette $m = m_n = m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$. Det gir en redusert masse

$$\mu = \frac{m}{2}. \quad (4.146)$$

Siden vi nå bruker den reduserte massen og den relative avstanden x , blir den en-dimensjonal tidsuavhengige Schrödingers likning gitt ved

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V_0 \psi(x) = -|E| \psi(x), \quad (4.147)$$

i område II fra Figur 4.2. Bruker vi så resultatene fra likning (4.132)

$$k \cot(ka) + \beta = 0$$

hvor $\hbar\beta = \sqrt{m|E|}$ og $\hbar k = \sqrt{m(V_0 - |E|)}$, har vi en transcendent likning til bestemmelsen av E , med gitt V_0 og utstrekning a .

Før vi prøver oss på en grafisk og numerisk løsning, stiller vi oss spørsmålet hva er den minste verdien V_0 kan ha for at vi ihvertfall skal ha en bunden tilstand? Da må $E \leq 0$. Setter vi $E = 0$ finner vi den minste verdien. Det gir da

$$k \cot(ka) = -\beta = -\frac{\sqrt{m|E|}}{\hbar} = 0, \quad (4.148)$$

som resulterer i

$$k \cot(ka) = \frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar} \cot\left(\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar} a\right) = 0, \quad (4.149)$$

eller

$$\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar} a = \frac{\pi}{2}, \quad (4.150)$$

som gir

$$V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{4ma^2}, \quad (4.151)$$

et uttrykk som likner mistenkelig på likning (4.97)! Setter vi inn $mc^2 = 938 \text{ MeV}$ og $\hbar c = 197 \text{ MeVfm}$ finner vi

$$V_0 = \frac{102}{a^2} \text{ MeV}. \quad (4.152)$$

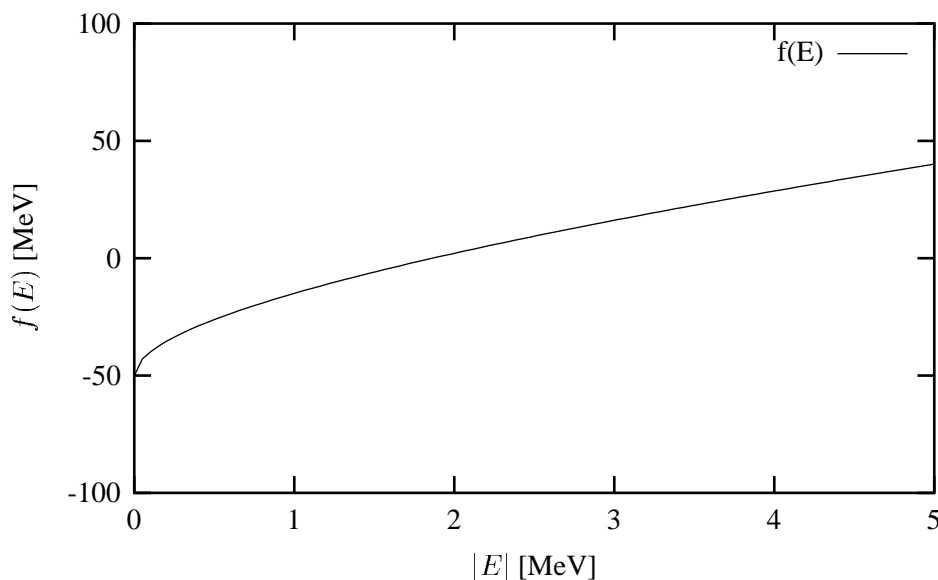
Udstrekningen til den sterke vekselvirkningen mellom protoner og nøytroner er på noen få femtometer. Velger vi $a = 1.6 \text{ fm}$, finner vi $V_0 = 40 \text{ MeV}$. Vi er i riktig område utifra eksperiment for styrken til vekselvirkningen. Dersom vi vil ha en bunden tilstand på -2.2 MeV må V_0 være større enn 40 MeV .

La oss nå velge $V_0 = 52 \text{ MeV}$ og $a = 1.6 \text{ fm}$ og prøve å løse den transcendente likning $k \cot(ka) - \beta = 0$. Vi definerer altså en funksjon

$$f(E) = \frac{\sqrt{m(V_0 - |E|)}}{\hbar} \cot\left(\frac{\sqrt{m(V_0 - |E|)}}{\hbar} a\right) - \frac{\sqrt{m|E|}}{\hbar}, \quad (4.153)$$

og spør hvor denne funksjonen skjærer E -aksen. Der den skjærer E -aksen har vi løsninga. Figuren nedenfor viser et plott av denne funksjonen for de valgte verdiene av V_0 og a .

Utifra figuren tipper vi at vårt valg av verdier gir en løsning når $|E| \sim 2$, som ikke er så værst når vi tenker at den eksperimentelle verdien er $|E| = 2.2 \text{ MeV}$. Verdiene vi har valgt for V_0 og a er også nær det eksperiment forteller oss. Alt i alt kan vi si at dette forenklete potensialet, som kan sees på som en



Figur 4.4: Grafisk løsning av likning (4.153).

første approksimasjon til den virkelige vekselvirkningen, gir resultat med riktig størrelsesorden med kun to parametre, verdien på potensialet og dets utstrekning.

Den grafiske løsningen gir oss kun en pekepinn på størrelsen til E . Ønsker vi et mer presist svar må vi ty til numerisk innsats. Det finnes et vell av metoder for å finne nullpunktet av

$$f(E) = \frac{\sqrt{m(V_0 - |E|)}}{\hbar} \cot\left(\frac{\sqrt{m(V_0 - |E|)}}{\hbar} a\right) - \frac{\sqrt{m|E|}}{\hbar} = 0$$

4.6.1 Eksempel på løsning for harmonisk oscillator vha. Maple

Dersom vi ønsker å bruke Maple på sitt enkleste vis, holder det med å definere funksjonen $f(E)$ med sine variable og løse den ovennevnte likning vha. Maple funksjonen **fsolve**. Men, Maple tillater oss også å definere egne algoritmer vha. prosedyre utsagnet **proc**. I et slikt tilfelle må vi velge en bestemt numerisk metode for søking etter nullpunkter. Vi velger Newtons metode og lager en prosedyre i Maple. Newtons metode kan beskrives som følger

- Vi finner først et punkt på E-aksen som vi antar er nær løsningen, jfr. den grafiske løsningen ovenfor.
- Vi finner krumningen til kurven i dette punktet.
- Vi trekker tangenten ved dette punktet og ser hvor tangenten treffer E-aksen. Det sistnevnte gir oss en ny E verdi som er nærmere løsningen. Det nye punktet E_1 kan vi så bruke til å bestemme et nytt punkt.
- Slik kan en fortsette til en finner den numeriske verdien for E hvor den ovennevnte likning blir null.

- Matematisk kan vi uttrykke denne iterasjons prosessen som

$$E_{i+1} = E_i - \frac{f(E_i)}{f'(E_i)},$$

hvor f er selve funksjonen.

I Maple kan vi skrive dette som

```
> MakeIteration:= proc(expr::algebraic, x::name)
> local iteration;
> iteration:=x-expr/diff(expr,x);
> unapply(iteration, x);
```

Uttrykket *expr* er selve funksjonen vår

```
> expr:=f(x);
```

hvor en må definere først selve funksjonen $f(x)$ i Maple. Det er ikke gjort her.

```
> Newton:=MakeIteration(expr, xi);
```

Fra grafen finner vi en startverdi for iterasjonen *guess*

```
> guess:=1.5;
```

guess := 1.5

```
> to 3. do guess:=Newton(guess); od;
```

Dette Maple programmet gir oss en bindingsenergi på $|E| = 1.9$ MeV, som er nær den eksperimentelle energiverdien for grunntilstanden til deuterium. Vi kan selvsagt finjustere V_0 til vi treffer akkurat den eksperimentelle verdien. Men en skal ikke tøyse dette enkle potensialet for langt.

4.6.2 Eksempel på løsning for harmonisk oscillator vha. Matlab

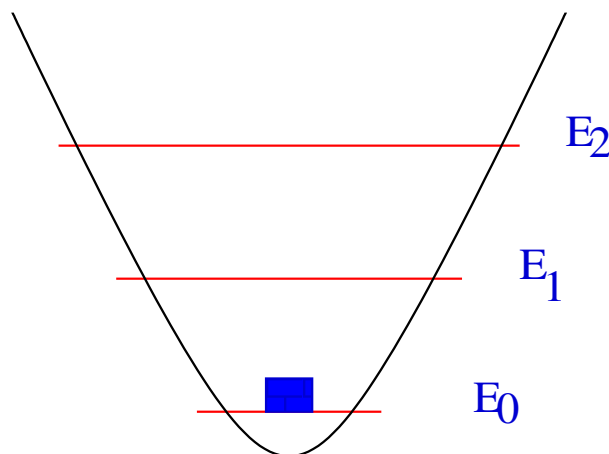
I Matlab kan vi bruke funksjonen **fzero** som nullpunkt til en funksjon med en variabel. Eksemplet her viser hvordan dette kan kodes i Matlab. Vi har valgt en prototyp funksjon

$$x \cot(x) + \sqrt{x} = 0,$$

$$k \cot(ka) + \beta = 0.$$

Lag deretter en Matlab **M**-fil som ser slik ut

```
%% Funksjonen cotx
%% funksjoner inn i samme fil)
function f = cotx
% Finn null nær denne verdien
omtrentnull = 2.;
% @cotx betyr at matlab skal finne funksjonen med navnet cosx
f = fzero(@cotx,omtrentnull);
%% Funksjonen vi skal finne nullpunktet til
function y = cotx
y = x*cotx(x)+sqrt(x);
```



Figur 4.5: Skisse av et harmonisk oscillator potential med tilhørende egenverdier.

4.7 Harmonisk oscillator potensial

Et potensial som ofte anvendes i fysikk er den harmoniske oscillator. I kvantemekanikk finnes det flere fagfelt hvor dette potensialet inngår som en god første approksimasjon, fra kjernefysikk til modeller for vibrerende molekyler. Utviklingen i ionefelle innfangningsteknikker har også gitt en renessanse for den harmoniske oscillator. Slike teknikker resulterte bla. i Nobel prisen i fysikk i 1989 til Hans Dehmelt, Wolfgang Paul og Norman Ramsey, se f.eks. tidsskriftet *Review of Modern Physics*, bind **62**, (1990) sidene 525-541⁸. Ionefeller sammen med Laserkjøling av ioner og atomer førte også til en eksperimentell realisering av Bose-Einstein kondensasjon (Nobel pris i 1995), en fase hvor alle partikler i en gass av f.eks. fortynnete Rubidium ioner befinner seg i den laveste mulige energitilstand. Vi kommer tilbake til dette i kapittel 11. Kort fortalt, kan en ionefelle bestå av elektriske felt som oscillerer med radiofrekvenser, siden et ion ikke kan fanges inn av et statisk elektrisk felt. Et eksempel er en såkalt Paul felle, etter Nobelpris vinneren Wolfgang Paul, som består av hyperbolske elektroder som setter opp et elektrisk kvadropol felt

$$\Phi(x, y) = \frac{V_0 \cos(\omega t)}{x_0^2 + y_0^2} (x^2 - 2y^2), \quad (4.154)$$

hvor x_0 og y_0 er dimensjonene på ionefellen og $V_0 \cos(\omega t)$ er det oscillerende elektriske feltet med radiofrekvens ω . Vi kan idealisere systemet vårt til en dimensjon. Feltet setter da opp et oscillator potensial

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

som en partikkel beveger seg i. I mekanikk er k den såkalte fjærkonstanten.

Innsatt i Schrödingers likning gir potensialet analytiske løsninger for energieigenfunksjoner. Sistnevnte er gitt ved en klasse funksjoner som kalles Hermite polynomer. Energien er kvantisert, på lik linje med det vi fant for en uendelig potensialbrønn.

Den tidsuavhengige Schrödingers likning blir i dette tilfellet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 \psi(x) = E \psi(x), \quad (4.155)$$

⁸Artiklene kan lastes ned fra nettstedet til det Amerikanske Fysiske selskap, www.aps.org, se <http://prola.aps.org/>

hvor $V(x) = 1/2kx^2$. Den siste likningen kan omformes som

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \left(\frac{mk}{\hbar^2} x^2 - \frac{2m}{\hbar^2} E \right) \psi(x). \quad (4.156)$$

Introduserer vi variabelen η

$$\eta^2 = \frac{\sqrt{mk}x^2}{\hbar}, \quad (4.157)$$

har vi at

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \frac{d^2}{d\eta^2}, \quad (4.158)$$

som innsatt i likning (4.156) gir

$$\frac{d^2\psi(\eta)}{d\eta^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \left(\frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \eta^2 - \frac{2m}{\hbar^2} E \right) \psi(\eta), \quad (4.159)$$

eller

$$\frac{d^2\psi(\eta)}{d\eta^2} = \left(\eta^2 - \frac{2\sqrt{m}}{\sqrt{k}\hbar} E \right) \psi(\eta). \quad (4.160)$$

Nå kan vi velge å definere en størrelse λ gitt ved

$$\lambda = E \frac{2\sqrt{m}}{\sqrt{k}\hbar}, \quad (4.161)$$

og omskrive Schrödingers likning for den harmoniske oscillator som

$$\frac{d^2\psi(\eta)}{d\eta^2} = (\eta^2 - \lambda) \psi(\eta). \quad (4.162)$$

Her skal vi prøve å anskueliggjøre selve løsningen ved å se først på grensen $\eta \rightarrow \infty$. Antas

$$\eta \gg \lambda, \quad (4.163)$$

kan vi skrive Schrödingers likning som

$$\frac{d^2\psi(\eta)}{d\eta^2} = \eta^2 \psi(\eta). \quad (4.164)$$

Dette er en differensiallikning hvis løsning er på formen

$$\psi(\eta) \approx e^{-\eta^2/2}, \quad (4.165)$$

som kan sees ved innsetting da

$$\frac{d\psi(\eta)}{d\eta} = -\eta e^{-\eta^2/2}, \quad (4.166)$$

og

$$\frac{d^2\psi(\eta)}{d\eta^2} = -e^{-\eta^2/2} + \eta^2 e^{-\eta^2/2} \approx \eta^2 e^{-\eta^2/2} = \eta^2 \psi(\eta), \quad (4.167)$$

når $\eta \rightarrow \infty$. Dvs. vi har

$$\psi(\eta)_{\eta \rightarrow \infty} \rightarrow \eta^2 e^{-\eta^2/2}. \quad (4.168)$$

Denne framgangsmåten tjener den hensikt at den viser oss at bølgefunksjonen ihvertfall bør ha en oppførsel slik som vist i siste i likning. mer generelt kan vi da anta at den fullstendige løsningen kan skrives som

$$\psi(\eta) = H(\eta)e^{-\eta^2/2}. \quad (4.169)$$

Vi kan finne løsningene for $H(\eta)$ på følgende vis

$$\frac{d\psi(\eta)}{d\eta} = \frac{dH(\eta)}{d\eta}e^{-\eta^2/2} - H(\eta)\eta e^{-\eta^2/2}, \quad (4.170)$$

og

$$\frac{d^2\psi(\eta)}{d\eta^2} = \frac{d^2H(\eta)}{d\eta^2}e^{-\eta^2/2} - H(\eta)\eta e^{-\eta^2/2} - 2\eta \frac{dH(\eta)}{d\eta}e^{-\eta^2/2} + H(\eta)\eta^2 e^{-\eta^2/2}. \quad (4.171)$$

Setter vi det siste leddet inn i den modifiserte Schrödingers likning gitt i likning (4.159), finner vi

$$\frac{d^2H(\eta)}{d\eta^2} - 2\eta \frac{dH(\eta)}{d\eta} + (\lambda - 1)H(\eta) = 0. \quad (4.172)$$

Denne differensiallikningen har som løsning de såkalte Hermite polynomene, hvis formelle løsning står på sidene 246-249 i tekstboka(kun orienteringsstoff). Vi ser straks at en løsning er gitt dersom $H(\eta)$ er uavhengig av η , da blir de to leddene med de deriverte lik null, og vi sitter igjen med

$$\lambda = 1. \quad (4.173)$$

Bølgefunksjonen for dette tilfellet er

$$\psi(\eta) = H(\eta)e^{-\eta^2/2} = Ce^{-\eta^2/2}, \quad (4.174)$$

hvor C er en konstant vi kan bestemme fra normeringsbetingelsen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\psi(x))^*(\psi(x))dx = 1. \quad (4.175)$$

I vårt tilfelle trenger vi altså å rekne ut

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C^2 e^{-\eta^2} d\eta \int_{-\infty}^{+\infty} C^2 e^{-\frac{\sqrt{m}kx^2}{\hbar}} dx = 1, \quad (4.176)$$

som gir

$$C^2 = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{mk}}, \quad (4.177)$$

slik at egenfunksjonen blir

$$\psi(x) = \left(\sqrt{\frac{\pi\hbar}{mk}}\right)^{1/2} e^{-\frac{\sqrt{m}kx^2}{2\hbar}}, \quad (4.178)$$

med en energi E

$$\lambda = 1 = E\sqrt{\frac{m}{k}}\frac{2}{\hbar}, \quad (4.179)$$

dvs.

$$E = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (4.180)$$

Dette skal svare til energien til grunntilstanden. Det er vanlig å definere energien vha. frekvensen ω gitt ved

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (4.181)$$

slik at energien blir

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega. \quad (4.182)$$

Likning (4.172) er differensiallikningen for de såkalte Hermite polynomene, som er polynom av like eller odde potenser i η og dermed x . Polynomene har et endelig antall ledd. Et eksempel har vi allerede sett, nemlig $H_0(\eta)$. Denne er gitt ved

$$H_0(\eta) = 1. \quad (4.183)$$

Flere eksempler er

$$H_1(\eta) = 2\eta, \quad (4.184)$$

$$H_2(\eta) = 4\eta^2 - 2, \quad (4.185)$$

osv. Hvert polynom $H_n(\eta)$, gir opphav til en egenverdi, gitt ved

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (4.186)$$

Den totale egenfunksjonen er gitt ved, for $n = 0, 1, 2$, ved

$$\psi_0(\eta) = C_0 e^{-\eta^2/2}, \quad (4.187)$$

$$\psi_1(\eta) = C_1 2\eta e^{-\eta^2/2}, \quad (4.188)$$

$$\psi_2(\eta) = C_2 (4\eta^2 - 2) e^{-\eta^2/2}, \quad (4.189)$$

hvor $C_{0,1,2}$ er normeringskonstanter. Vi legger merke til at for odde n er egenfunksjonen antisymmetrisk om $\eta = 0$, dvs.

$$\psi_{n=\text{oddetall}}(-\eta) = -\psi_{n=\text{oddetall}}(\eta), \quad (4.190)$$

mens for like tall har vi en symmetrisk egenfunksjon og dermed bølgefunksjon

$$\psi_{n=\text{liketall}}(-\eta) = \psi_{n=\text{liketall}}(\eta). \quad (4.191)$$

For eksiterte tilstander ser vi også at egenfunksjonen utviser et antall noder som svarer til kvantetallet n . Dette sees fra Figur 4.6.

Bruker vi den eksakte energien, kan vi dermed sette opp den eksakte bølgefunksjonen. For de samme tilstandene har vi

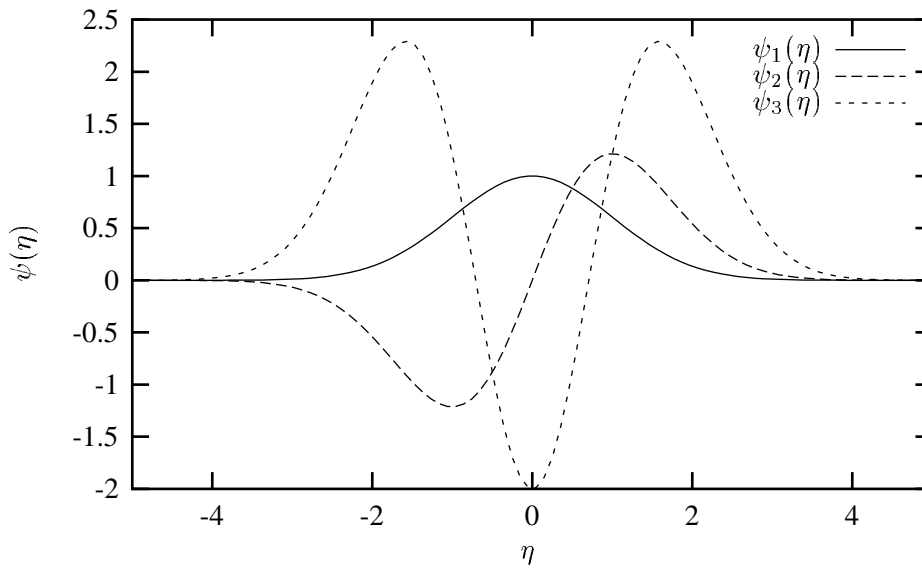
$$\Psi_0(\eta, t) = C_0 e^{-\eta^2/2} e^{-it\omega\frac{1}{2}}, \quad (4.192)$$

$$\Psi_1(\eta, t) = C_1 2\eta e^{-\eta^2/2} e^{-it\omega\frac{3}{2}}, \quad (4.193)$$

og

$$\Psi_2(\eta, t) = C_2 (4\eta^2 - 2) e^{-\eta^2/2} e^{-it\omega\frac{5}{2}}, \quad (4.194)$$

hvor $C_{0,1,2}$ igjen er normeringskonstanter.



Figur 4.6: Plott av egenfunksjonene (unormerte) for en harmonisk oscillator som funksjon av η .

4.7.1 Eksempel på løsning for harmonisk oscillator vha. Maple

Her skal vi ta for oss hvordan vi kan finne bølgefunksjonen for et harmonisk oscillator potensial med gitt energi. Først skal vi forenkle Schrödingers likning ved å sette $\hbar = 1$ (energien blir da uttrykt i enheter av \hbar) og velge $m = k = 1$ slik at likningen tar forma

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} - x^2\psi_n(x) + E_n\psi_n(x), \quad (4.195)$$

hvor energien nå er gitt ved

$$E_n = 2(n + \frac{1}{2}),$$

istedet for $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

Potensialet vårt er symmetrisk, dvs. $V(x) = V(-x)$ men bølgefunksjonene kan være enten symmetriske eller antisymmetriske. Ved origo utviser disse bølgefunksjonene ulike egenskaper. For en symmetrisk bølgefunksjon har vi

$$\psi(0) = \text{konstant} \neq 0, \quad \frac{d\psi}{dx}|_{x=0} = 0,$$

mens en antisymmetrisk bølgefunksjon er gitt ved

$$\psi(0) = 0, \quad \frac{d\psi}{dx}|_{x=0} = \text{konstant} \neq 0.$$

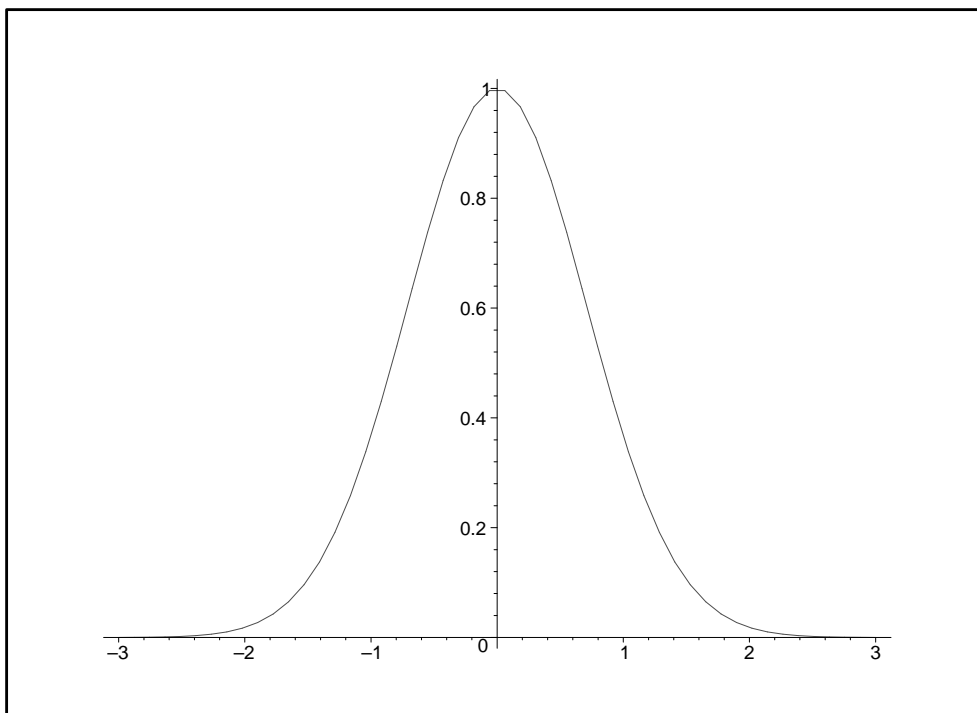
Vi kan velge konstanten lik 1 og deretter normalisere bølgefunksjonen vår.

Her skal vi vise hvordan vi kan finne ψ med en gitt egenverdi E_n vha. Maple.

Som eksempel velger vi her grunntilstanden som i dette tilfellet har energien $E_0 = 1$. Vi kan da skrive Schrödingers likning på følgende vis

```
> SE:=diff(psi(x),x$2)-x^2*psi(x)+psi(x)=0;
```

der vi har brukt kommandoen **diff** for å definere den deriverte.



Figur 4.7: Sannsynlighetsfordeling for grunntilstanden til en harmonisk oscillator.

$$SE := \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \right) - x^2 \psi(x) + \psi(x) = 0$$

Siden grunntilstanden er symmetrisk om origo, definerer vi

```
> icsym:=psi(0)=1,D(psi)(0)=0;
```

$$icsym := \psi(0) = 1, D(\psi)(0) = 0$$

Når vi deretter skal løse difflikningen numerisk, bruker vi Maple kommandoen **dsolve**, med **numeric** som opsjon, samt at vi legger til føringene på egenfunksjonen ved $x = 0$.

```
> solveSe:=dsolve({subs(SE),icsym },psi(x),numeric);
```

Maple bruker Runge-Kutta metoden til å løse denne difflikningen, som en kan se fra den neste outputlinje fra Maple.

```
solveSe := proc(rkf45_x) ... end
```

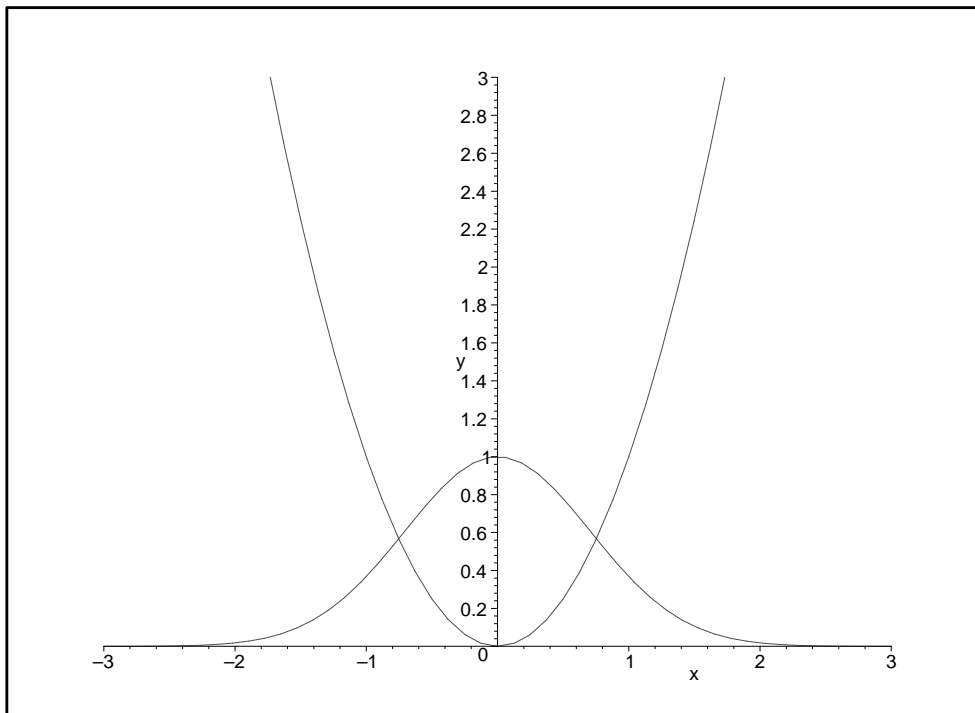
Vi ønsker deretter å plote egenfunksjonen vår. I dette tilfellet velger vi å plote sannsynligheten $P(x)$ uttrykt vha. $\psi(x)^2$. Koplingen mellom en numerisk løsning og figurer i Maple kan vi lett få til vha. kommandoen **odeplot**. Her spesifiserer vi hva som skal plottes samt grenseverdiene for både x og y aksene. I eksemplet nedenfor har vi begrenset oss til x -aksen.

```
> with(plots):
```

```
> odeplot(solveSe,[x,psi(x)^2],-3..3);
```

Den første figuren viser bølgefunksjonen kvadrert for grunntilstanden.

```
> p1:=odeplot(solveSe,[x,psi(x)^2],-3..3);
```



Figur 4.8: Plott av harmonisk oscillator potensial og sannsynlighetsfordeling for grunntilstanden. Legg merke til at det finnes en viss sannsynlighet for at partikkelen kan befinne seg utenfor potensialet.

I neste figur ønsker vi også å plote potensialet sammen med sannsynligheten for å finne partikkelen i et bestemt område. Det kan vi få til vha. **display** og **plot** kommandoene i Maple.

```
> p2:=plot(x^2,x=-3..3,y=0..3);
> display(p1,p2);
```

Vi legger merke til at det er en viss sannsynlighet for å finne partikkelen utenfor potensialet! Dette er forskjellig fra det vi har sett tidligere for en klassisk harmonisk oscillator. Klassisk er det ikke mulig at partikkelen kan trenge gjennom potensialet.

4.7.2 Eksempel på løsning for harmonisk oscillator vha. Matlab

I Matlab finnes det flere funksjoner for å løse ordinære differensial likninger. Men i motsetning til Maple må vi først skrive om likningen vår som et sett med kopla første ordens differensiallikninger. Det betyr at vi definerer

$$y_1(x) = \psi_n(x), \quad (4.196)$$

og

$$\frac{dy_1}{dx} = y_2 \quad (4.197)$$

og vi kan dermed omskrive den andre ordens differensiallikningen

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} - x^2\psi_n(x) + E_n\psi_n(x) = 0,$$

som

$$\frac{dy_2(x)}{dx} - x^2 y_1(x) + \lambda y_1(x) = 0, \quad (4.198)$$

og

$$\frac{dy_1}{dx} = y_2, \quad (4.199)$$

hvor λ er den ukjente energien. Men Schrödingers likning må løses med tanke på randbetingelsene. I vårt tilfelle har vi at for en symmetrisk løsning om $x = 0$ at

$$\psi(0) = \textit{konstant} \neq 0, \quad \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0} = 0,$$

mens en antisymmetrisk bølgefunksjon er gitt ved

$$\psi(0) = 0, \quad \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0} = \textit{konstant} \neq 0.$$

Vi kan velge konstanten lik 1 og deretter normalisere bølgefunksjonen vår. I tillegg må bølgefunksjonen gå mot null i grensa $x \rightarrow \pm\infty$.

Matlab tillatter oss å løse denne type problem med sine innebygde funksjoner av typen **bvp4c** som løser såkalte topunkts randbetingelseproblemer for ordinære differensiallikninger. Denne funksjonen har to viktige hjelpefunksjoner hvor blant annet **bvpinit** er svært viktig da den tillater oss å gi gjetninger på egenverdier og form på løsning. Funksjonen **deval** gir oss muligheten til å evaluere den numeriske løsningen fra **bvp4c**. Eksemplet nedenfor viser hvordan vi kan løse likningsettet vårt med Matlab.

```
function harmonic_oscillator

% Vi velger et løsningsintervall [0, 5] med randbetingelser y'(0) = 0,
% og y(5) = 0
% Egenfunskjonen y(x) er bestemt ved en multiplikativ konstant når.
% Når vi setter y(0) = 1 er det for å velge ut den symmetriske løsningen
% om x = 0.
% Her setter vi inn den eksakte egenverdien for grunntilstanden.

lambda = 1;
solinit = bvpinit(linspace(0,5,10),@mat4init,lambda)

% BVP4C returnerer strukturen 'sol'. Den beregnede egenverdien finnes
% i feltet sol.parameters.
sol = bvp4c(@mat4ode,@mat4bc,solinit);

fprintf('Egenverdien er %7.3f.\n',sol.parameters)
% Her plotter vi egenfunskjonen
xint = linspace(0,5);
Sxint = deval(sol,xint);
figure;
plot(xint,Sxint(1,:));
axis([0 5 -2 2.1]);
title('Egenfunskjon for Harmonisk oscillator');
```

```

xlabel('x');
ylabel('Løsning y');

%difflikningen
function dydx = mat4ode(x,y,lambda)

dydx = [
            y(2)
      (x*x-lambda)*y(1) ];

% randbetingelser, ya(2) betyr y_2(0) = 0, yb(1) betyr y_1(5)=0
% og ya(1)-1 betyr y_1(0)-1=0
function res = mat4bc(ya,yb,lambda)
res = [ ya(2)
        yb(1)
        ya(1)-1];

% prøveform for løsningen og dens deriverte
function yinit = mat4init(x)
yinit = [ exp(-x*x)
          -2.*x*exp(-x*x)];

```

4.7.3 Viktig lærdom

For en partikkel i en potensialbrønn med uendelig potensial, så vi at energien er kvantisert og at energien er bestemt av utstrekningen av potensialet samt partikkelens masse.

Et harmonisk oscillator potensial, i tillegg til å være et meget populært potensial for modellering av fysiske systemer, utviser også kvantisering av energien, samt at energien er bestemt av massen til partikkelen og potensialkonstanten k . Et harmonisk oscillator potensial har en uendelighet av diskrete tilstander, på lik linje med en uendelig potensialbrønn. Men, det nye her er at det finnes en viss sannsynlighet for at partikkelen kan være utenfor selve potensialet, dvs. i et område som er klassisk forbudt. Dette får store konsekvenser for kvantemekaniske systemer, som vi bla. skal studere i avsnittet om tunneling.

4.8 Tre-dimensjonalt bokspotensial

Vi skal nå studere et uendelig potensial i tre dimensjoner⁹, dvs. at potensialet tar forma

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & -a < x < +a, -a < y < +a, -a < z < +a \\ \infty & |x| \geq a, |y| \geq a, |z| \geq a \end{cases} \quad (4.200)$$

Dersom vi nå ser på den tidsuavhengige Schrödingers likning, så trenger vi å introdusere operatorer for bevegelsesmengden i x , y og z retning, dvs.

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (4.201)$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad (4.202)$$

⁹Lesehenvisning er Kap. 5-11, sidene 288-293.

n_x	n_y	n_z	Energi
1	1	1	$E_0 \times 3$
2	1	1	$E_0 \times 6$
1	2	1	$E_0 \times 6$
1	1	2	$E_0 \times 6$
2	2	1	$E_0 \times 9$
1	2	2	$E_0 \times 9$
2	1	2	$E_0 \times 9$
3	1	1	$E_0 \times 11$
1	3	1	$E_0 \times 11$
1	1	3	$E_0 \times 11$
...

Tabell 4.1: Mulige verdier for energien for den tre-dimensjonale potensialbrønnen som funksjon av n_x , n_y og n_z . I tabellen har vi definert $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 8ma^2$.

og

$$\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.203)$$

I tillegg har vi at

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, \quad (4.204)$$

slik at vi kan skrive den tidsuavhengige Schrödingers likning på følgende operatorform

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (4.205)$$

og vi har antatt at potensialet er uavhengig av tiden t . Setter vi inn bølgefunksjonen har vi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t}. \quad (4.206)$$

Denne likningen kan vi omskrive som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t}, \quad (4.207)$$

og siden potensialet er uavhengig av tiden t kan vi anta at bølgefunksjonen er separabel i tid

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-iEt/\hbar}. \quad (4.208)$$

Den romlige delen av Schrödingers likning reduseres dermed til en egenverdilikning i tre dimensjoner

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z), \quad (4.209)$$

I tillegg har vi at potensialet er adskilt i tre deler som funksjoner av x , y og z , som ikke avhenger av hverandre og

$$V(x, y, z) = V(x) + V(y) + V(z) = 0 \quad -a < x < +a, -a < y < +a, -a < z < +a. \quad (4.210)$$

Vi kan da prøve som løsningsansats

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z). \quad (4.211)$$

Det gir oss tre separate likninger for egenverdilikningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = E_x \psi(x), \quad (4.212)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi(y) = E_y \psi(y), \quad (4.213)$$

og

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = E_z \psi(z). \quad (4.214)$$

I avsnitt 4.4 har vi allerede løst likningen mhp. x , med løsningen

$$\psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(x \frac{n_x \pi}{2a}\right) \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots$$

og

$$\psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(x \frac{n_x \pi}{2a}\right) \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots$$

Energien er gitt ved $E_{n_x} = \pi^2 \hbar^2 n_x^2 / 8ma^2$. Tilsvarende løsning har vi for $\psi(y)$ og $\psi(z)$, slik at den totale egenfunksjonen blir

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{1}{a}} \begin{Bmatrix} \cos \\ \sin \end{Bmatrix} \left(x \frac{n_x \pi}{2a}\right) \sqrt{\frac{1}{a}} \begin{Bmatrix} \cos \\ \sin \end{Bmatrix} \left(y \frac{n_y \pi}{2a}\right) \sqrt{\frac{1}{a}} \begin{Bmatrix} \cos \\ \sin \end{Bmatrix} \left(z \frac{n_z \pi}{2a}\right), \quad (4.215)$$

med egenverdi

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad (4.216)$$

hvor n_x , n_y og n_z er heltall. Vi kan dermed lage oss en tabell over energieigenverdiene for ulike kombinasjoner av n_x , n_y og n_z .

Vi legger merke til at det finnes flere egenverdier som er like, men at egenfunksjonene er forskjellige, dvs. kombinasjonene av n_x , n_y og n_z har ulike egenfunksjoner, men resulterer i lik energi. Det kalles for degenerasjon, og gjenspeiler en underliggende symmetri til systemet. Vi skal studere dette nøyere når vi løser Schrödingers likning for et sentralsymmetrisk potensial slik som Coulomb potensialet.

4.9 Oppgaver

4.9.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 4.1

En partikkel med masse m og energi $E < 0$ beveger seg langs x -aksen i potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ -V_0 & \text{for } -a \leq x < 0 \\ +\infty & x \geq 0 \end{cases}$$

- Løs Schrödingerligningen for systemet og vis at de tilsvarende energinivåene er implisitt gitt ved ligningen $k \cot(ka) = -\beta$ hvor $\hbar\beta = \sqrt{2m|E|}$ og $\hbar k = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}$.
- Finn røttene i ligningen grafisk. (Løsningstips: Kvadrér ligningen overfor og finn et uttrykk for $\sin(ka)$. Løs denne ligningen grafisk). Anslå ut fra grafen hvor sterkt potensialet V_0 må være for å ha minst en bundet tilstand?
- Hva blir energinivåene i grensen $V_0 \rightarrow \infty$? Hvorfor tilsvarer dette nivåene til tilstandene i uendelig dypt og symmetrisk kassepotensial?

Oppgave 4.2

Vi studerer igjen en partikkel som beveger seg langs x-aksen i potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ -V_0 & \text{for } -a \leq x < 0 \\ +\infty & x \geq 0 \end{cases}$$

men antar nå at den har positiv energi, $E > 0$.

- Hvordan ser løsningen av Schrödingerligningen nå ut i de to områdene $x < -a$ og $-a \leq x < 0$?
- Finn ved utregning at av en innkommende partikkelbølge fra venstre, vil 100% bli reflektert. Hvorfor var dette å vente?
- Vis at bølgefunksjonen for $x < -a$ kan skrives som $\psi(x) = C \sin(kx + \delta)$, og uttrykk faseforskjellen δ ved energien E og spredningspotensialet V_0 .
- I motsetning til i oppgave 4.1 er ikke energien kvantisert i dette tilfellet. Hvorfor?

Oppgave 4.3

Et elektron er beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x \leq 0; \\ N \exp(-\alpha x)(1 - \exp(-\alpha x)) & \text{for } x > 0, \end{cases}$$

hvor koordinaten er x og N er en normaliseringskonstant.

- Skissé bølgefunksjonen og forklar dens fysiske innhold. Hvis den er en løsning av Schrödingerligningen for et elektron i et potensial $V(x)$, hva er formen på dette potensialet?
- Finn normaliseringskonstanten N .
- For hvilken verdi av x er det mest sannsynlig å finne elektronet?

Løsning

a) Egenskaper ved bølgefunksjonen

$$\begin{aligned}\psi(x=0) &= 0, \quad \psi(x) \longrightarrow 0 \quad \text{for } x \rightarrow +\infty \\ \frac{d}{dx}\psi(x) &= -\alpha\psi(x) + \alpha e^{-2\alpha x} = 0 \quad \text{som gir } x_{max} = \frac{\ln 2}{\alpha}\end{aligned}$$

Vi bestemmer elektronets potensielle energi ved å sette bølgefunksjonen $\psi(x)$ in i Schrödinger ligningen

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

Beregning gir

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= \frac{d}{dx} (-\alpha\psi(x) + \alpha e^{-2\alpha x}) \\ &= \alpha^2 \psi(x) - 3\alpha^2 e^{-2\alpha x}\end{aligned}$$

som innsatt i Schrödinger ligningen blir

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m} (\alpha^2 \psi(x) - 3\alpha^2 e^{-2\alpha x}) + V(x)\psi(x) &= E\psi(x) \\ \left(\frac{3\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{e^{-2\alpha x}}{\psi(x)} + V(x) \right) &= E + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}\end{aligned}$$

Høyre siden i dette uttrykket er en konstant, uavhengig av x . Da må venstre siden også være en konstant. Dette gir løsningen

$$\begin{aligned}E &= -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + E_0 \\ V(x) &= -\frac{3\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{e^{-\alpha x}}{1 - e^{-\alpha x}} + E_0\end{aligned}$$

og uten tap av generalitet kan vi velge $E_0 = 0$.

b) Normalisering

$$\begin{aligned}N^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\alpha x} (1 - e^{-\alpha x})^2 dx &= N^2 \int_0^{+\infty} (e^{-2\alpha x} - 2e^{-3\alpha x} + e^{-4\alpha x}) dx \\ &= N^2 \left(\frac{1}{2\alpha} - \frac{2}{3\alpha} + \frac{1}{4\alpha} \right) = \frac{N^2}{12\alpha} = 1\end{aligned}$$

som gir $N = 2\sqrt{3\alpha}$.

c) Sannsynlighetstettheten er gitt ved $P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$ Maksimumsverdien er beregnet i punkt a) til å være $x_{maks} = \frac{\ln 2}{\alpha}$.

d)

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_0^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = N^2 \int_0^{+\infty} x e^{-2\alpha x} (1 - e^{-\alpha x})^2 dx \\ &= N^2 \int_0^{+\infty} (x e^{-2\alpha x} - 2x e^{-3\alpha x} + x e^{-4\alpha x}) dx\end{aligned}$$

Vi løser integralene ved hjelp av formelen $u \cdot v' = (u \cdot v)' - u' \cdot v$. Dette gir

$$\int_0^{+\infty} x e^{\beta x} dx = +\frac{1}{\beta} \int_0^{+\infty} e^{-\beta x} dx = \frac{1}{\beta^2}$$

og

$$\langle x \rangle = N^2 \left(\frac{1}{4\alpha^2} - \frac{2}{4\alpha^2} + \frac{1}{16\alpha^2} \right) = \frac{13}{12\alpha}$$

Sammenlignet med resultatet i c) gir $x_{maks} = 0,693 < \langle x \rangle = 1,083$. Dett skyldes at i $\langle x \rangle$ veies store x bidrag mer enn i $P(x)$.

Oppgave 4.4

Vi skal i denne oppgaven behandle en \hbar -dimensjonal, harmonisk oscillator med masse m og stivhet k .

- Skriv ned uttrykket for oscillatorens potensielle energi $V(x)$ og dens klassiske vinkelfrekvens ω .
- Skriv ned den tidsavhengige og den tidsuavhengige Schrödingerligningen for oscillatoren. Gjør kort rede for hvordan, og under hvilke betingelser vi får den tidsuavhengige Schrödingerligningen fra den tidsavhengige.

Gitt to normerte tilstandsfunksjoner $\psi(x)$ og $\phi(x)$ for oscillatoren ved tiden $t = 0$,

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2 \right), \\ \phi(x) &= \left(\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} x \exp \left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2 \right),\end{aligned}$$

der $\alpha \equiv (mk/\hbar^2)^{\frac{1}{4}}$.

- Vis at $\psi(x)$ og $\phi(x)$ er energi egentilstander for oscillatoren. Finn de tilhørende energi egenverdiene. Skriv ned uttrykket for de to energi egentilstandene ved tiden t .

Oppgave 4.5, Eksamen V-1997

Vi skal i denne oppgaven studere det kvantemekaniske problem med en partikkel med masse m som beveger seg i et potensial av formen

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a \\ 0 & -a \leq x < +a \\ V_0 & x \geq +a \end{cases}$$

- a) For $0 < E < V_0$ løs den tidsuavhengige egenverdiligningen for hvert av de tre områdene hvor den potensielle energien er konstant.
- b) Gi en kort oversikt over de krav som stilles til den kvantemekaniske bølgefunksjonen. Bruk dette til å finne de betingelsesligningene som egenfunksjonene i punkt a) må tilfredsstille.
- c) Vi antar nå at grunntilstands energien $E_0 = V_0/2$. Bruk dette til å løse ligningene i b) og vis at

$$a = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^2}{m V_0}}$$

- d) Bestem alle de andre konstantene for grunntilstands bølgefunksjonen. Lag en skisse av funksjonen og vis at den tilfredsstiller $\Psi(-x) = +\Psi(x)$.
- e) Den første eksiterte tilstand må tilfredsstille $\Psi(-x) = -\Psi(x)$. Bruk dette og uttrykkene i a) til å bestemme formen på den første eksiterte tilstanden. Skissér funksjonen.
- f) Uten å løse problemet eksakt, prøv å finne argumenter som viser at en slik eksitert tilstand er mulig.

Løsning

- a) Området I: $-\infty < x < -a$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) + V_0 \psi_I(x) = E \psi_I(x),$$

med løsning

$$\psi_I(x) = A e^{+\alpha x} \quad \text{hvor} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Komponenten $e^{-\alpha x}$ vokser over alle grenser for $x \rightarrow -\infty$ og må fjernes.

Området II: $-a < x < +a$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x),$$

med løsning

$$\psi_{II}(x) = B e^{+ikx} + C e^{-ikx} \quad \text{hvor} \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (4.217)$$

Området III: $+a < x < +\infty$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{III}(x) + V_0 \psi_{III}(x) = E \psi_{III}(x),$$

med løsning

$$\psi_{III}(x) = D e^{-\alpha x} \quad \text{hvor} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Komponenten $e^{+\alpha x}$ vokser over alle grenser for $x \rightarrow +\infty$ og må fjernes.

- b) Løsningen $\psi(x)$ av Schrödinger ligningen må tilfredsstille følgende krav

1. $\psi(x)$ må være **å**tydig, kontinuerlig og begrenset overalt.

2. For bundne systemer må funksjonen være normébar .
3. Overalt hvor den potensielle energien $V(x)$ er endelig, må den deriverte av $\psi(x)$ være kontinuerlig.

I punktet $x = -a$ får vi betingelsene

$$Ae^{-\alpha a} = Be^{-ika} + Ce^{+ika} \quad (4.218)$$

$$\alpha Ae^{-\alpha a} = ik(Be^{-ika} - Ce^{+ika}) \quad (4.219)$$

og i punktet $x = +a$ betingelsene

$$De^{-\alpha a} = Be^{+ika} + Ce^{-ika} \quad (4.220)$$

$$-\alpha De^{-\alpha a} = ik(Be^{+ika} - Ce^{-ika}) \quad (4.221)$$

c) For $E_0 = V_0/2$ får vi

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}; \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} = k$$

Det gir

$$B + Ce^{2ika} = i(B - Ce^{+2ika})$$

Realdelen og imaginærdelen gir to separate ligninger

$$B + C \cos(2ka) = C \sin(2ka)$$

$$B - C \cos(2ka) = C \sin(2ka)$$

med løsning $2C \cos(2ka) = 0$ og $ka = \pi/4$ for grunntilstanden. Dette gir

$$a = \frac{\pi}{4k} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^2}{mV_0}}$$

Ligningsettet ovenfor gir muligheter for andre løsninger, men de vil ha $ka > \pi/4$ og kan ikke svare til grunntilstanden av systemet som forutsatt.

Fra ligningene (4) og (5) for $x = +a$ får vi

$$B + Ce^{-2ika} = -i(B - Ce^{-2ika})$$

Realdelen og imaginærdelen gir to separate ligninger

$$B + C \cos(2ka) = C \sin(2ka)$$

$$-B + C \cos(2ka) = -C \sin(2ka)$$

med samme løsning for a .

d) Fra løsningen i c) følger at $C = B$ og fra lign (2) kan vi bestemme B og C som funksjon av A

$$B = C = \sqrt{\frac{1}{2}} e^{-\alpha a} A$$

Fra lign (4) får vi $D = A$. Grunntilstands bølgefunksjonen blir da

$$\begin{aligned} x < -a : \quad \psi(x) &= A e^{\alpha x} \\ -a < x < +a : \quad \psi(x) &= A e^{-\alpha a} \sqrt{2} \cos(kx) \\ +a < x : \quad \psi(x) &= A e^{-\alpha x} \end{aligned} \quad (4.222)$$

og denne funksjonen har paritet = +1. Konstanten A bestemmes ved normalisering

$$\begin{aligned} 1 &= 2 \int_0^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_0^a \psi_{II}^*(x) \psi_{II}(x) dx + \int_a^{+\infty} \psi_{III}^*(x) \psi_{III}(x) dx \\ &= 4|A|^2 e^{-2\alpha a} \int_0^a \cos^2(kx) dx + 2|A|^2 \int_a^{+\infty} e^{-2\alpha x} dx \\ &= 4|A|^2 e^{-2\alpha a} \frac{1}{k} \left(\frac{1}{2} \sin(ka) \cos(ka) + \frac{1}{2} ka \right) + |A|^2 \frac{1}{\alpha} e^{-2\alpha a} \\ &= |A|^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{\pi} \right) e^{-\pi/2} a \end{aligned}$$

som gir

$$|A|^2 = A^2 = \frac{1}{a} \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{\pi} \right) e^{\pi/2}$$

e) Første eksiterte tilstand har paritet = -1. Det gir $\psi_1(x=0) = 0$. Ser vi på den generelle løsningen $\psi_{II}(x)$ ovenfor må det bety at $B = -C$ og formen $\psi_1(x) = 2B i \sin(k_1 x)$. For $x < -a$ og $x > +a$ blir formen $\pm \text{konstant} e^{\pm \alpha_1 x}$.

f) Den første bundne eksiterte tilstand må ha $E_1 < V_0$. Dette gir

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_1} < \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0}$$

og

$$(k_1 a)_{maks} < a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0} = a \sqrt{2} k = \frac{\pi}{4} \sqrt{2}$$

Ser vi nærmere på bølgefunksjonen skissert i fig.1 for $\psi_1(x)$ i punktet $x = a$ svarer det til en verdi på argumentet $ka > \pi/2$. Dette betyr at betingelsene ovenfor ikke oppfylles, og følgelig har vi kun én bunden egentilstand.

Alternativ løsning:

a) Vi kan alternativt skrive løsningen i området $-a < x < +a$ på formen

$$\psi_{II}(x) = B \cos(kx) + C \sin(kx) \quad (4.223)$$

b) Betingelseligningene blir da:

I punktet $x = -a$

$$Ae^{-\alpha a} = B \cos(ka) - C \sin(ka) \quad (4.224)$$

$$\alpha Ae^{-\alpha a} = k(B \sin(ka) + C \cos(ka)) \quad (4.225)$$

og i punktet $x = +a$

$$De^{-\alpha a} = B \cos(ka) + C \sin(ka) \quad (4.226)$$

$$-\alpha De^{-\alpha a} = k(-B \sin(ka) + C \cos(ka)) \quad (4.227)$$

c) Dette gir i punktet $x = -a$

$$B \cos(ka) - C \sin(ka) = B \sin(ka) + C \cos(ka)$$

eller

$$(B - C) \cos(ka) - (B + C) \sin(ka) = 0$$

med fire mulige løsninger

$$B = 0 : \quad \cos(ka) + \sin(ka) = 0; \rightarrow ka = \frac{3\pi}{4}$$

$$C = 0 : \quad \cos(ka) - \sin(ka) = 0; \rightarrow ka = \frac{\pi}{4}$$

$$B = C : \quad \sin(ka) = 0; \rightarrow ka = \pi$$

$$B = C : \quad \cos(ka) = 0; \rightarrow ka = \frac{\pi}{2}$$

I punktet $x = +a$ får vi betingelsen

$$B \cos(ka) + C \sin(ka) = B \sin(ka) - C \cos(ka)$$

eller

$$(B + C) \cos(ka) - (B - C) \sin(ka) = 0$$

igjen med fire mulige løsninger

$$B = 0 : \quad \cos(ka) + \sin(ka) = 0; \rightarrow ka = \frac{3\pi}{4}$$

$$C = 0 : \quad \cos(ka) - \sin(ka) = 0; \rightarrow ka = \frac{\pi}{4}$$

$$B = C : \quad \cos(ka) = 0; \rightarrow ka = \frac{\pi}{2}$$

$$B = -C : \quad \sin(ka) = 0; \rightarrow ka = \pi$$

To løsninger er mulige når vi skal tilfredsstille betingelsene i begge punktene $x = \pm a$, $B = 0$ og $ka = 3\pi/4$ eller $C = 0$ og $ka = \pi/4$.

Løsningen $B = 0$ svarer til første eksiterte tilstand. Det skulle gå frem av fig.1. Mens løsningen $C = 0$ er grunntilstanden – den vi ønsker. Og vi får samme svar som tidligere.

4.9.2 Numeriske oppgaver

Oppgave 4.6

Her skal vi studere en partikkel som beveger seg langs x -aksen i et potensial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x > a \\ -V_0 & -a < x \leq a \\ 0 & x \leq -a \end{cases}, \quad (4.228)$$

vist i figur 4.9 med energi E og $V_0 > 0$. Klassisk vil en slik partikkel være fanget i boksen (område II) og skli frem og tilbake med jevn hastighet dersom $E < 0$. Det er altså null sannsynlighet for at partikkelen befinner seg utenfor denne boksen. Kvantemekanisk blir denne sannsynligheten ulik null.

De matematiske krav som må stilles til en fysisk akseptabel løsning $\psi(x)$ av egenverdilikningen i 1D dimensjon er:

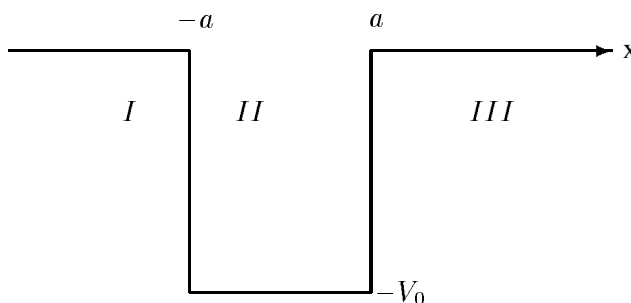
1. $\psi(x)$ må være kontinuerlig.
2. $\psi(x)$ må være normaliserbar, dvs vi må kunne finne en konstant C_N slik at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (C_N \psi(x))^* (C_N \psi(x)) dx = 1, \quad (4.229)$$

når fysikken i problemet er slik at systemet er begrenset i rommet.

3. $\frac{d}{dx}\psi(x) = \psi'(x)$ må være kontinuerlig når potensialet $V(x)$ er endelig.

Vi skal se på tilfellet der partikkelen har negativ energi, $E < 0$, dvs. vi ønsker å studere bundne tilstander.



Figur 4.9: Partikkel i endelig boks

- a) Sett opp den tidsuavhengige Schrödingers likning for de tre områdene I , II og III som vist på figuren. Hvorfor kan vi skille ut tidsavhengigheten, og hvilket analytisk uttrykk har denne?
- b) Sett opp de generelle bølgefunksjonene for de tre områdene og vis at de tilsvarende energinivåene er gitt ved likningene

$$k \cot(ka) = -\beta \quad (4.230)$$

$$k \tan(ka) = \beta \quad (4.231)$$

for hhv. den odde og den like bølgefunksjonen i område II . Her har vi definert $\beta = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ og $k = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}/\hbar$.

- c) Hvor sterkt må potensialet V_0 være for at vi skal ha minst en bunden tilstand, dvs. $E \leq 0$?

Numerisk del

Vi skal her studere relasjonene (7.117) og (7.118) gitt i oppgave 1b og finne energien E for de to lavest bundne tilstandene.

- d) Vi skal nå løse numerisk de *transcendentale*¹⁰ likningene

$$k \cot(ka) = -\beta.$$

for den odde bølgefunksjonen i område II og

$$k \tan(ka) = \beta.$$

for den like bølgefunksjonen i område II . Som før er $\beta = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ og $k = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}/\hbar$. Anta at partikkelen som er fanget i potensialet er et elektron med masse $m_e = 0.511 \text{ MeV}/c^2$. Parametrene V_0 og a velger du slik at du får minst to bundne tilstander.

Finn energien til grunntilstanden og til neste tilstand med de valgte parametrene.

Oppgave 4.7

Vi repeterer kort betingelsene fra forrige oppgave. Vi studerer altså et elektron som beveger seg langs x -aksen i et potensial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x > a \\ -V_0 & -a < x \leq a \\ 0 & x \leq -a \end{cases}, \quad (4.232)$$

vist i figur 4.9 med energi E og $V_0 > 0$.

De matematiske krav som må stilles til en fysisk akseptabel løsning $\psi(x)$ av egenverdilikningen i 1D dimensjon er:

1. $\psi(x)$ må være kontinuerlig.
2. $\psi(x)$ må være normaliserbar, dvs vi må kunne finne en konstant C_N slik at

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (C_N \psi(x))^* (C_N \psi(x)) dx = 1, \quad (4.233)$$

når fysikken i problemet er slik at systemet er begrenset i rommet.

3. $\frac{d}{dx}\psi(x) = \psi'(x)$ må være kontinuerlig når potensialet $V(x)$ er endelig.

Vi skal se på tilfellet der partikkelen har negativ energi, $E < 0$, dvs. vi ønsker å studere bundne tilstander. Klassisk er partikkelen da fanget i område II .

Potensialet vårt er symmetrisk, dvs. $V(x) = V(-x)$ men bølgefunksjonene kan være enten symmetriske eller antisymmetriske. Ved origo utviser disse bølgefunksjonene ulike egenskaper. For en symmetrisk (like) bølgefunksjon har vi

$$\psi(0) = \text{konstant} \neq 0, \quad \frac{d\psi}{dx}|_{x=0} = 0,$$

¹⁰Transcendentale likninger er likninger som inneholder transcendentale funksjoner (exp, sin, cos et.c.), og som sjelden har analytiske løsninger, slik at vi må ty til numeriske metoder.

mens en antisymmetrisk (ulike) bølgefunksjon har

$$\psi(0) = 0, \quad \frac{d\psi}{dx}\bigg|_{x=0} = \textit{konstant} \neq 0.$$

Vi kan velge konstanten lik 1 og deretter normalisere bølgefunksjonen vår.

- a) Du skal løse den tidsuavhengige schrödingerlikning for partikkel-i-endelig-boks med energiegenverdiene du fant i forrige numeriske oppgave. Dersom du ikke gjorde forrige oppgave, kan du bruke verdiene $V_0 = 10 \text{ eV}$, $a = 1 \text{ nm}$, $E_0 = 9.916640434 \text{ eV}$ og $E_1 = 9.666726218 \text{ eV}$.

Løs schrödingerlikningen i område II (der $V(x) = -V_0$) numerisk for de to bundne tilstandene med lavest energi. Fremstill de resulterende bølgefunksjonene grafisk i området $-a$ til a . Tegn også også sannsynlighetstettheten.

- b) Normér de to bølgefunksjonene (denne gangen med løsningene i I og III) med Maple eller Matlab og fremstill funksjonene i en graf sammen med potensialet. Reflektér omkring sannsynligheten for å finne elektronet på ulike steder i potensialfella.

Bruk de analytiske uttrykkene for bølgefunksjonen med ukjente koeffisienter som du fant i forrige numeriske oppgave. Husk også de matematiske betingelsene for en bølgefunksjon fra forrige numeriske oppgave.

- c) Hva skjer med de to egenfunksjonene og egenverdiene dersom du lar $a \rightarrow \infty$, mens V_0 holdes konstant? Prøv deg gjerne frem både analytisk og numerisk. Hvordan vil du tolke resultatet?

Kapittel 5

KVANTEMEKANIKKENS FORMELLE GRUNNLAG

How empty is theory in the presence of fact. *Mark Twain*

5.1 Viktige postulater

Schrödingerlikningen bestemmer bølgefunksjonen Ψ for det fysiske system, og kvantemekanikken postulerer at Ψ inneholder all informasjon vi kan få om systemet. I avsnitt 4.2 diskuterte vi Borns forslag til tolkning av bølgefunksjonen,

$$P(x, t)dx = \Psi(x, t)^* \Psi(x, t)dx$$

hvor sannsynlighetstettheten P gir oss sannsynligheten for å finne partikkelen innafor et område x til $x + dx$.

Denne tolkningen leder da til innføringen av begrep fra sannsynlighetsteori og statistikk. Forventningsverdien, eller middelveien, av en størrelse A kan da reknas ut ifra

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i P_i}{\sum_i P_i}, \quad (5.1)$$

hvor vi har antatt en diskret sannsynlighetsfordeling, f.eks. sannsynligheten for utkomme av terningkast med to terninger. P_i representerer da sannsynligheten for en bestemt hending, f.eks. muligheten for å få tallet seks i et kast med to terninger. Dersom summen over alle sannsynlighetene er normert til en, kan vi droppe nevneren i det siste uttrykket. Helt analogt, dersom vi har en kontinuerlig fordeling $P(x)$ kan vi definere forventningsverdien som (med normert fordeling)

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} A(x) P(x) dx. \quad (5.2)$$

I kvantemekanikken kan vi betrakte bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ som en fordelingsfunksjon til bestemmelse av posisjonen x . Den kan ikke bestemme partikkelens posisjon eksakt, men kun den midlere posisjon. Helt analogt med forrige likning definerer vi midlere posisjon som

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx. \quad (5.3)$$

For at dere ikke skal komme helt bort i den kvantemekaniske skogen, la oss først samle opp en del egenskaper og prinsipper om kvantemekaniske systemer. Den innramma delen representerer også deler av det som kan kalles for Københavner tolkningen av kvantemekanikken, etter hovedsaklig Bohr og Heisenberg.

- Tilstanden til et kvantesystem bestemmes av løsningen av Schrödingers likning, bølgefunksjonen. Bølgefunksjonen kvadrert tolkes som en sannsynlighetstetthet. Schrödingers likning er vår bevegelseslov for kvantesystemer.
- Kvanteobjekter 'styres' av Heisenbergs uskarphetsrelasjon, det er ikke mulig å måle både posisjon og bevegelsesmengde skarpt samtidig.
- Det faktum at materie har partikkel og bølgenatur, og at vi ikke er i stand til å observere begge disse egenskapene samtidig, leder til *komplementaritetsprinsippet*, bølge og partikkel egenskaper er to komplementære side av materie.
- **Korrespondanseprinsippet** forteller oss at i grensa store kvantetall skal vi gjenvinne resultater fra klassisk fysikk.

Det er klart at det er ikke lett å tilskrive en bølgefunksjon som er kompleks en intuitiv forklaring. Flere av kvantemekanikkens postulat har også leda til interessante filosofiske tolkninger av teoriens konsekvenser. Kan vi bruke bølgefunksjonen til å si noe om systemet, eller gjenspeiler den bare vår begrensning i kunnskap?

Det vi skal legge til de innramma egenskapene ved kvantemekanikken i dette avsnittet, er en formell matematisk beskrivelse av fysiske systemer basert på ulike postulat.

Vi studerer først problemet i én dimensjon. Den kvantemekaniske energi egenverdilikningen er da gitt ved

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (5.4)$$

Venstre side er skrevet som et produkt av to faktorer. Dette skal forstås slik at hvert ledd i parentesens $[\dots]$ skal virke på bølgefunksjonen $\psi(x)$. Når d^2/dx^2 opererer på $\psi(x)$ blir resultatet den annen deriverte av $\psi(x)$, mens $V(x)$ multipliseres med $\psi(x)$. I matematisk språkbruk kan vi si at uttrykket

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) + V(x), \quad (5.5)$$

er en operator som når den virker på en funksjon $\psi(x)$ produserer en ny funksjon som et resultat av en serie matematiske operasjoner fastlagt gjennom definisjonen av \hat{H} . Vi vil i det følgende bruke skrivemåten \hat{A} for å markere at A er en kvantemekanisk operator. Med innføring av operator begrepet kan vi skrive likning (5.4) på formen

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (5.6)$$

Dette betyr at virkningen av \hat{H} på bølgefunksjonen $\psi(x)$ er det samme som å multiplisere $\psi(x)$ med en konstant E .

I alminnelighet vil det ikke være slik at når \hat{H} opererer på en vilkårlig funksjon, vil resultatet bli den samme funksjonen multiplisert med en konstant. Funksjoner som tilfredsstiller likning (5.6) kalles egenfunksjoner for operatoren \hat{H} , og den tilhørende verdien av E er egenverdien for operatoren.

For en vilkårlig operator \hat{A} vil de tilhørende egenfunksjonene og egenverdiene tilfredsstille likningen

$$\hat{A}\Phi_\nu(x) = a_\nu \Phi_\nu, \quad (5.7)$$

med en serie egenverdier $a_1, a_2, a_3 \dots$ og med tilhørende egenfunksjoner $\Phi_1(x), \Phi_2(x), \Phi_3(x), \dots$. Dette avhenger av formen på operatoren og de matematiske randbetingelsene. Egenfunksjonene er en konsekvens av de fysiske egenskapene for systemet. I noen tilfeller vil flere egenfunksjoner ha samme egenverdi. I slike tilfeller sier vi at systemet er *degenerert*.

I kvantemekanikken vil alle operatoren som representerer fysiske størrelser være av en bestemt matematisk type – *Hermite'ske operatoren* (navngitt etter en fransk matematiker C. Hermite). Slike operatoren tilfredsstiller betingelsen

$$\int (\Phi_\mu)^* (\hat{A}\Phi_\nu) d\tau = \int (\hat{A}\Phi_\mu)^* \Phi_\nu d\tau, \quad (5.8)$$

for alle funksjoner Φ_μ og Φ_ν som oppfyller randbetingelsene for systemet.

Vi har nå følgende:

a) *Egenverdiene for Hermite'ske operatoren er reelle,*

$$(a_\mu)^* = a_\mu, \quad (5.9)$$

b) *og egenfunksjonene er ortogonale,*

$$\int \Phi_\mu^* \Phi_\nu d\tau = \delta_{\mu,\nu} N_\nu, \quad (5.10)$$

hvis Φ_μ og Φ_ν hører til to forskjellige egenverdier a_ν og a_μ av operatoren \hat{A} . Størrelsen N_ν er en normaliseringskonstant.

Dette kan vises på følgende måte: Vi skriver likning (5.7) for to forskjellige egentilstander, kompleks konjugerer den siste og får

$$\begin{aligned} \hat{A}\Phi_\nu &= a_\nu \Phi_\nu, \\ (\hat{A}\Phi_\mu)^* &= (a_\mu)^* (\Phi_\mu)^*. \end{aligned}$$

Multipliser første likning fra venstre med $(\Phi_\mu)^*$ og den andre likningen med Φ_ν fra høyre og subtrahér. Dette gir

$$(\Phi_\mu)^* \hat{A}\Phi_\nu - (\hat{A}\Phi_\mu)^* \Phi_\nu = (a_\nu - a_\mu^*) (\Phi_\mu)^* \Phi_\nu.$$

Uttrykket integreres over hele konfigurasjonsrommet. Ved bruk av likning (5.8) gir dette

$$(a_\mu - a_\nu^*) \int (\Phi_\mu)^* \Phi_\nu d\tau = 0.$$

For $\mu = \nu$ er integralet lik 1 når funksjonene er normerte. Dette gir

$$a_\mu - a_\mu^* = 0 \longrightarrow \text{alle } a_\mu \text{ er reelle.}$$

For $\mu \neq \nu$ må integralet være null. Dette gir likning (5.10), og derved er relasjonene ovenfor bevist.

Operatoren \hat{H} i likning (5.5) spiller en viktig rolle i kvantemekanikken. Den kalles *Hamilton operatoren* for systemet. Uttrykket er hentet fra klassisk mekanikk hvor systemets totale energi kalles *Hamilton funksjonen*. Den skrives som en funksjon av koordinat og bevegelsesmengde for systemet. For en partikkel som beveger seg i 1 dimensjon, er den klassiske *Hamilton funksjonen* gitt ved

$$H_{klassisk} = \frac{1}{2m}p_x^2 + V(x). \quad (5.11)$$

Vi kan nå overføre denne klassiske *Hamilton funksjonen* til kvantemekanisk form på en ganske enkel måte. Ved å sammenligne likning (5.5) og likning (5.11) ser vi at hvis den klassiske bevegelsesmengden p_x byttes ut med operatoren

$$p_x \longrightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad (5.12)$$

får vi den kvantemekaniske *Hamilton operatoren* \hat{H} . For bevegelse av en partikkel i tre dimensjoner vil den klassiske *Hamilton funksjonen* ha formen

$$H_{klassisk} = \frac{1}{2m}(\vec{p})^2 + V(\vec{r}), \quad (5.13)$$

hvor \vec{r} er posisjonsvektoren for partikkelen og $(\vec{p})^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$. I dette tilfelle blir operator transformasjonene

$$p_x \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (5.14)$$

Med bruk av Laplace operatoren

$$\vec{\nabla} = \vec{u}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{u}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{u}_z \frac{\partial}{\partial z}, \quad (5.15)$$

kan vi sammenfatte likning (5.14) til

$$\vec{p} \longrightarrow -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (5.16)$$

Den kvantemekaniske *Hamilton operatoren* for det tredimensjonale tilfelle blir da

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla})^2 + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}). \quad (5.17)$$

Lar vi \hat{H} virke på funksjonen $\psi(\vec{r})$, får vi

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r})\psi. \quad (5.18)$$

Hvis ψ er en egenfunksjon til \hat{H} , har vi $\hat{H}\psi = E\psi$, hvor E er egenverdiene til \hat{H} . Skrevet helt ut, gir dette

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r})\psi = E\psi. \quad (5.19)$$

Vi kan nå formulere kvantemekanikkens første postulat:

5.1.1 Første postulat

- I Til enhver fysisk størrelse $A(\vec{r}, \vec{p})$ som er en funksjon av posisjonen \vec{r} og bevegelsesmengden \vec{p} til systemet, vil det svare en kvantemekanisk operator. Den fremkommer ved å bytte \vec{p} med $-i\hbar \vec{\nabla}$. Dette gir den tilhørende kvantemekaniske operatoren

$$\hat{A} = A(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}).$$

Hamilton operatoren i likning (5.5) eller likning (5.17) er den kvantemekaniske operatoren som svarer til systemets totale energi i henholdsvis 6 og tre dimensjoner. På tilsvarende måte vil systemets kinetiske energi $T = p^2/2m$ gi operatoren $-(\hbar^2/2m)(\vec{\nabla})^2$ i tre dimensjoner og $-(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$ i 1 dimensjon. I tabell 5.1 har vi samlet en del fysiske størrelser og de tilhørende kvantemekaniske operatorene.

Tabell 5.1: Kvantemekaniske operatører.

Fysisk størrelse	Klassisk definisjon	Kvantemekanisk operator
Posisjon	\vec{r}	$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$
Bevegelsesmengde	\vec{p}	$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$
Banespinn	$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times (-i\hbar \vec{\nabla})$
Kinetisk energi	$T = (\vec{p})^2/2m$	$\hat{T} = -(\hbar^2/2m)(\vec{\nabla})^2$
Total energi	$H = (p^2/2m) + V(\vec{r})$	$\hat{H} = -(\hbar^2/2m)(\vec{\nabla})^2 + V(\vec{r})$

5.1.2 Andre postulat

Det neste kvantemekaniske postulat er følgende:

- II De eneste mulige verdier vi kan få ved en ideell måling av den fysiske størrelsen A er egenverdiene for den tilsvarende kvantemekaniske operatoren \hat{A} .

Ut fra dette kan vi bestemme ikke bare energien, men også andre fysiske størrelser for systemet, og postulatet fastlegger hvilke fysiske informasjoner vi er i stand til å finne. For en operator \hat{A} kan vi formulere egenverdi likningen

$$\hat{A}\psi_\nu = a_\nu\psi_\nu, \quad (5.20)$$

som gir egenverdiene a_1, a_2, a_3, \dots som de eneste mulige måleresultater for den fysiske størrelsen A . De tilhørende egentilstander $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ angir systemets kvantemekaniske tilstander. Dette betyr at hvis systemet er i en tilstand beskrevet ved egenfunksjonen ψ_ν for operatoren \hat{A} , er verdien av den fysiske størrelsen A lik a_ν .

Vårt neste spørsmål blir da: Hvordan vil det være hvis systemet er i tilstanden Φ som ikke er en løsning av likning (5.20)? I slike tilfeller vil måling av den fysiske størrelsen A gi 6 av egenverdiene i likning (5.20). La oss skrive bølgefunksjonen Φ som en lineær kombinasjon av egenfunksjonene ψ_ν for \hat{A} . Dette gir

$$\Phi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots = \sum_{\nu} c_{\nu}\psi_{\nu}. \quad (5.21)$$

Siden funksjonene er ortogonale (\hat{A} er Hermite'sk), får vi

$$c_{\nu} = \int (\Phi)^* \psi_{\nu} d\tau. \quad (5.22)$$

5.1.3 Tredje postulat

Av dette kan vi formulere et tredje kvantemekaniske postulat:

- III Når bølgefunksjonen til et system er Φ , vil sannsynligheten for å få verdien a_ν som et resultat av en ideell måling av den fysiske størrelsen A være $|c_\nu|^2$, hvor c_ν er gitt i likning (5.22), og ψ_ν er en egenfunksjon til \hat{A} som svarer til egenverdien a_ν .

Hvis bølgefunksjonen Φ ikke er en egenfunksjon for \hat{A} , vil vi i følge dette tredje postulat ikke kunne finne noen eksakt verdi for A . Gjentar vi målingen av den fysiske størrelsen A på identiske systemer og de alle er i samme kvantemekaniske tilstand beskrevet ved bølgefunksjonen Φ , vil vi få forskjellige resultater. Hvert resultat vil komme med en viss sannsynlighet. Vi kan imidlertid snakke om den *midlere* verdien av størrelsen A for et system beskrevet ved tilstanden Φ .

Som et resultat av det tredje postulatet kan vi vise at

- Når et kvantemekanisk system er i tilstanden Φ , er middelverdien – eller forventningsverdien – for den fysiske størrelsen $A(\vec{r}, \vec{p})$ gitt ved

$$\langle A \rangle = \int (\Phi)^* \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \Phi d\tau. \quad (5.23)$$

Her må vi først la \hat{A} virke på tilstanden Φ til høyre. Resultatet multipliseres med $(\Phi)^*$ og integreres. Vi forutsetter at funksjonen Φ er normalisert, dvs. $\int (\Phi)^* \Phi d\tau = 1$. Hvis Φ ikke er normalisert, får lign.(5.23) formen

$$\langle A \rangle = \frac{\int (\Phi)^* \hat{A} \Phi d\tau}{\int (\Phi)^* \Phi d\tau}. \quad (5.24)$$

5.1.4 Fjerde postulat

Postulatene vi har formulert så langt beskriver en statisk situasjon. Den gir ingen informasjon om tidsutviklingen av systemet. For få en dynamisk teori trenger vi et fjerde kvantemekanisk postulat:

- IV Tidsutviklingen av et fysisk system er bestemt av likningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (5.25)$$

hvor \hat{H} er den kvantemekaniske Hamilton operatoren for systemet.

Denne likningen gir en bølgefunksjon $\Psi(\vec{r}, t)$ som funksjon av posisjonen \vec{r} og tiden t . Hvis operatoren \hat{V} for den potensielle energien er eksplisitt uavhengig av tiden, kan vi skrive $\Psi(\vec{r}, t)$ på formen

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp(-(i/\hbar)Et), \quad (5.26)$$

hvor ψ er løsning av likning (5.18). I dette tilfellet har vi $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$, dvs. sannsynlighetstettheten er uavhengig av tiden t . Dette representerer *stasjonære* tilstander for et kvantemekanisk system. En generell løsning av likning (5.25) vil være av formen

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) \exp(-(i/\hbar)E_n t).$$

Denne tilstanden vil ikke ha presis (skarp) energi, men være en lineær kombinasjon av tilstander med forskjellig energi. Den vil heller ikke være stasjonær, i.e. $|\Phi(\vec{r}, t)|^2$ vil være tidsavhengig.

5.1.5 Kommutatorer

Som der fremgår at det vi hittil har sagt vil alle fysiske størrelser i kvantemekanikken bli formulert som operatorer. Noen eksempler er gitt i tabell 5.1. Bruken av operatorer i kvantemekanikken skaper imidlertid et nytt problem. Hvis vi har et sammensatt uttrykk, vil rekkefølgen av operatorene ha betydning. Dette kan vi se av følgende eksempel:

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{p}_x\Phi &= x(-i\hbar)\frac{d}{dx}\Phi = -i\hbar x\frac{d\Phi}{dx}, \\ \hat{p}_x\hat{x}\Phi &= (-i\hbar)\frac{d}{dx}(x\Phi) = -i\hbar(\Phi + x\frac{d\Phi}{dx}).\end{aligned}\quad (5.27)$$

Virkingen av operatorene $\hat{x}\hat{p}_x$ og $\hat{p}_x\hat{x}$ på en vilkårlig tilstand Φ blir forskjellige. Begrepet **kommutator** står sentralt i kvantemekanikken. Den forteller hva som skjer når vi bytter om rekkefølgen av to operatorer i et uttrykk. Kommutatoren mellom operatorene \hat{A} og \hat{B} defineres ved

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (5.28)$$

Eksemplet i likning (5.27) ovenfor gir

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar. \quad (5.29)$$

Dette er en operator relasjon, og det betyr at når det sammensatte operatoruttrykket på venstre siden virker på en bølgefunksjon er resultatet det samme som når vi multipliserer bølgefunksjonen med konstanten $i\hbar$.

Andre eksempler er

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{p}_y] &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{x} = 0, \\ [\hat{x}, \hat{p}_z] &= \hat{x}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{x} = 0.\end{aligned}\quad (5.30)$$

Vi skal diskutere å viktig anvendelse av kommutator relasjoner. La oss vende tilbake til postulat II og egenverdilikningen (5.20). Hvis systemet er i en egentilstand ψ_ν , vil en ideell måling av den fysiske størrelsen A gi som resultat den presise (skarpe) verdien a_ν . Kan det i en slik situasjon tenkes at vi også kan få en presis (skarp) verdi for en annen fysisk størrelse? La oss kalle den B . Hvis det er mulig, måtte følgende egenverdilikninger være oppfylt samtidig:

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi_{\nu,\mu} &= a_\nu\psi_{\nu,\mu}, \\ \hat{B}\psi_{\nu,\mu} &= b_\mu\psi_{\nu,\mu}.\end{aligned}\quad (5.31)$$

Bølgefunksjonen er her karakterisert med to indekser ν og μ siden den er en egenfunksjon for to forskjellige operatorer \hat{A} og \hat{B} med egenverdiene a_ν og b_μ . Vi kan vise at dette er mulig hvis de to operatorene kommuterer.

Multipliser den første likningen med \hat{B} og den andre med \hat{A} og subtrahér. Dette gir

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\psi_{\nu,\mu} = 0,$$

dvs. hvis likning (5.31) er oppfylt, må de to operatorene kommutere. Det omvendte er også tilfelle: Hvis de to operatorene \hat{A} og \hat{B} kommuterer, kan vi finne egentilstander for \hat{A} og \hat{B} samtidig, og ved måling av de tilsvarende dynamiske variable vil vi få presise (skarpe) verdier for både A og B .

La oss ta ett eksempel på anvendelse av denne regelen. Vi har vist i likning (5.29) at operatorene \hat{x} og \hat{p}_x ikke kommuterer. Dette betyr at vi ikke kan finne en egentilstand for en partikkel hvor de fysiske

størrelsene x og p_x har presise (skarpe) verdier samtidig. Dette stemmer med hva vi tidligere er kommet frem til i forbindelse med analysen av Heisenbergs uskarphets relasjon. Derimot er det mulig å måle presise (skarpe) verdier av x , p_y og p_z samtidig.

Det at en operator har en egenverdi er gitt ved uttrykket fra postulat nummer 2, dvs.

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n,$$

hvor a_n er et tall.

Som et konkret eksempel kan vi ta grunntilstanden for den en-dimensjonale harmoniske oscillator, som har en bølgefunksjon gitt ved

$$\psi_0(x) = Ce^{-x^2\alpha^2},$$

hvor C og α er konstanter. Virker vi på denne bølgefunksjonen med hamiltonfunksjonen vår

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2,$$

finner vi en veldefinert energi E_0 gitt ved

$$\hat{H}\psi_0 = E_0\psi_0,$$

hvor E_0 er en konstant. Dersom vi virker på ψ_0 med operatoren for bevegelsesmengden \hat{p} har vi

$$\hat{p}\psi_0 = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi_0 = -i\hbar 2x\alpha^2\psi_0 \neq \text{konstant} \times \psi_0.$$

Dette eksemplet forteller oss at vi kan ikke bestemme bevegelsesmengde og energi skarpt samtidig. Operatorene \hat{H} og \hat{p} kommuterer ikke og har ikke felles egenfunksjoner.

I denne oversikten over det formelle grunnlaget for kvantemekanikken har vi behandlet et system med en partikkel. Men formalismen kan lett utvides til et mer komplisert system av mange partikler.

5.2 Forventningsverdier og operatorer

Som et eksempel på diskusjonen i forrige avsnitt, skal vi studere igjen en partikkel med masse m som beveger seg i et uendelig bokspotensial

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < -a \\ 0 & -a \leq x < +a \\ +\infty & x \geq +a \end{cases} \quad (5.32)$$

kan vi løse Schrödingerligningen for partikkelens bevegelse i området $-a < x < +a$ (se forrige kapittel). Bølgefunksjonene får formen

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos k_n x e^{(-i/\hbar)E_n t}, \quad (5.33)$$

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin k_n x e^{(-i/\hbar)E_n t}, \quad (5.34)$$

Middelverdien av x gir

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{1}{a} \int_{-a}^{+a} x \cos^2 k_n x dx = 0, \\ \langle x \rangle &= \frac{1}{a} \int_{-a}^{+a} x \sin^2 k_n x dx = 0. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Generalisert til middelverdien av en vilkårlig funksjon av x får vi følgende uttrykk

$$\langle f \rangle = \int \Psi^*(x, t) f(x) \Psi(x, t) dx. \quad (5.36)$$

Som eksempel kunne vi beregne den midlere verdien av den potensielle energien

$$\langle V \rangle = \int \Psi^*(x, t) V(x) \Psi(x, t) dx. \quad (5.37)$$

I tillegg til den midlere verdien av en dynamisk variabel kan vi også beregne spredningen ved bruk av standardavviket σ . Tar vi for oss en diskret fordelingsfunksjon P har vi

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N (x_i - \langle x \rangle)^2 \right)} \quad (5.38)$$

eller mer generelt som

$$\sigma = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \Delta x. \quad (5.39)$$

Her er $\langle x \rangle$ gitt i likning (5.3) og $\langle x^2 \rangle$ beregnes ved bruk av formelen i likning (5.36)

$$\langle x^2 \rangle = \int \Psi^*(x, t) x^2 \Psi(x, t) dx. \quad (5.40)$$

Legg merke til at dette gir oss en mulighet til, med en gitt bølgefunksjonen som løsning av den tidsuavhengige Schrödingers likning, å rekne ut uskarpheten i posisjon. Observer også rekkefølgen av leddene i integranden i uttrykkene for den kvantemekaniske forventningsverdien. I uttrykket for forventningsverdien av bevegelsesmengden skal vi se at denne rekkefølgen ikke er vilkårlig. Dvs. at dersom vi hadde satt

$$\langle f \rangle = \int f(x) \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx, \quad (5.41)$$

for p vil det gi et forskjellig resultat.

For egenfunksjonene med cosinus-løsningene, se likningen (5.35), får vi

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{a} \int_{-a}^{+a} x^2 \cos^2 k_n x dx = \frac{1}{3} a^2 - \frac{1}{2k_n^2} = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{(n\pi)^2} \right), \quad (5.42)$$

med n odde, og tilsvarende for funksjonene med sinus-funksjonen, se likning (5.35), får vi

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{a} \int_{-a}^{+a} x^2 \sin^2 k_n x dx = \frac{1}{3} a^2 - \frac{1}{2k_n^2} = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{(n\pi)^2} \right), \quad (5.43)$$

med n like. “Uskarpheten” i bestemmelsen av posisjonen for grunntilstanden, $n = 1$ blir

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \\ &= a \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2}}. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Schrödingers teori gir en oppskrift på hvordan man fra bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ ekstraherer verdier for dynamiske variable for et system. Vi har hittil sett hvordan vi finner verdien for den dynamiske variable

x i lign. (5.3). En annen viktig størrelse er bevegelsesmengden p . I analogi med uttrykket for x kunne vi sette

$$\langle p \rangle = \int \Psi^*(x, t) p \Psi(x, t) dx. \quad (5.45)$$

Men hvordan skal vi nå regne ut dette? Klassisk vil p være en funksjon av x , $p_{kl} = p_{kl}(x)$. Dette strider mot Heisenbergs uskarphetsrelasjon, siden en skarp verdi av x ville i så fall gi en skarp verdi av p . La oss igjen utnytte tilfellet med en fri partikkel hvor vi kjenner bølgefunksjonen

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}, \quad (5.46)$$

og beregne

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) = ik \Psi(x, t) = \frac{i}{\hbar} p \Psi(x, t). \quad (5.47)$$

Her har vi brukt $p = \hbar k$. Dette uttrykket kan omformes til

$$p \Psi(x, t) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t). \quad (5.48)$$

Denne ligningen kan vi tolke slik: Virkningen av p på bølgefunksjonen er det samme som å anvende **operatoren** $-i\hbar \partial / \partial x$ på $\Psi(x, t)$. La oss analogt sette opp følgende uttrykk

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -i\omega \Psi(x, t) = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(x, t), \quad (5.49)$$

som gir

$$E \Psi(x, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x, t). \quad (5.50)$$

Dersom vi kvadrerer operatoren for bevegelsesmengden kan vi skrive Schrödingers likning på operatorform

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (5.51)$$

Fra lign. (5.45) og (5.48) kan vi etablere følgende oppskrift på hvordan vi i kvantemekanikken finner verdier av dynamisk variable utfra kjennskap til systemets bølgefunksjon:

a) Posisjon

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx. \quad (5.52)$$

b) Bevegelsesmengde

$$\langle \hat{p} \rangle = \int \Psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) dx. \quad (5.53)$$

c) Energi

$$\langle \hat{E} \rangle = \int \Psi^*(x, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x, t) dx. \quad (5.54)$$

Vi bruke her symbolene \hat{x} , \hat{p} og \hat{E} for å markere at det nå er middelerdi av en kvantemekanisk operator.

La oss så vise at rekkefølgen av leddene i uttrykket for den kvantemekaniske forventningsverdien er viktig. Spørsmålet vi stiller oss er hvorfor kan vi ikke bare skrive

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx? \quad (5.55)$$

Dette integralet gir oss

$$\langle \hat{p} \rangle = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) \Big|_{-\infty}^{\infty}, \quad (5.56)$$

som er null da vi har krevd at bølgefunksjonen skal ha en endelig utstrekning, ellers er vi ikke i stand til å tilordne partikkelbegrepet til bølgefunksjonen. Med andre ord, vi har satt $\Psi(x = \pm\infty, t) = 0$, per definisjon. Det andre alternativet

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) dx, \quad (5.57)$$

er meningsløst. Vi sitter igjen derfor kun med en bestemt tilordning av leddene i integranden.

Oppsumert kan vi si at de klassiske dynamiske størrelsene byttes ut med operatører. Fra klassisk mekanikk har vi at alle dynamiske størrelser kan uttrykkes som funksjon av systemets koordinat x og bevegelsesmengde p . Derved kan vi sette opp følgende oppskrift på en kvantemekanisk behandling:

- Sett opp systemets klassisk mekaniske uttrykk som funksjon av x og p .
- Finn de tilsvarende kvantemekaniske uttrykkene ved å bytte

$$\begin{aligned} x &\longrightarrow \hat{x} = x, \\ p &\longrightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \end{aligned} \quad (5.58)$$

5.3 Oppgaver

5.3.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 5.1

En partikkel med masse m befinner seg i et 1-dimensjonalt harmonisk oscillator potensial $V = \frac{1}{2}kx^2$.

- a) Vis at bølgefunksjonen $\psi_0(x) = \exp^{-\alpha x^2}$ beskriver en egentilstand for systemet. Bestem parameteren α og den tilsvarende egenverdien E_0 . Bruk dette til å finne normaliseringskonstanten til bølgefunksjonen.
- b) Når partikkelen befinner seg i tilstanden $\psi_0(x)$, beregn de kvantemekaniske forventningsverdiene $\langle \hat{x} \rangle$ og $\langle \hat{x}^2 \rangle$, der \hat{x} er operatoren for partikkelens posisjon. Finn uskarpheten Δx ut fra definisjonen $\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$.
- c) Hva blir forventningsverdiene $\langle \hat{p} \rangle$ og $\langle \hat{p}^2 \rangle$, der \hat{p} er operatoren for bevegelsesmengden til partikkelen i tilstanden $\psi_0(x)$?
- d) Finn herav uskarpheten Δp i partikkelens bevegelsesmengde. Hva blir produktet $\Delta x \Delta p$? Sammenlign med Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Oppgave 5.2

Et system består av en partikkel med masse m i en 1-dimensjonal potensialboks. Partikkelens potensielle energi V er:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } -a \leq x < a \\ +\infty & \text{for } x \leq -a \text{ og } x \geq a \end{cases}$$

- Bestem de normerte energi egenfunksjonene og de tilhørende energi egenverdiene for systemet.
- Vis at disse bølgefunksjonene er ortogonale, dvs.

$$\int_{-a}^{+a} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{m,n} = \begin{cases} 1 & \text{for } m = n \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

- Bestem middelveiden (forventningsverdien) for bevegelsesmengden p og for p^2 når systemet er i en energi egentilstand.
- Vis at uskarphetsrelasjonen for posisjon og bevegelsesmengde gir som konsekvens en nedre grense for energien til partikkelen. Sammenlign dette med resultatet i pkt. a).

La nå systemet være i en tilstand som ved tiden $t = 0$ er beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\Phi(x, 0) = \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

hvor m og n er hele, positive tall.

- Bestem tilstandsfunksjonen $\Phi(x, t)$ ved tiden t (se bort fra normeringen).

Systemet består nå av en partikkel med masse m i en tre-dimensjonal potensialboks. Partikkelens potensielle energi er:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{for } -a < x < a, \quad -2a < y < 2a \text{ og } -2a < z < 2a, \\ +\infty & \text{ellers.} \end{cases}$$

- Bestem de normerte energi egenfunksjonene og de tilhørende energi egenverdiene for systemet.
- Bestem degenerasjonsgraden for de tre laveste gruppene av energi egentilstandene. Diskutér pariteten av de tilsvarende energi egenfunksjonene.

Løsning

- Bølgefunksjonen i områdene $x < -a$ og $x > +a$ er gitt ved

$$\psi_0(x) = 0$$

I området $-a \leq x \leq +a$ kan ligningen for $\psi_1(x)$ skrives på formen

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right) \psi_1(x) = 0,$$

med $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Den generelle løsningen har formen

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Betingelsene om at $\psi(x)$ er kontinuerlig overalt gir

$$\lim_{x \rightarrow -a} \psi_1(x) = 0 \quad \text{og} \quad \lim_{x \rightarrow +a} \psi_1(x) = 0$$

Siden $V(x) = \infty$ for $|x| > a$ har vi ingen kontinuitetskrav til $\frac{d\psi(x)}{dx}$ i punktene $x = \pm a$.

Dette gir

$$x = -a : \quad Ae^{-ka} + Be^{ka} = 0$$

$$x = +a : \quad Ae^{ka} + Be^{-ka} = 0$$

eller

$$(A + B)(e^{-ka} + Be^{ka}) = (A + B) \cos(ka) = 0$$

$$(A - B)(e^{-ka} + Be^{ka}) = (A - B) \sin(ka) = 0$$

med løsninger

1. $A = B \rightarrow \cos(ka) = 0$ med løsning

$$k_n a = n \frac{\pi}{2} \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

med energi egenverdiene

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2$$

og bølgefunksjonen inkludert tidsfaktoren får formen

$$\Psi(x, t) = A_n \cos(k_n x) e^{(-i/\hbar) E_n t}$$

2. $A = -B \rightarrow \sin(ka) = 0$ med løsning

$$k_n a = n \frac{\pi}{2} \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

med energi egenverdiene

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2$$

og bølgefunksjonen inkludert tidsfaktoren får formen

$$\Psi(x, t) = A_n \sin(k_n x) e^{(-i/\hbar) E_n t}$$

b) Bølgefunksjonene er ortogonale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \Psi_m(x, t) dx = \int_{-a}^{+a} \Psi_n^*(x, t) \Psi_m(x, t) dx = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} = \delta_{n,m}$$

Med utgangspunkt i egenfunksjonene funnet i a) får vi tre typer integrander

$$\sin(k_m x) \sin(k_n x) = \frac{1}{2} (\cos((k_m - k_n)x) - \cos((k_m + k_n)x))$$

$$\cos(k_m x) \cos(k_n x) = \frac{1}{2} (\cos((k_m - k_n)x) + \cos((k_m + k_n)x))$$

$$\sin(k_m x) \cos(k_n x) = \frac{1}{2} (\sin((k_m + k_n)x) + \sin((k_m - k_n)x))$$

Argumentene på høyre side i uttrykkene ovenfor er av typen $(k_m \pm k_n) = (m \pm n) \frac{\pi}{2a} = 2\nu \frac{\pi}{2a}$ hvor ν er et helt tall. Dette gir

$$\begin{aligned} \int_{-a}^{+a} \cos(\nu \frac{\pi x}{a}) dx &= 0 \\ \int_{-a}^{+a} \sin(\nu \frac{\pi x}{a}) dx &= 0 \end{aligned}$$

som viser at alle kombinasjoner av egenfunksjoner er ortogonale.

c)

$$\langle p \rangle = \int_{-a}^{+a} \Psi_n^*(x, t) \hat{p} \Psi_n(x, t) dx = \int_{-a}^{+a} \Psi_n^*(x, t) (-i\hbar \frac{d}{dx}) \Psi_n(x, t) dx = 0$$

siden integranden har paritet minus.

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_{-a}^{+a} \Psi_n^*(x, t) \hat{p}^2 \Psi_n(x, t) dx = 2m \int_{-a}^{+a} \Psi_n^*(x, t) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi_n(x, t) dx \\ &= 2m \int_{-a}^{+a} \Psi_n^*(x, t) E_n \Psi_n(x, t) dx = 2m E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{4a^2} n^2 \end{aligned}$$

d) Nullpunktsenergi: Et kvantemekanisk system har $E_{min} > 0$. En estimering av nullpunktsenergien fra Heisenbergs uskarphetsrelasjon $\Delta x \Delta p > \hbar$. Partikkelens bevegelse er begrenset til dimensjonen på potensialet. $\Delta x = a$. Bevegelsesmengden har konstant tallverdi, men kan skifte retning

$$\Delta p = 2p_{min} = 2\sqrt{2mE_{min}}$$

Dette gir

$$E_{min} > \frac{\hbar^2}{32ma^2} = \frac{(\hbar\pi)^2}{8ma^2} = E_{n=1}$$

i overensstemmelse med den beregnede grunntilstands energien i a),

e) Den generelle tidsavhengige løsning av Schrödinger ligningen i denne oppgaven kan skrives på formen

$$\Psi(x, t) = \sum_{\nu} \left(A_{\nu} \cos(k_{\nu} x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\nu} t} + B_{\nu} \sin(k_{\nu} x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\nu} t} \right)$$

For en fullstendig bestemmelse av $\Psi(x, t)$ kreves en initialbetingelse. I vårt tilfelle er den gitt ved

$$\Psi(x, t=0) = \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Konstantene A_{ν} og B_{ν} kan bestemmes på følgende måte

$$\Psi(x, t=0) = \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = \frac{1}{2} \sin\left(\frac{(m+n)\pi}{a}x\right) + \frac{1}{2} \sin\left(\frac{(m-n)\pi}{a}x\right)$$

som er en sum av to egenfunksjonene. Dette bestemmer konstantene til

$$B_{m+n} = \frac{1}{2}, \quad B_{m-n} = \frac{1}{2}$$

og de resterende koeffisientene er null. Den tidsavhengige løsningen blir da

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2} \sin\left(\frac{(m+n)\pi}{a}x\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{m+n} t} + \frac{1}{2} \sin\left(\frac{(m-n)\pi}{a}x\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{m-n} t}$$

f) Egenverdiligningen i det tre–dimensjonale tilfelle blir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Ligningen er separabel $\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z)$ og $E = E_x + E_y + E_z$ som gir følgende tre energi egenverdi ligninger

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_x(x) &= E_x \psi_x(x) & -a \leq x \leq +a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \psi_y(y) &= E_y \psi_y(y) & -2a \leq y \leq +2a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \psi_z(z) &= E_z \psi_z(z) & -2a \leq z \leq +2a \end{aligned}$$

Disse ligninger gir samme type løsninger som i det en–dimensjonale tilfelle.

$$\begin{aligned} E_x = \frac{(\hbar\pi)^2}{8ma^2} \quad \psi_x(x) &= \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{2a} n_x x\right) & n_x \text{ even} \\ \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{2a} n_x x\right) & n_x \text{ odd} \end{cases} \\ E_y = \frac{(\hbar\pi)^2}{32ma^2} \quad \psi_y(y) &= \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2a}} \sin\left(\frac{\pi}{4a} n_y y\right) & n_y \text{ even} \\ \sqrt{\frac{1}{2a}} \cos\left(\frac{\pi}{4a} n_y y\right) & n_y \text{ odd} \end{cases} \\ E_z = \frac{(\hbar\pi)^2}{32ma^2} \quad \psi_z(z) &= \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2a}} \sin\left(\frac{\pi}{4a} n_z z\right) & n_z \text{ even} \\ \sqrt{\frac{1}{2a}} \cos\left(\frac{\pi}{4a} n_z z\right) & n_z \text{ odd} \end{cases} \end{aligned}$$

Den totale energien blir

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{(\hbar\pi)^2}{32ma^2} (4n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

g) Vi setter $E_0 = \frac{(\hbar\pi)^2}{32ma^2}$. Energi degenerasjon og paritet for de tre laveste gruppene blir da

Kvantetall:	n_x	n_y	n_z	Energi: E/E_0	Degenerasjon	Paritet
gruppe 1	1	1	1	6	1	+
gruppe 2	1	2	1	9	2	-
	1	1	2	9	2	-
gruppe 3	1	2	2	12	1	+

Oppgave 5.3

En kvantemekanisk kommutator er definert ved

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Bruk dette til å vise at

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A} [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}] \hat{B}.$$

Den kvantemekaniske operatoren for en partikkels banespinn er definert ved

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

Vis at

$$\hat{\mathbf{L}}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \quad \hat{\mathbf{L}}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \quad \hat{\mathbf{L}}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x,$$

og utled følgende kommutator relasjoner

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

Oppgave 5.4

For løsningen av det kvantemekaniske problemet med en partikkel i et oscillator potensialet $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ er det meget nyttig å innføre operatorene

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{a}} &= \sqrt{m\omega/2\hbar} \hat{\mathbf{x}} + i\sqrt{1/2m\hbar\omega} \hat{\mathbf{p}} \\ \hat{\mathbf{a}}^\dagger &= \sqrt{m\omega/2\hbar} \hat{\mathbf{x}} - i\sqrt{1/2m\hbar\omega} \hat{\mathbf{p}}.\end{aligned}$$

- Vis at kommutatoren $[\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] = 1$.
- Vis at Hamilton operatoren for systemet nå kan skrives som

$$\hat{\mathbf{H}} = \hbar\omega \left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right).$$

- Finn kommutatorene $[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{a}}]$ og $[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger]$.
- Vis at bølgefunksjonen for grunntilstanden tilfredsstiller relasjonen $\hat{\mathbf{a}}\psi_0(x) = 0$, og at $\hat{\mathbf{a}}^\dagger\psi_0(x)$ er den første eksiterte tilstanden $\psi_1(x)$ i oscillatoren.
- Vis ved hjelp av resultatet i c) at $\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}^\dagger\psi_0(x)$ er en egentilstand for Hamilton operatoren med egenverdi $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$. Hvordan kan n'te eksiterte tilstand i oscillatoren utledes fra grunntilstanden?
- Verifisér dette ved å generere egenfunksjonene for de fire laveste energitilstandene ved hjelp av operatoren $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ og vis at de er egentilstander for $\hat{\mathbf{H}}$. Bruk som utgangspunkt grunntilstandsfunksjonen ψ_0 fra oppgave 4.3.

Oppgave 5.5

Vi skal igjen studere systemet som er beskrevet i oppgave 5.2 og antar at ved tiden $t = 0$ er det i tilstanden

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{2}} (\psi_1(x) + \psi_2(x))$$

- Vis at denne funksjonen er normert til 1. Bestem $\Psi(x, t)$ og beregn forventningsverdien $\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle$ som funksjon av tiden t .
- Finn også forventningsverdien $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$ og vis at vi har relasjonen

$$m \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle = \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle.$$

- c) Hvor generelt tror du dette resultatet er? (Hjelp: Bruk Schrödingerligningen og dens kompleks konjugerte til å vise at for generelle operatore \hat{Q} er

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

der \hat{H} er Hamilton operatoren. Vi antar at $\frac{\partial}{\partial t}\hat{Q} = 0$. Spesialiser så til $\hat{Q} = \hat{x}$ og $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$.

Oppgave 5.6

Vi skal i denne oppgaven behandle en \hat{a} -dimensjonal, harmonisk oscillator med masse m og stivhet k .

- Skriv ned uttrykket for oscillatorens potensielle energi $V(x)$ og dens klassiske vinkelfrekvens ω .
- Skriv ned den tidsavhengige og den tidsuavhengige Schrödingerligningen for oscillatoren. Gjør kort rede for hvordan, og under hvilke betingelser vi får den tidsuavhengige Schrödingerligningen fra den tidsavhengige.

Gitt to normerte tilstandsfunksjoner $\psi(x)$ og $\phi(x)$ for oscillatoren ved tiden $t = 0$,

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right), \\ \phi(x) &= \left(\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} x \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right),\end{aligned}$$

der $\alpha \equiv (mk/\hbar^2)^{\frac{1}{4}}$.

- Vis at $\psi(x)$ og $\phi(x)$ er energi egentilstander for oscillatoren. Finn de tilhørende energi egenverdier. Skriv ned uttrykket for de to energi egentilstandene ved tiden t .

For oscillatorens energi egentilstander $\phi_n(x)$ gjelder generelt at

$$\phi_n(-x) = (-1)^n \phi_n(x).$$

- Bruk dette til å vise at for oscillatoren er middelverdien $\langle\hat{x}\rangle$ av \hat{x} og middelverdien $\langle\hat{p}\rangle_n$ av \hat{p} i tilstanden $\phi_n(x)$ lik null.

Uskarpheten av en operatoren \hat{A} i tilstanden $\phi_n(x)$ er definert ved $\Delta A \equiv \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle_n - \langle\hat{A}\rangle_n^2}$. For harmonisk oscillator tilstander gjelder

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar.$$

- Vis at dette stemmer for de to tilstandene $\psi(x)$ og $\phi(x)$.

Løsning

- Den potensielle energien for en harmonisk oscillator er gitt ved $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ og med klassisk vinkelhastighet $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

b) Den tidsavhengige Schrödingerligning er

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\Psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) \quad (5.59)$$

og den tidsuavhengige Schrödingerligning er

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.60)$$

Hvis den potensielle energien er eksplisitt uavhengig av tiden, $V(x, t) = V(x)$ kan $\Psi(x, t)$ i lign(1) skrives som et produkt $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-(i/\hbar)Et)$ og $\psi(x)$ er løsning av lign(2).

c) Først beregner vi for $\psi_\mu(x)$

$$\frac{d}{dx}\psi_\mu(x) = (-\alpha^2 x)\psi_\mu(x), \quad \text{og} \quad \frac{d^2}{dx^2}\psi_\mu(x) = (-\alpha^2 + \alpha^4 x^2)\psi_\mu(x)$$

Innsatt gir dette

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(-\alpha^2 + \alpha^4 x^2) + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi_\mu(x) = E\psi_\mu(x)$$

For at venstre side skal være lik høyre side for alle x får vi betingelsene

$$\frac{\hbar^2\alpha^4}{2m} = \frac{1}{2}k \rightarrow \alpha = \left(\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/4} \quad \text{og} \quad E = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{km}{\hbar^2}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Deretter beregner vi for $\psi_\nu(x)$

$$\frac{d}{dx}\psi_\nu(x) = \left(\frac{1}{x} - \alpha^2 x\right)\psi_\nu(x) \quad \text{og} \quad \frac{d^2}{dx^2}\psi_\nu(x) = (-3\alpha^2 + \alpha^4 x^2)\psi_\nu(x)$$

som gir

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(-3\alpha^2 + \alpha^4 x^2) + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi_\nu(x) = E\psi_\nu(x)$$

og betingelsene blir

$$\frac{\hbar^2\alpha^4}{2m} = \frac{1}{2}k \rightarrow \alpha = \left(\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/4} \quad \text{og} \quad E = \frac{3\hbar^2\alpha^2}{2m} = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

d) Vi har følgende uttrykk

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) x \phi_n(x) dx$$

Integranden har paritetssymmetri

$$\{\phi_n^*(-x)(-x)\phi_n(-x)\} = -\{\phi_n^*(x)(x)\phi_n(x)\}$$

Siden vi integrerer symmetrisk om origo blir $\langle x \rangle_n = 0$.

Uttrykket for $\langle p \rangle_n$ blir

$$\langle p \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) (-i\hbar \frac{d}{dx}) \phi_n(x) dx$$

og paritetssymmetrien for integranden blir

$$\left\{\phi_n^*(-x)\left(-i\hbar \frac{d}{d(-x)}\right)\phi_n(-x)\right\} = -\left\{\phi_n^*(x)\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)\phi_n(x)\right\}$$

og $\langle p \rangle_n = 0$.

e) For å finne $\Delta x \cdot \Delta p$ må vi først beregne $\langle x^2 \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$.

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle_\mu &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\mu^*(x) x^2 \psi_\mu(x) dx = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\alpha^2 x^2) dx \\
 &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} 2 \frac{1}{2\alpha^3} \Gamma(3/2) = \frac{1}{2\alpha^2} \\
 \langle x^2 \rangle_\nu &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\nu^*(x) x^2 \phi_\nu(x) dx = \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(-\alpha^2 x^2) dx \\
 &= \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} 2 \frac{1}{2\alpha^5} \Gamma(5/2) = \frac{3}{2\alpha^2} \\
 \langle p^2 \rangle_\mu &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\mu^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \psi_\mu(x) dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\mu^*(x) (-\alpha^2 + \alpha^4 x^2) \psi_\mu(x) dx \\
 &= \hbar^2 \alpha^2 - \hbar^2 \alpha^4 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\alpha^2 x^2) dx \\
 &= \hbar^2 \alpha^2 - \hbar^2 \alpha^4 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} 2 \frac{1}{2\alpha^3} \Gamma(3/2) = \frac{1}{2} \hbar^2 \alpha^2 \\
 \langle p^2 \rangle_\nu &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\nu^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \phi_\nu(x) dx \\
 &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\nu^*(x) (-3\alpha^2 + \alpha^4 x^2) \phi_\nu(x) dx \\
 &= 3\hbar^2 \alpha^2 - \hbar^2 \alpha^4 \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(-\alpha^2 x^2) dx \\
 &= 3\hbar^2 \alpha^2 - \hbar^2 \alpha^4 \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} 2 \frac{1}{2\alpha^5} \Gamma(5/2) = \frac{3}{2} \hbar^2 \alpha^2
 \end{aligned}$$

som gir

$$\begin{aligned}
 \Delta x_\mu \Delta p_\mu &= \sqrt{\langle x^2 \rangle_\mu \langle p^2 \rangle_\mu} = \sqrt{\frac{1}{2\alpha^2} \frac{1}{2} \hbar^2 \alpha^2} = \frac{1}{2} \hbar \\
 \Delta x_\nu \Delta p_\nu &= \sqrt{\langle x^2 \rangle_\nu \langle p^2 \rangle_\nu} = \sqrt{\frac{3}{2\alpha^2} \frac{3}{2} \hbar^2 \alpha^2} = \frac{3}{2} \hbar
 \end{aligned}$$

Oppgave 5.7, Eksamen V-1993

Vi skal i denne oppgaven studere det kvantemekaniske problem med en partikkel som beveger seg langs x -aksen med en potensiell energi $V(x)$. Partikkelen har masse m .

- Sett opp den tidsavhengige Schrödingerligningen for systemet som bestemmer bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$.
- Vis at $\Psi(x, t)$ kan skrives på formen $\Psi(x, t) = \psi(x) \phi(t)$. Finn $\phi(t)$ og ligningen som bestemmer $\psi(x)$.

Vi velger nå den potensielle energi som

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ +\infty & x \geq a \end{cases}$$

- c) Finn energi egenverdiene og de normerte energi egenfunksjonene $\psi(x)$.
- d) Bestem middelveiden (forventningsverdien) for \hat{x} og \hat{x}^2 samt middelveiden for bevegelsesmengden \hat{p} og \hat{p}^2 .
- e) Formul  Heisenbergs uskarphetsrelasjon og regn den ut for grunntilstanden i systemet. Vis at dette eksemplet er i overensstemmelse med det generelle prinsipp.

Ved tiden $t = 0$ er systemet i en tilstand beskrevet ved b lgefunksjonen

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) - \psi_2(x)).$$

hvor $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ er de to laveste normerte egentilstandene for systemet.

- f) Bestem systemets tilstand $\Psi(x, t)$ og beregn forventningsverdiene av \hat{x} i denne tilstanden.

L sning

- c) Ligningen for $\psi(x)$ kan skrives p  formen

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \psi(x) = 0,$$

for $0 \leq x \leq a$ og med $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. L sningen har formen

$$\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx).$$

Randbetingelsen for $x = 0$ gir $A + B = 0$, eller $A = -B$, og

$$\psi(x) = A (\exp(ikx) - \exp(-ikx)) = A' \sin(kx).$$

Randbetingelsen for $x = a$ gir $\psi(a) = 0 \longrightarrow \sin(ka) = 0$ med resultat $k_n a = n\pi$, $n = 1, 2, 3, \dots$ Kvantebetingelsen for energi egenverdiene blir

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2 m} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Normering av energi egenfunksjonene

$$(A')^2 \int_0^a \sin^2(k_n x) dx = \frac{a}{2} (A')^2.$$

Dette gir $A' = \sqrt{2/a}$, og de normerte egenfunksjonene blir

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x).$$

- d) Middelveiden av x :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x \psi(x) dx = \frac{a}{2}$$

Middelverdien av x^2 :

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x^2 \psi(x) dx = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right)$$

Middelverdien av p er

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx = 0$$

og middelverdien av p^2

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 \psi(x) dx = \hbar^2 k_n^2$$

e) Heisenbergs uskarphetsrelasjon er $\Delta x \Delta p \geq (1/2)\hbar$, hvor $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2}$ og $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2}$. Fra d) får vi for grunntilstanden ($n = 1$)

$$\Delta x = a \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}}, \quad \Delta p = \frac{\hbar\pi}{a}, \quad \text{og} \quad \Delta x \Delta p = \hbar \sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \approx 0.57\hbar > \frac{\hbar}{2}$$

f) Systemets tilstand ved tiden t er

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sqrt{\frac{1}{a}} \left(\sin(k_1 x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) - \sin(k_2 x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right) \right) \\ &= \sqrt{\frac{1}{a}} \left(\sin\left(\frac{\pi}{a} x\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{a} x\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} 4E_1 t\right) \right). \end{aligned}$$

Middelverdien av x er gitt ved

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} + \frac{16a}{9\pi^2} \cos\left(\frac{3E_1}{\hbar} t\right).$$

Oppgave 5.8, Eksamen V-1996

Vi skal i denne oppgaven studere det kvantemekaniske problem med en partikkel i et harmonisk oscillator potensial. Partikkelen har masse m og den kvantemekaniske hamilton operatoren kan skrives på formen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

To av egentilstandene er gitt ved

$$\psi_k(x) = N \exp(-\alpha x^2), \quad \psi_l(x) = 2\sqrt{\alpha} x \psi_k(x)$$

- a) Vis at $\psi_k(x)$ og $\psi_l(x)$ er egenfunksjoner av \hat{H} og bestem α uttrykt ved oscillator parameteren ω . Finn de tilhørende energi egenverdier og vis at de følger formelen $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Bestem hvilke n -verdier som svarer til $\psi_k(x)$ og $\psi_l(x)$. Beregn normeringskonstanten N .

For egentilstander til den harmoniske oscillator gjelder generelt

$$\phi_n(-x) = (-1)^n \phi_n(x).$$

- b) Bruk relasjonen til å vise at middelveiden av posisjonen $\langle \hat{x} \rangle$ og bevegelsesmengden $\langle \hat{p}_x \rangle$ begge er null.

I det følgende skal vi studere hvordan systemet utvikler seg som funksjon av tiden t .

- c) Systemets tilstand ved $t = 0$ er gitt ved bølgefunksjonen $\psi_k(x, t = 0) = \psi_k(x)$. Forklar hvordan vi går frem for å bestemme funksjonen $\psi_k(x, t)$ for systemet og finn denne funksjonen.

Vi antar nå at systemet er i tilstanden $\psi_k(x, t)$ for $t \leq 0$. Ved tiden $t = 0$ får vi en momentan forandring av systemets potensielle energi $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \rightarrow \frac{1}{2}m(2\omega)^2 x^2$ slik at for $t > 0$ vil systemet være beskrevet ved en hamilton operator av formen

$$\hat{H}_{ny} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m(2\omega)^2 x^2.$$

- d) Finn de to laveste energi egentilstandene for \hat{H}_{ny} .

La oss angi alle energi egenfunksjonene for den nye hamilton operatoren \hat{H}_{ny} som $\phi_n(x)$.

- e) I pkt. d) fant vi funksjonen $\psi_k(x, t)$ for $t \leq 0$. Sett opp $\psi_k(x, t)$ for $t > 0$ uttrykt ved energi egenfunksjonene $\phi_n(x)$ for \hat{H}_{ny} .
- f) Beregn sannsynligheten for at systemet ved tiden $t = 0^+$ (et infinitesimalt tidspunkt etter $t = 0$) er i grunntilstanden for \hat{H}_{ny} . Hva er sannsynligheten for at systemet er i den første eksiterte tilstand for \hat{H}_{ny} ?
- g) Beregn $\langle \hat{x}^2 \rangle$, $\langle \hat{x} \rangle$ og den midlere energi $\langle \hat{E} \rangle$ ved tiden $t = 0^+$.
- h) Hvilke av de tre størrelsene beregnet i pkt. g) er uavhengig av tiden t for $t > 0$? Begrunn svaret.

Kort fasit

- a) $\psi_k(x)$ svarer til $n = 0$ og $\psi_l(x)$ til $n = 1$. $\alpha = (m\omega)/2\hbar$ og $N = ((m\omega)/(\hbar\pi))^{1/4}$.
- c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, eksempel side 233, $\psi_k(x, t) = \psi_k(x) \exp(-(i/\hbar)(\hbar\omega/2)t)$
- d) Vi får de to laveste løsningene ved å ta ψ_k og ψ_l fra pkt. a) og bytte ut ω med 2ω .
- e) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, eksempel side 233. Funksjonen $\psi_k(x)$ har paritet +1. For $t > 0$ får vi derfor

$$\psi_k(x, t) = \sum_{like\ n} c_n \phi_n(x) \exp(-(i/\hbar)E_n^{ny} t)$$

- f) Sannsynlighet for å finne systemet i grunntilstanden for \hat{H}_{ny} ved $t = 0^+$ blir

$$P_0 = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k(x, 0^+)^* \phi_0(x, 0^+) dx \right) = (8/9)^{1/2}$$

Sannsynlighet for å finne systemet i 1. eksiterte tilstand er null.

g) $\langle x^2 \rangle = 1/(4\alpha)$, $\langle x \rangle = 0$ og

$$\langle E \rangle = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha x^2) \hat{H}^{ny} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{7}{4} \hbar \omega$$

h) Vi bruker svaret i pkt. e) og få at middelverdien av en fysisk størrelse (operator) blir

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x, t)^* \hat{F} \phi_{n'}(x, t) dx \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_{n'} - E_n) t\right)$$

For $\hat{F} = \hat{H}^{ny}$ får vi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x, t)^* \hat{F} \phi_{n'}(x, t) dx = E_n^{ny} \delta_{n,n'}$$

og

$$\langle \hat{H}^{ny} \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n^{ny},$$

dvs. uavhengig av t . For $\hat{F} = x$ blir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x, t)^* x \phi_{n'}(x, t) dx = 0$$

siden integranden har paritet -1 og $\langle x \rangle$ blir tidsuavhengig. For $\hat{F} = x^2$ blir middelverdien avhengig av t .

Oppgave 5.9

En partikkel med masse m og energi E beveger seg langs x -aksen i potensialet

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 \leq x < L/2 \\ +\infty & x \geq L/2 \end{cases}$$

a) Vis at den laveste energi egenfunksjonen er gitt ved

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

for $0 < x < L/2$ og null ellers.

Plutselig blir den potensielle energien for partikkelen forandret til

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ +\infty & x \geq a \end{cases}$$

Vi antar at bølgefunksjonen umiddelbart etter forandringen er den samme som før forandringen (bølgefunksjonen er kontinuert i tiden).

b) Hvis vi gjør en måling av systemets energi før forandringen, vil vi da få en skarp verdi (samme verdi om vi måler på mange identiske systemer)? Får vi en skarp verdi for energien om vi gjør målingen etter forandringen?

- c) Beregn sannsynligheten for at partikkelen er i den første eksiterte egentilstand ($n = 2$) for systemet etter forandringen.
- d) Hva er sannsynligheten for at partikkelen er i grunntilstanden ($n = 1$) for systemet etter forandringen?
- e) Vil energien av systemet være bevart ved en slik forandring av den potensielle energien? Hva skjer med $\langle \hat{E} \rangle$ ved forandringen?

Oppgave 5.10, Eksamen V-1999

En partikkel med masse m beveger seg i et tre-dimensjonalt sentralpotensial av formen

$$V(r) = V_0 r^k a^{-k},$$

hvor V_0 , a og k er konstanter og r er partikkelens avstand fra origo. Konstanten k er heltallig og kan anta verdiene $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

- a) Hvilken dimensjon må a og V_0 ha dersom vi forlanger at disse dimensjonene skal gjelde for alle verdier av k ?

Vi skal først betrakte systemet ved bruk av klassisk mekanikk og antar at partikkelen beveger seg i sirkulære baner.

- b) Vis at partikkelens hastighet er gitt ved

$$v^2 = V_0 \frac{k}{m} \left(\frac{r}{a} \right)^k.$$

For denne type potensiell energi har vi følgende sammenheng mellom partikkelens kinetiske energi T og den potensielle energi V

$$2T = kV.$$

- c) Sett opp Bohrs kvantiseringsbetingelse. Bruk denne betingelsen og finn partikkelens totale energi som funksjon av kvantetallet n .

I resten av denne oppgaven skal vi bruke Schrödingers kvantemekaniske beskrivelse. Anta at vi nå har et d -dimensjonalt system og erstatt r med x .

- d) Sett opp Schrödingers energi egenverdiligning for dette tilfellet og med $k = 2$ (harmonisk oscillator).

Bølgefunksjonen for grunntilstanden er i dette tilfelle gitt på formen

$$\Psi(x) = C \exp(-\alpha x^2),$$

hvor α er en konstant og C er normaliseringskonstanten bestemt av ligningen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx = 1.$$

- e) Normalisér $\Psi(x)$ og beregn grunntilstandsenergien $E_0(\alpha)$ som funksjon av α . Finn den verdien av α som gir lavest energi og den tilsvarende grunntilstandsenergien.

f) Vis at $\langle \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{x} \rangle = 0$ i dette tilfelle.

Uskarpheten for den fysiske størrelsen A er gitt ved $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

g) Uttrykk grunntilstandsenergien for den harmoniske oscillator fra d) ved hjelp av Δp og Δx . Formulér Heisenbergs uskarphetsrelasjon og gi en fysisk forklaring på de størrelser som inngår. Bruk denne relasjonen til å vise at den laveste energien som systemet kan ha er gitt ved

$$E_{\min} = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{V_0}{2m}}.$$

Sammenlign med resultat fra e) og kommentér.

Løsning

a) Dimensjonen av V_0 og a skal være uavhengig av k . Hvis vi skriver den potensielle energien på formen

$$V(r) = V_0 \left(\frac{r}{a} \right)^k$$

må (r/a) være ubenevnt. Dette gi a dimensjon lengde. Siden $V(r)$ skal ha dimensjon energi, følger at V_0 må ha dimensjon energi.

b) For klassisk sirkulær bevegelse har vi

$$K_r = -\frac{dV(r)}{dr} = -\frac{mv^2}{r}$$

Dette gir

$$k \cdot V_0 r^{k-1} \cdot a^{-k} = \frac{mv^2}{r} \quad \longrightarrow \quad v^2 = V_0 \frac{k}{m} \left(\frac{r}{a} \right)^k$$

c) Bohrs kvantiseringsbetingelse: $L = n\hbar$. For sirkulær bevegelse gir dette $L = rmv = n\hbar$. Partikkelens totale energi bli da

$$\begin{aligned} E &= T + V = \frac{1}{2}mv^2 + V_0 \left(\frac{r}{a} \right)^k = \frac{1}{2}mV_0 \frac{k}{m} \left(\frac{r}{a} \right)^k + V_0 \left(\frac{r}{a} \right)^k \\ &= \left(\frac{k}{2} + 1 \right) V_0 \left(\frac{r}{a} \right)^k \end{aligned}$$

Vi eliminerer r og v fra Bohr kvantiseringsbetingelse

$$\begin{aligned} r \cdot m \cdot \left(V_0 \frac{k}{m} \right)^{1/2} \left(\frac{r}{a} \right)^{k/2} &= n\hbar \\ \left(\frac{r}{a} \right)^{\frac{k}{k+2}} (V_0 m k)^{1/2} &= \frac{n\hbar}{a} \\ \left(\frac{r}{a} \right)^{k+2} &= \left(\frac{n\hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{V_0 m k} \\ \left(\frac{r}{a} \right)^k &= \left(\frac{n^2 \hbar^2}{a^2 V_0 m k} \right)^{\frac{k}{k+2}} \end{aligned}$$

Dette gir

$$E = \left(\frac{k+2}{2} \right) V_0 \left(\frac{n^2 \hbar^2}{a^2 V_0 m k} \right)^{\frac{k}{k+2}}$$

d) Schrödingers energi egenverdiligning blir

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V_0 \left(\frac{x}{a} \right)^k \Psi(x) &= E \Psi(x) \\ \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2 a^2} x^2 \right) \Psi(x) &= 0 \end{aligned}$$

e) Normalisering

$$1 = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = C^2 \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt = C^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \quad (\text{Rottman side 155})$$

som gir $C = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{1/4}$.

Bølgefunksjonen er avhengig av parameteren α . Partikkelens energi blir da en funksjon av α .

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \hat{H} \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right\} \Psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha) + \frac{V_0}{a^2} x^2 \right\} |\Psi(x)|^2 dx \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha}{m} + \left(\frac{V_0}{a^2} - \frac{2\hbar^2 \alpha^2}{m} \right) C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha}{m} + \left(\frac{V_0}{a^2} - \frac{2\hbar^2 \alpha^2}{m} \right) \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \cdot \frac{1}{4\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha}{m} + \left(\frac{V_0}{a^2} - \frac{2\hbar^2 \alpha^2}{m} \right) \frac{1}{4\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{2m} + \frac{V_0}{4a^2 \alpha} \end{aligned}$$

Minimum $E(\alpha)$ bestemmes ved

$$\frac{d}{d\alpha} E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{V_0}{4a^2 \alpha^2} = 0$$

med løsning

$$\alpha_{min} = \frac{1}{\hbar a} \sqrt{\frac{m V_0}{2}} \quad \rightarrow \quad E_{min} = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{V_0}{2m}}$$

f) For enkelte funksjoner gjelder følgende

$$f(x) = -f(-x) \quad \text{som gir} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 0 \quad \text{odde funksjon – minus paritet}$$

Dette kan vi bruke til å beregne $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$. Vi får

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \cdot x \cdot \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x)|^2 dx = 0 \\ \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) (-i\hbar) \frac{d\Psi(x)}{dx} dx = 0 \end{aligned}$$

siden begge integrandene er odde funksjoner.

g) Fra f) følger at $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ og

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \cdot x^2 \cdot \Psi(x) dx = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \frac{1}{4\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = \frac{1}{4\alpha}$$

som gir

$$\Delta x = \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}$$

og

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 \Psi(x) dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha) |\Psi(x)|^2 dx \\ &= 2\alpha\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx - 4\alpha^2\hbar^2 C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx = 2\alpha\hbar^2 - \alpha\hbar^2 = \alpha\hbar^2 \end{aligned}$$

som gir

$$\Delta p = \hbar\sqrt{\alpha}$$

Heisenbergs uskarphetsrelasjon blir da

$$\Delta p \cdot \Delta x = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\alpha}} \cdot \hbar\sqrt{\alpha} = \frac{\hbar}{2}$$

Middelverdien av partikkelens energi

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \frac{p^2}{2m} + \frac{V_0}{a^2} x^2 \rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \frac{V_0}{a^2} \langle x^2 \rangle \\ &= \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{V_0}{a^2} (\Delta x)^2 \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{2\Delta x} \right)^2 + \frac{V_0}{a^2} (\Delta x)^2 \end{aligned}$$

Vi minimaliserer $\langle E \rangle$ med hensyn på Δx . Dette gir

$$\frac{d\langle E \rangle}{d(\Delta x)} = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{-2}{\Delta x^3} \right) + 2\frac{V_0}{a^2} \Delta x = 0$$

som gir

$$(\Delta x_{min})^4 = \frac{\hbar^2 a^2}{8mV_0} \quad \rightarrow \quad (\Delta x_{min})^2 = \frac{\hbar a}{2} \sqrt{\frac{1}{2mV_0}}$$

og energi minimum blir

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{2}{\hbar a} \sqrt{2mV_0} + \frac{V_0}{a^2} \frac{\hbar a}{2} \frac{1}{\sqrt{2mV_0}} = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{V_0}{2m}}$$

Denne verdien svarer til E_{min} beregnet i punkt e) og som er systemets grunntilstandsenergi. Vi kan da si at grunntilstanden svarer til en maksimal lokalisering av partikkelens posisjon som Heisenbergs uskarphetsrelasjon tillater.

Kapittel 6

KVANTEMEKANISK TUNNELING

Vi skal i dette avsnittet presentere en detaljert løsning av Schrödingerlikningen anvendt på partikler som treffer en potensialbarriere. Problemet dekker et spesielt kvantemekanisk fenomen som kalles **tunneling**¹ og har mange anvendelser i moderne mikrofysikk. Spesielt skal vi anvende resultatene på henfall av α -partikler og relatere dette til levetid for kjerner som henfaller ved denne type prosesser.

Tunneling har avfødt flere Nobel-priser i fysikk, til Leo Esaki for tunneling i halvledere, Ivar Gjæver (eneste norske Nobelpris i fysikk) for tunneling i supraledere, Brian Josephson for tunneling av parrede elektroner i supraledere (alle i 1973) og Gerd Binnig og Heinrich Rohrer for oppfinnelsen av 'scanning-tunneling' elektron mikroskop i 1986. I tillegg er tunneling et viktig tema i halvlederteknologi.

6.1 Klassisk spredning mot potensialbarriere

Vi starter med å formulere et klassisk fysisk problem hvor en strøm av partikler hver med masse m beveger seg langs x -aksen. De starter i $x = -\infty$ med energi E og hastighet $v = +\sqrt{2E/m}$. Partiklene beveger seg uten vekselvirkning i området $-\infty < x < 0$. I $x = 0$ treffer partiklene en potensialbarriere gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ \frac{V_0}{2} \left(\sin\left(\frac{2\pi}{L}x - \frac{\pi}{2}\right) + 1 \right) & \text{for } 0 \leq x < L \\ 0 & x \geq L \end{cases}$$

Det potensielle energien har sitt maksimum ved $x = \pi/2$, $V(\pi/2) = V_0$. For den videre bevegelse av partiklene må vi skille mellom to tilfeller:

- $E < V_0$: Ingen partikler har nok kinetisk energi til å passere potensialbarrieren. De vil stoppe og returnere mot $x = -\infty$ med hastighet $v = -\sqrt{2E/m}$. Vi får en stråle av partikler mot høyre med $v = +\sqrt{2E/m}$ og en reflektert stråle av partikler mot venstre med $v = -\sqrt{2E/m}$. Ingen partikler passerer potensialbarrieren.
- $E > V_0$: Partiklene har nok kinetisk energi til å passere potensialbarrieren. De vil fortsette inn i området $x > L$ med samme hastighet $v = +\sqrt{2E/m}$. Vi får ingen reflektert stråle av partikler for $x < 0$.

Dette er en velkjent fysisk situasjon og lett å analysere ut fra klassisk fysikk. Vi skal nå studere den samme situasjonen kvantemekanisk og analysere den ut fra Schrödingerlikningen.

¹Lesehenvising: kap 5-9 i boka, sidene 271-283.

6.2 Kvantemekanisk barrierespredning

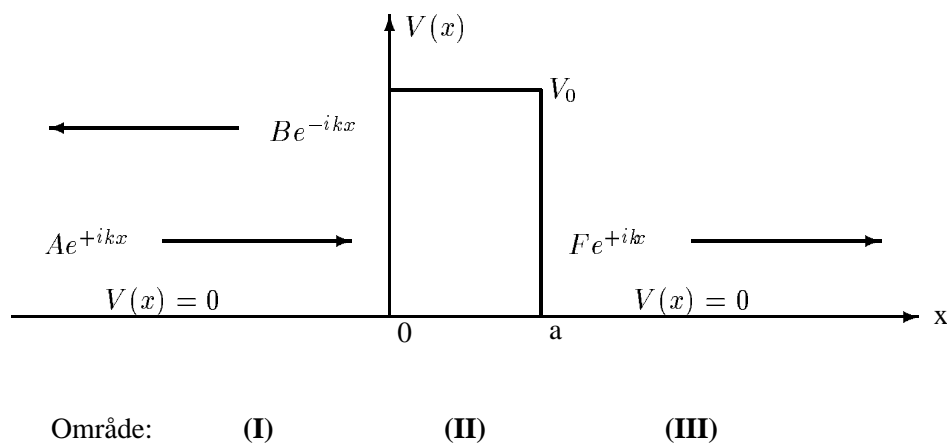
Vi forenkler situasjonen noe ved å velge en rektangulær potensialbarriere gitt på formen

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ 0 & x \geq a \end{cases} \quad (6.1)$$

som skissert i Figur 6.1. Den tidsavhengige Schrödingerlikningen blir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (6.2)$$

Vi løser likningen ved å dele opp intervallet for x i tre områder som angitt i Figur 6.1.



Figur 6.1:

6.2.1 Område I: $-\infty < x < 0$.

I dette tilfelle får likning (6.2) formen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_I(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_I(x, t), \quad (6.3)$$

med løsning

$$\Psi_I(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}. \quad (6.4)$$

Bølgefunksjonen $\Psi_I(x, t)$ er en sum av to plane bølger, begge har frekvens ω og energi $E = \hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m$. Den første komponenten, proporsjonal med A , beveger seg fra venstre mot høyre (bølgetall k) og er den innkommende primære bølge. Den andre komponenten, proporsjonal med B , beveger seg fra høyre mot venstre (bølgetall $-k$) og representerer en reflektert bølge fra potensialbarrieren $V(x)$ i $x = 0$. Begge komponentene er angitt i Figur 6.1 for tiden $t = 0$. Dette er analogt med bevegelse av elektromagnetiske bølger hvor vi får refleksjon i en overgang mellom to forskjellige medier, her representert ved en potensialbarriere.

For å beskrive intensiteten av partikler i strålen bruker vi begrepet fluks, dvs. antall partikler som passerer en enhetsflate per sekund. Antall partikler som reflekteres i $x = 0$ i forhold til antall partikler i den innkommende stråle defineres som **refleksjonskoeffisienten** og betegnes med symbolet R . Dette gir

$$R = \frac{\text{fluks mot venstre}}{\text{fluks mot høyre}} = \frac{v|B|^2}{v|A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}. \quad (6.5)$$

I en bølgeterminologi er R den delen av den innkommende bølgen som blir reflektert av potensialbarrieren. I et partikkelbilde blir R å tolke som sannsynligheten for at en partikkel som kommer inn fra venstre, blir reflektert.

6.2.2 Område II: $0 < x < a$.

I dette tilfellet får likning (6.2) formen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_{II}(x, t) + V_0 \Psi_{II}(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{II}(x, t), \quad (6.6)$$

med løsning

$$\Psi_{II}(x, t) = C e^{i(k'x - \omega t)} + D e^{-i(k'x + \omega t)}. \quad (6.7)$$

Her må vi skille mellom : a) $E < V_0$ og b) $E > V_0$. I tilfelle a) blir k' rent imaginær, dvs. at $k' = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2} = i\alpha$, med $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$.

I tilfelle b) er $k' = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$, og løsningene blir av samme type som for område I, men med bølgetall k' . Vi vil i det følgende begrense oss til tilfelle a). Da kan vi omforme bølgefunksjonen i likning (6.7) til

$$\Psi_{II}(x, t) = C e^{-\alpha x - i\omega t} + D e^{\alpha x - i\omega t}. \quad (6.8)$$

Vi har nå fått løsningene av Schrödingers likning for områdene I og II. I overgangen $x = 0$ må den endelige bølgefunksjonen være kontinuerlig og ha en kontinuerlig derivert. Dette gir følgende betingelser for $t = 0$

$$A + B = C + D \quad \text{og} \quad ik(A - B) = -\alpha(C - D). \quad (6.9)$$

Bølgefunksjonen Ψ_{II} er en eksponentielt avtagende funksjon i det klassiske forbudte området. Før vi diskuterer konsekvensene av disse betingelsene, skal vi løse Schrödingerlikningen i området III.

6.2.3 Området III: $a < x < +\infty$

Her får likning (6.2) formen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_{III}(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{III}(x, t), \quad (6.10)$$

med løsning

$$\Psi_{III}(x, t) = F e^{i(kx - \omega t)} + G e^{-i(kx + \omega t)}, \quad (6.11)$$

med $k = \sqrt{2m(E)/\hbar^2}$. Legg merke til k i område I og III er like. Til slutt i dette avsnittet skal vi også se på tilfellet hvor de er ulike. Bølgefunksjonen $\Psi_{III}(x, t)$ må forstås analogt til $\Psi_I(x, t)$ som en sum av to plane bølger. Den første komponenten, proporsjonal med F , beveger seg fra venstre mot høyre (bølgetall k). Den andre bølgen, proporsjonal med G , beveger seg fra høyre mot venstre (bølgetall $-k$). Vi har ingen potensialbarriere til høyre for $x = a$. Det vil da ikke kunne oppstå noen reflektert bølge, og vi må kreve $G = 0$. likning (6.11) reduseres til

$$\Psi_{III}(x, t) = F e^{i(kx - \omega t)}. \quad (6.12)$$

Vi har nå løsningene av Schrödingers likning for området III. I overgangen $x = a$ må den endelige bølgefunksjonen være kontinuerlig og ha en kontinuerlig derivert. Dette gir følgende betingelser for $t = 0$

$$Ce^{-\alpha a} + De^{\alpha a} = Fe^{ika} \quad \text{og} \quad \alpha(-Ce^{-\alpha a} + De^{\alpha a}) = ikFe^{ika}. \quad (6.13)$$

6.2.4 Det totale løsnings.

Vi har løst Schrödingers likning i alle tre intervallene. I overgangene mellom de tre områdene får vi betingelsene gitt i likningene (6.9) og (6.13). Disse likningene kan vi sammenfatte til

$$\begin{aligned} A + B &= C + D & \text{og} & \quad ik(A - B) = -\alpha(C - D) \\ Ce^{-\alpha a} + De^{\alpha a} &= Fe^{ika} & \text{og} & \quad \alpha(-Ce^{-\alpha a} + De^{\alpha a}) = ikFe^{ika}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Dette er fire likninger med fem ukjente, og vi kan kun bestemme fire av de ukjente, da i forhold til den femte. I vårt tilfelle vil det være naturlig å bestemme B, C, D, F i forhold til A som angir intensiteten av den primære partikkelstrålen. Dette gir

$$\begin{aligned} 1 + \frac{B}{A} &= \frac{C}{A} + \frac{D}{A} & \text{og} & \quad ik(1 - \frac{B}{A}) = -\alpha(\frac{C}{A} - \frac{D}{A}) \\ \frac{C}{A}e^{-\alpha a} + \frac{D}{A}e^{\alpha a} &= \frac{F}{A}e^{ika} & \text{og} & \quad \alpha(-\frac{C}{A}e^{-\alpha a} + \frac{D}{A}e^{\alpha a}) = ik\frac{F}{A}e^{ika}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Til å angi hvor mange partikler som trenger gjennom barrieren defineres **Transmisjonskoeffisienten T** ved

$$T = \frac{\text{fluks mot høyre i området III}}{\text{fluks mot høyre i området I}} = \frac{v_{III}|F|^2}{v_I|A|^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}, \quad (6.16)$$

siden vi har at k i område I og III er like, noe som medfører at hastighetene i områdene I og III er like.

6.3 Spesialtilfeller

I de foregående underavsnittene har vi sett på de generelle likningene for barrieregjennomtrengning. La oss nå se på et spesialtilfelle hvor $a \rightarrow \infty$, dvs. at potensialbarrieren har uendelig utstrekning.

I dette tilfelle er det kun områdene I og II som er av interesse.

6.3.1 Tilfellet $E < V_0$

For område II kan vi ikke ha løsningene med $De^{\alpha x}$ da det innebærer at egenfunksjonen ψ_{II} vil divergere. Det betyr igjen at konstanten $D = 0$ slik at vi får

$$\Psi_{II}(x, t) = Ce^{-\alpha x - i\omega t}. \quad (6.17)$$

Siden $E < V_0$ blir k' rent imaginær, $k' = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2} = i\alpha$ med $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$. Likning (6.9) blir da

$$A + B = C \quad \text{og} \quad ik(A - B) = -\alpha C \quad (6.18)$$

som kan omskrives som

$$\frac{C}{A} = \frac{B}{A} + 1, \quad (6.19)$$

og

$$\frac{C}{A} = i\frac{k}{\alpha}\left(\frac{B}{A} - 1\right), \quad (6.20)$$

som gir

$$\frac{C}{A} = \frac{2k^2 + 2ik\alpha}{k^2 + \alpha^2}, \quad (6.21)$$

og

$$\frac{B}{A} = \frac{k^2 - \alpha^2 + 2ik\alpha}{k^2 + \alpha^2}. \quad (6.22)$$

Bruker vi definisjonen på refleksjonskoeffisienten gitt ved

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{B^* B}{A^* A}, \quad (6.23)$$

finner vi at $R = 1$, dvs. alle partiklene blir reflektert, som forventet utifra klassisk fysikk. Men, bølgefunksjonen i område II trenger inn i det klassisk forbudte området. Det er nytt, og er sjølve årsaken til at vi kan ha kvantemekanisk barrieregjennomtrengning.

6.3.2 Tilfellet $E > V_0$

La oss gjenta beregningen, men denne gangen for $E > V_0$. Da blir α imaginær, og vi setter $\alpha = i\gamma$. Det gir oss

$$\frac{C}{A} = \frac{2k^2 - 2k\gamma}{k^2 - \gamma^2}, \quad (6.24)$$

og

$$\frac{B}{A} = \frac{k^2 + \gamma^2 - 2k\gamma}{k^2 - \gamma^2}. \quad (6.25)$$

I dette tilfellet blir refleksjonskoeffisienten

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k - \gamma}{k + \gamma} \right)^2 < 1, \quad (6.26)$$

dvs. at ikke alle partiklene blir reflektert. Hva har skjedd? Partiklene kan ikke ha blitt borte! For å løse dette mysteriet trenger vi også å bruke transmisjonskoeffisienten, dvs. hvor mange partikler som passerer barrieren ved $x = 0$ i økende x -retning. Vi definerer denne koeffisienten som

$$T = \frac{\text{fluks ut}}{\text{fluks inn}} = \frac{v'|C|^2}{v|A|^2}, \quad (6.27)$$

med

$$v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}, \quad (6.28)$$

og

$$v' = \frac{\hbar \gamma}{m}, \quad (6.29)$$

slik at T blir

$$T = \frac{\gamma}{k} \left(\frac{2k}{k + \gamma} \right)^2 = \frac{4k\gamma}{(k + \gamma)^2}. \quad (6.30)$$

Summen $R + T$ bør helst være 1, ellers er ikke partikkeltallet bevart. Setter vi inn for R finner vi

$$R + T = \left(\frac{k - \gamma}{k + \gamma} \right)^2 + \frac{4k\gamma}{(k + \gamma)^2} = 1, \quad (6.31)$$

som berger oss fra brudd på partikkelbevaring.

6.3.3 Transmisjon gjennom hele barrieren for $E < V_0$

Nå skal vi forsøke å løse likning (6.15). I dette tilfelle kan vi ikke sette $D = 0$, da barrieren har ei endelig utstrekning. Målsettinga er å finne både transmisjonskoeffisienten T og refleksjonskoeffisienten R . Som tidligere nevnt så uttrykker f.eks. T sannsynligheten for at partikkelen kan tunnelere gjennom barrieren. Vi skal også anta, reint midlertig for symmetrien i likningene, at konstanten G også er forskjellig fra null. Vi skal omskrive likning (6.14) som en matriselikning, noe som gir en elegant måte å løse sistnevnte likning. La oss først ta utgangspunkt i likningene som kopler sammen egenfunksjonene i område I og II, dvs. ved $x = 0$. Vi har da

$$A + B = C + D \quad \text{og} \quad ik(A - B) = -\alpha(C - D), \quad (6.32)$$

hvor vi kan finne en likning for hhv. A og B ved å sette først

$$B = C + D - A, \quad (6.33)$$

som gir

$$2ikA = (ik - \alpha)C + (ik + \alpha)D. \quad (6.34)$$

Tilsvarende finner vi

$$-2ikB = -(ik + \alpha)C + (\alpha - ik)D, \quad (6.35)$$

når vi bruker $A = C + D - B$. De nye likningene for A og B kan vi sammenfatte som en matrise gitt ved

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{1}{2ik} \begin{bmatrix} ik - \alpha & ik + \alpha \\ ik + \alpha & ik - \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}. \quad (6.36)$$

På tilsvarende vis kan vi omforme likningene ved $x = a$

$$Ce^{-\alpha a} + De^{\alpha a} = Fe^{ika} + Ge^{ika} \quad (6.37)$$

og

$$\alpha(-Ce^{-\alpha a} + De^{\alpha a}) = ikFe^{ika} - ikGe^{-ika}, \quad (6.38)$$

til

$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \frac{1}{2\alpha} \begin{bmatrix} -(ik - \alpha)e^{(ik+\alpha)a} & (ik + \alpha)e^{-(ik-\alpha)a} \\ (ik + \alpha)e^{(ik-\alpha)a} & -(ik - \alpha)e^{-(ik+\alpha)a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}. \quad (6.39)$$

Insetting av likning (6.39) i likning (6.36) gir en likning som relaterer A og B til F og G . Vi finner en matrise likning gitt ved

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}. \quad (6.40)$$

Setter vi så $G = 0$ siden vi ikke har en reflektert bølge i område III, har vi

$$A = M_{11}F, \quad (6.41)$$

og

$$B = M_{21}F, \quad (6.42)$$

som igjen betyr at transmisjonskoeffisienten er gitt ved

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{|M_{11}|^2} = \frac{1}{M_{11}^* M_{11}}, \quad (6.43)$$

siden vi har satt $k_I = k_{III}$, som følger av at potensialbarrieren er null i områdene I og III. Utifra likningene (6.36) og (6.39) kan vi f.eks. bestemme M_{11}

$$M_{11} = -\frac{ik - \alpha}{2\alpha} \frac{ik - \alpha}{2ik} e^{(ik+\alpha)a} + \frac{ik + \alpha}{2ik} \frac{ik + \alpha}{2\alpha} e^{(ik-\alpha)a}, \quad (6.44)$$

som kan omskrives til

$$M_{11} = \left(\cosh(\alpha a) - \frac{i}{2} \frac{k^2 - \alpha^2}{k\alpha} \sinh(\alpha a) \right) e^{ika}. \quad (6.45)$$

Transmisjonskoeffisienten blir dermed

$$T = \frac{1}{\left(\cosh^2(\alpha a) + \frac{(k^2 - \alpha^2)^2}{4k^2\alpha^2} \sinh^2(\alpha a) \right)}, \quad (6.46)$$

eller

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 + \alpha^2)^2}{4k^2\alpha^2} \sinh^2(\alpha a)}. \quad (6.47)$$

På tilsvarende vis kan vi finne refleksjonskoeffisienten gitt ved (vis dette)

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\frac{(\alpha^2 + k^2)^2}{4k^2\alpha^2} \sinh^2(\alpha a)}{1 + \frac{(k^2 + \alpha^2)^2}{4k^2\alpha^2} \sinh^2(\alpha a)}, \quad (6.48)$$

slik at $T + R = 1$, slik det bør være.

6.3.4 Transmisjon gjennom hele barrieren for $E > V_0$

Hva med tilfellet hvor den kinetiske energien til partikkelen er større enn verdien på barrieren?

Vi kan bruke resultatet fra likning (6.47) med det unntak at nå er α gitt ved $\alpha = -ik'$. Innsetting av bølgetallet k' i likning (6.47) gjør at \sinh -leddet går over til et \sin -ledd. Det eneste vi trenger å gjøre er altså å erstatte α med $-ik'$. Transmisjonskoeffisienten er dermed

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 - k'^2)^2}{4k^2k'^2} \sin^2(k'a)}. \quad (6.49)$$

Når $\sin(k'a) = 0$, dvs. $k'a = n\pi$, n heltall, ser vi at T har sin maksimale verdi $T = 1$. Det betyr igjen at ingen partikler blir reflektert siden summen av $R + T = 1$. Slike egenskaper har konkrete anvendelser i halvlederteknologi.

Figur 6.3.4 viser et plott av T for ulike forhold mellom E og V_0 . I plottet har vi valgt å sette $a = 1$, $m = 1$, $\hbar = 1$ og $V_0 = 1$, for enkelthets skyld. Da reduserer likning (6.47) seg til for $E < V_0$

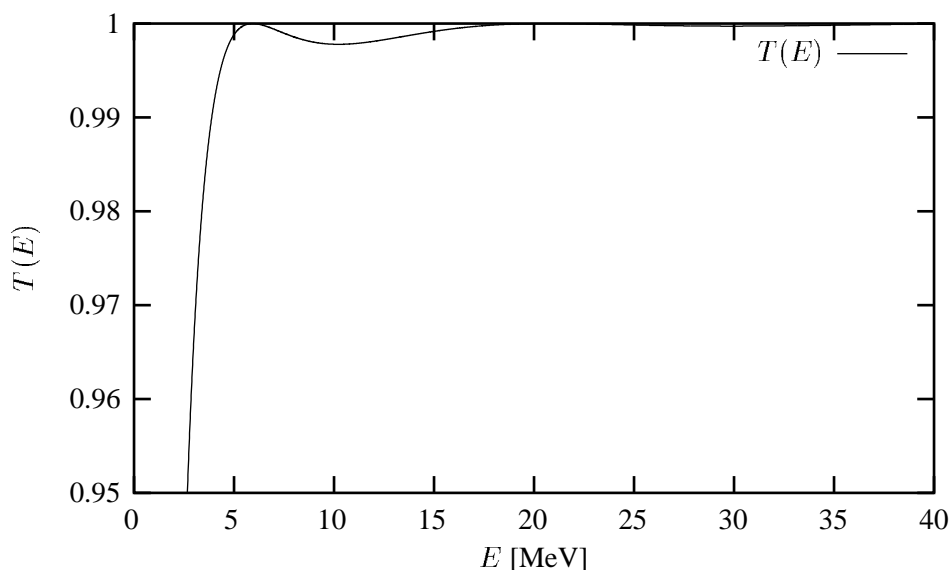
$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4E(1-E)} \sinh^2(\sqrt{2(1-E)})}, \quad (6.50)$$

og for $E > V_0$ til

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4E(E-1)} \sin^2(\sqrt{2(E-1)})}. \quad (6.51)$$

Fra det analytiske uttrykket ser vi at første maksimum for T , kalles for resonans, forekommer når

$$(k'a)^2 = 2(E - 1) = \pi^2, \quad (6.52)$$



Figur 6.2: Transmisjonskoeffisienten som funksjon av kinetisk energi E . Legg merke til at vi kun plotter T for verdier nær 1. For $E < 1$, gjelder likning (6.47).

dvs.

$$E = \frac{\pi^2 + 1}{2} = 5.43, \quad (6.53)$$

som stemmer overens med figuren. Neste resonans skjer ved $E = 20.24$. For større verdier av E vil leddet

$$\frac{1}{4E(E-1)},$$

i nevneren for $T(E)$ gå mot null, og dermed får vi at $T(E) \rightarrow 1$.

6.4 Anvendelser

6.4.1 Henfall av α -partikler

Konkret skal vi på henfall av α -partikler².

I denne analysen skal vi anta at $\alpha a \gg 1$, som betyr at vi ser på kinetiske energier E som er tilstrekkelig mindre enn potensialbarrieren. For henfall av α -partikler er dette tilfelle. Typiske kinetiske energier for den emitterte α -partikkelen er på ca. 4-9 MeV, mens potensialbarrieren som settes opp av Coulombpotensialet (se nedenfor for beskrivelse av prosessen) er på ca. 30 MeV.

Vi definerer gjennomtrengningskonstanten δ ved

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}, \quad (6.54)$$

²For mer informasjon om henfall av α -partikler, se kap 15-3 i boka, sidene 751-759.

slik at uttrykket for T kan forenkles når vi antar $\alpha a \gg 1$ til

$$T \approx \left(\frac{4k\delta}{1 + \delta^2 k^2} \right) e^{-2a/\delta} \quad (6.55)$$

med

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (6.56)$$

og

$$\delta^2 k^2 = \frac{E}{V_0 - E}. \quad (6.57)$$

Som oppvarming for studiet av α -partikkel henfall, ser vi på et eksempel med en idealisert potensialbarriere. To ledende koppestråder er adskilt av et isolerende oksydlag av CuO. Vi modellerer dette oksydlaget som en kasseforma barriere med verdien $V_0 = 10$ eV. Deretter gir vi elektronene en kinetisk energi 7 eV. Velger vi en barriere på henholdsvis a) 5 nm og b) 1 nm, stiller vi oss spørsmålet om hva T blir. I dette tilfellet ser vi at $\alpha a \gg 1$ slik at vi finner

$$(k\delta)^2 = \frac{7}{10 - 7} = 2.33, \quad (6.58)$$

og med $\hbar c = 197$ eVnm og $m_e c^2 = 511$ keV, finner vi at $\delta = 0.113$ nm, dvs. at gjennomtrengningsdybden er alltid mindre enn barrieren. Ser vi på tilfellet a) finner vi at $T = 0.98 \times 10^{-38}$ mens b) gir $T = 0.66 \times 10^{-7}$. Ei forandring på utstrekning av barrieren på 4 nm gir ei forandring i sannsynlighet for tunneling på 31 størrelsesordener. Dette resultatet gir oss et aldri så lite hint om mulige forklaringer på de store forskjellene i levetid for kjerner som henfaller ved utsending av α -partikkel. Årsaken er at halveringstida for en kerne er omvendt proporsjonal med transmisjonskoeffisienten.

Vi foretar en ytterlige approksimasjon i vår analyse av α -partikkel henfall, nemlig

$$T \approx e^{-2a/\delta} \quad (6.59)$$

Vi kan også skrive T fullt ut

$$T \approx e^{-2a\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar}. \quad (6.60)$$

Vi ser at transmisjonskoeffisienten avhenger av både potensialbarrierens utstrekning og gjennomtrengningskonstanten δ .

Har vi et potensial som avhenger av x over et område $[a, b]$ kan vi approksimere siste likning med

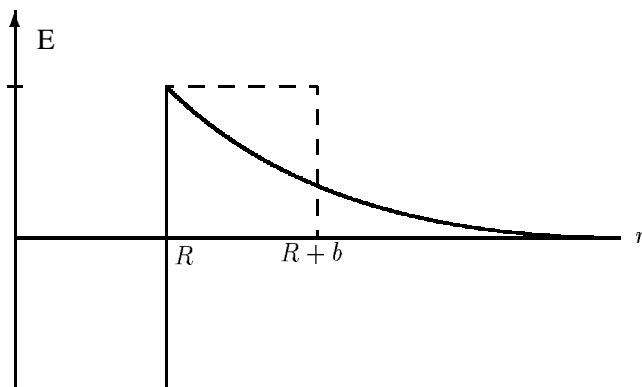
$$T \approx e^{-2 \int_a^b \sqrt{2m(V(x)-E)}/\hbar dx}. \quad (6.61)$$

Men vi før vi går videre med vår analyse, er det på tide å si litt mer om sjølve prosessen. α -henfall kan summeres opp ved følgende reaksjon

$$X \rightarrow \alpha + Y, \quad (6.62)$$

hvor X er kjernen som henfaller, og Y kalles for datterkjernen. X har da Z protoner, mens Y har $Z - 2$ protoner, og også 2 mindre nøytroner, siden α -partikkelen består av to protoner og to nøytroner.

Denne prosessen kan vi tenke oss foregår på følgende vis. I kjernen X har vi en viss sannsynlighet for at vi kan danne oss en midlertidig tilstand som består av $\alpha + Y$. Disse to kjernene henger sammen slik at vi fremdeles har X . Siden α -partikkelen har større bindingsenergi i absoluttverdi enn deuteronet pga. de sterke kjernekreftene, vil en slik midlertidig tilstand med $\alpha + Y$ ha en lavere energi enn en tilstand hvor vi erstatter α -partikkelen med deuteronet.



Figur 6.3: Idealisert framstilling av den potensielle energien mellom en α -partikkel og kjernen Y .

Systemet vårt består nå av en α -partikkel pluss Y . Ved korte avstander mellom disse to partiklene vil de sterke kjernekreftene virke og holde kjernene sammen. Ved større avstander vil derimot det frastøtende Coulombpotensialet ta over. Den potensielle energien er vist i Figur 15.10 i boka.

Vi idealiserer potensialet vist i Figur 15.10 til et kassepotensial for de sterke kjernekreftene pluss Coulombpotensialet, som vist i figuren nedenfor. Kassepotensialet skal altså representere de sterke kjernekreftene som holder α -partikkelen til Y . Vi antar at α -partikkelen har kun kinetisk energi E innafor kassepotensialet.

Coulombpotensialet er da gitt ved

$$V(r) = \frac{ZZ'e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.63)$$

hvor $Z = 2$, ladningen til α -partikkelen mens Z' er ladningen til datterkjernen Y .

Kvantemekanisk kan α -partikkelen tunnelere gjennom barrieren som er satt opp av Coulombpotensialet. Det er denne tunneleringen som gir opphav til α -decay. Vi går dermed fra en midlertig tilstand som består av $\alpha + Y$ til to separate kjerner α og Y .

Transmisjonskoeffisienten blir

$$T(E) = \exp\left(-2 \int_R^{R+b} \frac{\sqrt{2m(V(r) - E)}}{\hbar} dr\right) = \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_R^{R+b} \sqrt{\frac{ZZ'e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E} dr\right). \quad (6.64)$$

Utrekning gir

$$T(E) = \exp\left(-4\pi Z \sqrt{\frac{E_0}{E}} + 8\sqrt{\frac{ZR}{r_0}}\right), \quad (6.65)$$

hvor vi har introdusert konstantene

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_\alpha e^2}, \quad (6.66)$$

hvor r_0 er en slags Bohr radius med $m_\alpha = 7295m_e$. Konstanten E_0 er definert som

$$E_0 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_0} = 0.0995 \text{ MeV}. \quad (6.67)$$

Halvveringstida for en kjerne er gitt ved

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}, \quad (6.68)$$

hvor

$$\lambda = fT(E) \approx 10^{21} e^{\left\{-4\pi Z \sqrt{\frac{E_0}{E}} + 8\sqrt{\frac{ZR}{r_0}}\right\}}. \quad (6.69)$$

Størrelsen f skal representere antall ganger α -partikkelen treffer potensialveggen per sekund, og er typisk av størrelsesorden 10^{21} . Vi skal se på anvendelser av dette uttrykket for kjernene Thorium og Polonium. For Thorium har den utsendte α -partikkelen en kinetisk energi på 4.05 MeV mens for Polonium har vi 8.95 MeV.

Thorium har 90 protoner, noe som innebærer at datterkjernen har $Z = 88$. Verdien på R er 9 fm. Det innbærer ei halvveringstid på

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{1.29 \times 10^{-18}} = 5.37 \times 10^{17} \text{ s} = 1.70 \times 10^{10} \text{ yr}, \quad (6.70)$$

som kan sammenholdes med den eksperimentelle verdien på 1.3×10^{10} yr.

Tilsvarende har Polonium 84 protoner, noe som innebærer at datterkjernen har $Z = 82$. Verdien på R er 9 fm. Det innbærer ei halvveringstid på

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{8.23 \times 10^8} = 8.42 \times 10^{-10} \text{ s}, \quad (6.71)$$

som igjen sammenholdes med den eksperimentelle verdien på 3×10^{-7} s.

Sjøl om vi har antatt en svært så skjematisk form for potensialbarrieren, så utviser begge disse eksemplene et bra samsvar med eksperiment og viser at en forskjell på en faktor 2 i kinetisk energi er nok til å gi en forskjell i levetid på 26 størrelsesordener!

Eksemplet viser klart forholdet mellom barrierens potensielle energi og utstrekning, α -partikkelens kinetiske energi og sannsynligheten for tunneling.

6.5 Oppgaver

6.5.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 6.1, Eksamen H-1992

- Forklar kort hvilken fysisk betydning vi tillegger en bølgefunksjon $\Psi(\vec{r}, t)$ i kvantemekanikken. Hvilke matematiske krav må vi stille til en slik bølgefunksjon? Forklar hva vi mener med en operator og en egenfunksjon for en operator.
- Skriv ned den tidsavhengige Schrödingerligningen for en partikkel med potensiell energi $V(\vec{r})$.
- Vis at løsningene kan skrives på formen

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp(-iEt/\hbar).$$

og finn den ligningen som $\psi(\vec{r})$ tilfredsstiller.

- Anta at $A(\vec{r}, \vec{p})$ er en fysisk størrelse (funksjon av koordinat og bevegelsesmengde) tilordnet en partikkel. Hvordan kommer vi i kvantemekanikken fram til de verdier som er mulig å finne når vi gjør en ideell måling av den fysisk størrelsen A ?

I det følgende skal vi studere en partikkel med masse m som beveger seg i en potensialbrønn gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ -V_0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ 0 & x \geq a \end{cases}$$

hvor $V_0 > 0$ og med energi $E > 0$.

- e) Anta at partikkelen kommer inn fra $x = -\infty$ og beveger seg mot potensialbrønnen. Beskriv uten utregning hva som skjer i punktene $x = 0$ og $x = a$. Skissé bølgefunksjonen for partikkelen i områdene $x < 0$, $0 \leq x \leq a$ og $x > a$, og finn et uttrykk for bølgelengden til partikkelen i disse områdene.
- f) Skriv ned løsningen av Schrödingerligningen for problemet samt de randkravene denne må oppfylle.
- g) Vis at ligningene for randkravene kan skrives på formen

$$\begin{aligned} 1 + \frac{B}{A} &= \frac{C}{A} + \frac{D}{A} \\ 1 - \frac{B}{A} &= \lambda \left(\frac{C}{A} - \frac{D}{A} \right) \\ \frac{C}{A} \exp(ik'a) + \frac{D}{A} \exp(-ik'a) &= \frac{F}{A} \exp(ika) \\ \lambda \left(\frac{C}{A} \exp(ik'a) - \frac{D}{A} \exp(-ik'a) \right) &= \frac{F}{A} \exp(ika) \end{aligned}$$

hvor $\lambda = \sqrt{1 + V_0/E}$. Forklar betydningen av konstantene A, B, C, D, F, k og k' .

- h) Vi antar nå at $V_0 = 3E$. Vis at sannsynligheten, uttrykt ved E , for at partikler reflekteres tilbake til området $x < 0$ er gitt ved

$$R = \frac{1}{25/9 + 16/9 \left[\cot g \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{8mE} \right) \right]^2}.$$

Kort fasit

- a), b), c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1, 5.2

- d) Den fysiske størrelsen overføres til en kvantemekanisk operator $A(\vec{r}, \vec{p}) \Rightarrow A(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})$, hvor $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$ og $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$.

Vi løser egenverdligningen

$$A(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})\Phi_\nu = A_\nu\Phi_\nu$$

og de eneste mulige verdiene vi kan få ved en ideell måling er en av egenverdiene A_ν .

- e) En plan bølge med bølgetall $k = \sqrt{(2m/\hbar^2)E}$ kommer inn fra $x = -\infty$. I punktet $x = 0$ dannes det en reflektert bølge med bølgetall $-k$. En ny bølge fortsetter mot positiv x med bølgetall $k' = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E + V)}$. I punktet $x = a$ dannes det en reflektert bølge med bølgetall $-k'$. En ny bølge fortsetter mot $x = \infty$ med bølgetall k . Dette er vist i figur 2:

f) Løsningen av Schrödingerligningen blir

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & x < a \\ \psi_{II}(x) &= C \exp(ik'x) + D \exp(-ik'x) & 0 < x < a \\ \psi_{III}(x) &= F \exp(ikx) & x > a\end{aligned}$$

Randkravene i $x = 0$ og $x = a$ gir

$$\begin{aligned}\psi_I(x=0) &= \psi_{II}(x=0) \rightarrow A + B = C + D \\ \psi'_I(x=0) &= \psi'_{II}(x=0) \rightarrow k(A - B) = k'(C - D) \\ \psi_{II}(x=a) &= \psi_{III}(x=a) \rightarrow C \exp(ik'a) + D \exp(-ik'a) = F \exp(ika) \\ \psi'_{II}(x=a) &= \psi'_{III}(x=a) \rightarrow k'(C \exp(ik'a) - D \exp(-ik'a)) = kF \exp(ika)\end{aligned}$$

Ved omforming får vi ligningene som er gitt i oppgaven hvor

$$\lambda = \frac{k'}{k} = \sqrt{\frac{E + V_0}{E}} = \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}$$

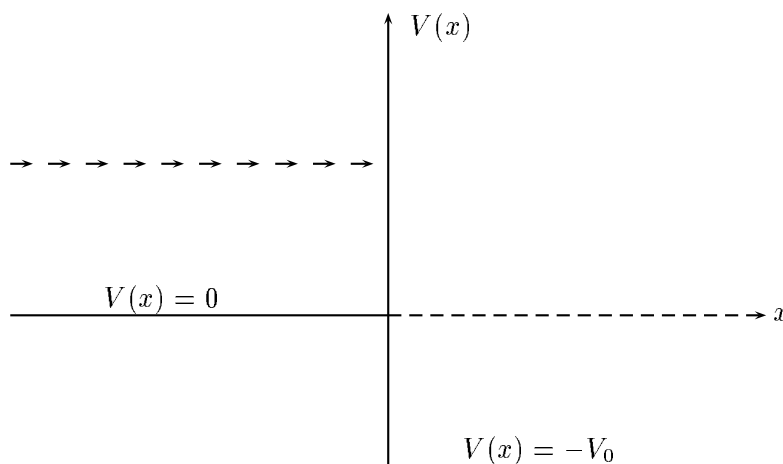
h) Refleksjonsfaktoren er definert ved

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

Løsning av ligningene under g) m.h.p. B/A gir svaret for refleksjonskoeffisienten R .

Oppgave 6.2

Vi betrakter en strøm av partikler med masse m og med kinetisk energi $E_p \ll mc^2$ som beveger seg mot et potensialtrinn som vist på figur 6.4:



Figur 6.4:

Den potensielle energien er

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ -V_0 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$$

- a) Forklar kort og kvalitativt partiklenes videre bevegelse hvis vi behandler systemet med klassisk mekanikk.
- b) Sett opp Schrödingerligningen og vis at den har løsningen

$$\begin{aligned}\psi_I &= A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x) \quad \text{for } x < 0 \\ \psi_{II} &= C \exp(ik_2x) + D \exp(-ik_2x) \quad \text{for } x > 0\end{aligned}$$

hvor A, B, C og D er integrasjonskonstanter.

Hva er k_1 og k_2 i disse funksjonene? Hvorfor må nødvendigvis D være lik null for dette systemet?

- c) Hvilke betingelser må ψ_I og ψ_{II} oppfylle ved $x = 0$?
Finn $|B/A|^2$ og $|C/A|^2$ uttrykt ved k_1 og k_2 .
- d) Hvorfor kan vi kalle $R = |B/A|^2$ for refleksjonskoeffisienten?. Definér og finn et uttrykk for transmisjonskoeffisienten T .
- e) Vis at $R + T = 1$. Forklar det fysiske innholdet i denne enkle relasjonen.

Oppgave 6.3

Et elektron med energi $E = 5$ eV beveger seg langs x-aksen i et potensial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ V_0 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$$

der konstanten V_0 foreløpig er ukjent.

- a) Hva er de Broglie bølgelengden for elektronet når det befinner seg i området $x < 0$?
- b) Anta at elektronet kommer inn fra $x = -\infty$ og beveger seg mot potensialtrinnet. Hvordan ser bølgefunksjonen for elektronet ut i områdene $x < 0$ og $x > 0$? Beskriv uten utregning hva som skjer både når $E < V_0$ og når $E > V_0$.
- c) Beregn sannsynlighetsamplituden uttrykt ved E og V_0 for at elektronet reflekteres tilbake fra potensialtrinnet.
- d) Vis at når $V_0 = 10$ eV vil alle slike innkommende elektroner reflekteres tilbake.
- e) For denne verdien av V_0 , beregn sannsynlighetstettheten i punktet $x = 1$ nm når sannsynligheten er 100 % for å finne den i $x = 0$.

Oppgave 6.4

La ψ_v være en tidsavhengig bølgefunksjon for en partikkel med masse m og potensiell energi $E_p = 0$,

$$\psi_v(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}mv\left(x - \frac{v}{2}t\right)\right),$$

hvor v er konstant.

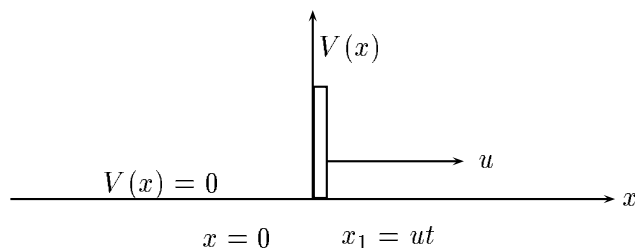
- a) Vis at ψ_v lyder bølge ligningen (Schrödingers tidsavhengige ligning), og at partikkelens hastighet er v .

Vi skal studere (1–dimensjonalt) partikler som støter mot et uendelig høyt potensialtrinn. Det nye ved situasjonen er at potensialtrinnet beveger seg (i x -retningen) med en gitt hastighet $u > 0$. Den potensielle energien er gitt

ved

$$V_p = \begin{cases} 0 & \text{for } x < x_1 \\ +\infty & \text{for } x > x_1 \end{cases}$$

der $x_1 = ut$.



På grunn av tidsavhengigheten i V_p må vi bruke tidsavhengig bølgefunksjon for innkommende og reflektert partikkel. Vi lar v være hastigheten av innkommende partikkel, og forutsetter at $v > 2u$.

- b) Hastigheten v av reflektert partikkel blir $w = -v + 2u$. Gjør rede for at dette er rimelig (for eks. ved å se på en tilsvarende klassisk situasjon, – eller på en annen måte).

Bølgefunksjonen for støtprosessen kan nå uttrykkes

$$\psi(x, t) = A\psi_v(x, t) + B\psi_w(x, t), \quad x < x_1$$

der A og B er konstanter.

- c) Vis at kravet om riktig randverdi i $x = x_1$ fører til $B = -A$.
- d) Ved å sette opp partikkelfluksen av innkommende og reflektert stråle, skal man finne refleksjonsfaktoren R . Gi en kommentar til svaret.

Oppgave 6.5

Et elektron beveger seg med energi $E > 0$ fra venstre mot et kassepotensial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ -V_0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ 0 & \text{for } x \geq a \end{cases}$$

I det følgende antas at energien $E < V_0$.

- a) Regn ut refleksjonskoeffisienten R og transmisjonskoeffisienten T for dette potensialet. Vis at T kan skrives som

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\beta}{k} + \frac{k}{\beta} \right)^2 \sinh^2(\beta a)}.$$

- b) Vis at i grensen $\beta a \gg 1$ kan dette uttrykket forenkles til

$$T = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2\beta a}.$$

- c) Beregn T ut fra den eksakte formelen i a) når $E = 2 \text{ eV}$, $V_0 = 10 \text{ eV}$ og $a = 0,1 \text{ nm}$. Hvor stor blir den relative feilen ved bruk av den approksimative formelen i dette tilfellet?

Vi antar nå at energien til elektronet er $E > V_0$.

- d) Argumenter for at transmisjonskoeffisienten i dette tilfellet kan avledes direkte fra formelen i punkt a), og finn ved en enkel utregning det nye uttrykket for T .
- e) For hvilke energier får vi ingen reflekterte partikler? Prøv å forstå dette ved å finne bølgelengden til bølgene i området der $V = V_0$ uttrykt ved potensialbredden a .

Oppgave 6.6, Eksamen V-1994

En jevn strøm av partikler, hver med masse m , beveger seg langs x -aksen i positiv retning. Den potensielle energien er gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ V_3 & x \geq a \end{cases}$$

hvor partiklenes energi $E > V_1 > V_3 > 0$.

- a) Løs den tidsuavhengige energi egenverdligningen for hvert av de tre områdene hvor den potensielle energien er konstant.
- b) Formulér betingelsene egenfunksjonene må tilfredsstille i dette tilfelle. Gi et begrunnet svar.
- c) Finn transmisjonskoeffisienten T for fluksen gjennom det totale system fra $x < 0$ til $x > a$ når det forutsettes at

$$k_2 a = 3\pi, \quad \text{hvor: } k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad \text{og} \quad k_3 a = \pi, \quad \text{hvor: } k_3 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_3)}$$

Kort fasit

a)

$$\begin{aligned} x < 0, \quad \psi_1(x) &= A \exp(ik_1 x) + B \exp(-ik_1 x), \quad k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - V_1)}}{\hbar} \\ 0 < x < a, \quad \psi_2(x) &= C \exp(ik_2 x) + D \exp(-ik_2 x), \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ x > 0, \quad \psi_3(x) &= F \exp(ik_3 x) \quad k_3 = \frac{\sqrt{2m(E - V_3)}}{\hbar} \end{aligned}$$

- b) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1 og 5.2
- c) Transmisjonen fra $x < 0$ til $x > a$

$$T = \frac{k_3}{k_1} \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k_1 k_3}{(k_1 + k_3)^2}$$

Oppgave 6.7, Eksamen H-1996

I denne oppgaven skal vi analysere et system bestående av en strøm partikler med masse m og kinetisk energi $E_k \ll mc^2$ som beveger seg fra $x = -\infty$ mot et potensialtrinn gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ -V_0 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$$

Vi skal først studere problemet utfra klassisk mekanikk.

- a) Forklar kort partiklenes bevegelse og hva som skjer når de passerer potentialspranget i $x = 0$. Finn partiklenes kinetiske energi for $x > 0$.

La oss så studere problemet med utgangspunkt i Schrödingers kvantemekanikk.

- b) Sett opp Schrödingerligningen og finn løsningene i området I ($x < 0$) og i området II ($x > 0$).
- c) En kvantemekanisk bølgefunksjon må tilfredsstille visse generelle krav. Skriv ned og begrunn de krav som gjelder for den totale bølgefunksjonen i dette tilfelle.
- d) Bruk prinsippene under c) til å finne de fullstendige bølgefunksjonene for systemet i hele området $-\infty < x < +\infty$.
- e) Bestem refleksjonskoeffisienten R og transmisjonskoeffisienten T i punktet $x = 0$ som funksjon av partiklenes energi E . Vis at $R + T = 1$ og forklar det fysiske innholdet i denne enkle relasjonen.

Vi forandrer nå den potensielle energien til

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ -V_0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ +V_1 & \text{for } x \geq a \end{cases}$$

hvor $V_0 > V_1 > 0$ og $E > V_1$.

- f) Ta utgangspunkt i løsningen under b) og finn den generelle løsningen for hvert av de tre områdene.
- g) Bruk kravene under c) til å finne den totale bølgefunksjon i hele området $-\infty < x < +\infty$
- h) Finn den nye transmisjonskoeffisienten T for fluksen gjennom det totale system fra $x < 0$ til $x > a$ når det forutsettes at

$$\sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} = \frac{3\pi}{a} \quad \text{og} \quad \sqrt{\frac{2m(E + V_1)}{\hbar^2}} = \frac{\pi}{a}$$

Finn refleksjonskoeffisienten R for det totale systemet. Beregn $R + T$ og gi en fysikalsk forklaring på svaret.

Kort fasit

- a) Klassisk mekanikk: Partiklene fortsetter rett frem, men med øket hastighet. Den kinetiske energi for $x > 0$ blir $E_k + V_0$.
- b) Schrödingerligningen for et intervall med konstant potensiell energi V er gitt ved

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\right) \psi(x) = E_k \psi(x)$$

Dette gir løsningen

$$\begin{aligned} \text{Området I: } \psi_I(x) &= A \exp(ik_I x) + B \exp(-ik_I x), & k_I &= \sqrt{\frac{2mE_k}{\hbar^2}} \\ \text{Området II: } \psi_{II}(x) &= C \exp(ik_{II} x), & k_{II} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_k + V_0)} \end{aligned}$$

- c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1, 5.2
- d) Den totale $\psi(x)$ må være kontinuerlig og med kontinuerlig derivert i punktet $x = 0$. Dette gir følgende betingelser for konstantene

$$\frac{B}{A} = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}}$$

- e) $R = (B/A)^2 = \left(\frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}\right)^2$ og $T = (v_{II}/v_I)(C/A)^2 = \frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2}$. Dette gir $R + T = 1$.

f)

$$\begin{aligned} \text{Området I: } \psi_I(x) &= A \exp(ik_I x) + B \exp(-ik_I x), & k_I &= \sqrt{\frac{2mE_k}{\hbar^2}} \\ \text{Området II: } \psi_{II}(x) &= C \exp(ik_{II} x) + D \exp(-ik_{II} x), & k_{II} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_k + V_0)} \\ \text{Området III: } \psi_{III}(x) &= F \exp(ik_{III} x), & k_{III} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_k + V_1)} \end{aligned}$$

- g) Den totale $\psi(x)$ må være kontinuerlig og med kontinuerlig derivert i punktene $x = 0$ og $x = a$. Dette gir følgende betingelser for konstantene

$$\begin{aligned} \frac{B}{A} &= \frac{k_I - k_{III}}{k_I + k_{III}}, & \frac{C}{A} &= \frac{k_I}{k_{II}} \frac{k_{II} + k_{III}}{k_I + k_{III}} \\ \frac{D}{A} &= \frac{k_I}{k_{II}} \frac{k_{II} - k_{III}}{k_I + k_{III}}, & \frac{F}{A} &= \frac{2k_I}{k_I + k_{III}} \end{aligned}$$

- h) $R = (B/A)^2 = \left(\frac{k_I - k_{III}}{k_I + k_{III}}\right)^2$ og $T = \frac{4k_I k_{III}}{(k_I + k_{III})^2}$. Dette gir $R + T = 1$.

Oppgave 6.8, Eksamen V-1999

En jevn strøm av partikler, hver med masse m og kinetisk energi E_k beveger seg fra $x = -\infty$ mot et potensialtrinn gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ +V_0 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$$

Vi skal først studere problemet utfra klassisk mekanikk og antar at $E_k > V_0 > 0$

- a) Forklar kort partiklenes bevegelse og hva som skjer når de passerer potensialspranget i $x = 0$. Finn partiklenes kinetiske energi for $x > 0$.

La oss så studere problemet med utgangspunkt i Schrödingers kvantemekanikk.

- b) Sett opp Schrödingerligningen og finn løsningene i området I ($x < 0$) og i området II ($x > 0$).
- c) En kvantemekanisk bølgefunksjon må tilfredsstille visse generelle krav. Skriv ned de krav som gjelder for den totale bølgefunksjonen i dette tilfelle.
- d) Bruk prinsippene under c) til å finne den fullstendige bølgefunksjonen for systemet i hele området $-\infty < x < +\infty$.
- e) Bestem refleksjonskoeffisienten R og transmisjonskoeffisienten T i punktet $x = 0$ som funksjon av partiklenes energi E_k . Vis at $R + T = 1$ og forklar det fysiske innholdet i denne relasjonen.

Vi forandrer nå den potensielle energien til

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ +V_0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ +V_1 & x \geq a \end{cases}$$

hvor $E_k > V_1 > V_0 > 0$.

- f) Ta utgangspunkt i løsningen under b) og finn den generelle løsningen for hvert av de tre områdene.
- g) Bruk kravene under c) til å finne betingelsene den fullstendige bølgefunksjonen må tilfredsstille.

Ligningene i g) er vanskelig å løse. La oss derfor innføre følgende forenklinger

$$V_0 = E_k - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{9\pi^2}{a^2} \quad \text{og} \quad V_1 = E_k - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2}$$

- h) Finn nå den fullstendige bølgefunksjonen for systemet i hele området $-\infty < x < +\infty$
- i) Finn refleksjonskoeffisienten R og transmisjonskoeffisienten T for det totale systemet. Beregn $R + T$ og gi en fysisk forklaring på svaret.

Kort fasit

- a) I punktet $x = 0$ treffer partikkelen en potensialbarriere $V = +V_0$ og mister kinetisk energi. Den fortsetter for $x > 0$ med $E(\text{ny}) = E_k - V_0$.
- b)

$$\begin{aligned} \text{Område I :} & \quad -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E_k \psi(x) \\ \text{Område II :} & \quad -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E_k \psi(x) \end{aligned}$$

- c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1, 5.2

d)

$$\text{Område 1: } \psi_1 = A \left(\exp(ik_1x) + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \exp(-ik_1x) \right)$$

$$\text{Område 2: } \psi_2 = A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \exp(ik_2x)$$

e)

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

f)

$$\text{Område 1: } \psi_1 = A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x) \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_k}$$

$$\text{Område 2: } \psi_2 = C \exp(ik_2x) + D \exp(-ik_2x) \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_k - V_0)}$$

$$\text{Område 3: } \psi_3 = F \exp(ik_3x) \quad k_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_k - V_1)}$$

g)

$$A + B = C + D$$

$$k_1 (A - B) = k_2 (C - D)$$

$$C \exp(ik_2a) + D \exp(-ik_2a) = F \exp(ik_3a)$$

$$k_2 (C \exp(ik_2a) - D \exp(-ik_2a)) = k_3 F \exp(ik_3a)$$

h)

$$\text{Område 1: } \psi_1 = A \left(\exp(ik_1x) + \frac{3k_1 - k_2}{3k_1 + k_2} \exp(-ik_1x) \right)$$

$$\text{Område 2: } \psi_2 = A \left(\frac{4k_1}{3k_1 + k_2} \exp(ik_2x) + \frac{2k_1}{3k_1 + k_2} \exp(-ik_2x) \right)$$

$$\text{Område 3: } \psi_3 = A \frac{6k_1}{3k_1 + k_2} \exp(ik_3x)$$

i)

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(\frac{3k_1 - k_2}{3k_1 + k_2} \right)^2 \quad T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 \frac{k_3}{k_1} = \frac{36k_1k_3}{(3k_1 + k_2)^2}$$

Kapittel 7

KVANTISERING AV BANESPINN

Though this be madness, yet there is method in it. *William Shakespeare, Hamlet, act. II, sec. 2*

7.1 Introduksjon og motivasjon

Vi skal nå bevege oss vekk fra de enkle skjematiske potensialene til 'real life' slik bare Coulomb potensialet kan berette oss om. Hydrogenatomet og dets ve og vel blir dermed sentralt, ikke bare fordi det er et en-partikkel problem (elektronet som kretser rundt et proton) som kan løses eksakt og dermed gi oss nyttig informasjon om et kvantemekanisk system, men også fordi vi skal bruke den nyvunne innsikt til å bevege oss mot en forståelse av det periodiske systemet, med Schrödingers likning som vår naturlov.

Vi har flere målsettinger med dette kapittelet.

- Vi skal omskrive den tredimensjonale Schrödingers likning til sfæriske koordinater,

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad (7.1)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi, \quad (7.2)$$

$$z = r \cos \theta. \quad (7.3)$$

Grunnen til dette skyldes at dersom vi ønsker å løse Schrödingers likning med kartesiske koordinater, blir Coulombpotensialet

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad (7.4)$$

siden $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Det betyr igjen at når vi skal løse Schrödingers likning, er vi ikke istand til å finne en separabel løsning av typen

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z). \quad (7.5)$$

Derimot, velger vi sfæriske koordinater er vi istand til å finne egenfunksjonen på forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi). \quad (7.6)$$

Det skyldes det faktum at Coulombpotensialet avhenger kun av r . Slike potensialer kalles sentralsymmetriske.

- Når vi løser Schrödingers likning for hydrogenatomet, skal vi vise at banespinnet er automatisk kvantisert. Dette var et av de store gjennomslag for Schrödingers likning. Vi trenger ikke å postulere slik Bohr gjorde at $L = n\hbar$.
- Løsningen av Schrödingers likning gir oss også bølgefunksjonen, og i motsetning til Bohrs modell, er vi stand til å rekne ut andre egenskaper ved systemet enn bare dets energi. Vi skal også vise at Schrödingers likning gir oss de korrekte energiene.

7.2 Kvantisering av banespinn

I dette avsnittet skal vi se at når vi går over til polarkoordinater kan vi skrive Schrödingers likning for hydrogenatomet som en likning som er separabel i polarkoordinatene r , θ og ϕ . Grunnen var, som vi nevnte innledningsvis i dette kapitlet, at Coulombpotensialet avhenger kun av radien r . I tillegg skal vi vise at Schrödingers likning gir oss kvantisering av banespinnet L . Det er helt nytt i forhold til Bohrs teori, som rett og slett postulerte at banespinnet var kvantisert.

Før vi kommer så langt, skal vi først benytte oss av kommuteringsrelasjonene som vi diskuterte i kapittel 5 for å vise at banespinnets projeksjon langs ulike akser, dvs. L_x , L_y og L_z ikke er uavhengige størrelser slik vi ville ha forventet fra klassisk fysikk. Roten til dette ligger i Heisenbergs uskarphets relasjon. For å se dette la oss huske først at rekkefølgen av operatorene i et uttrykk kan ha betydning. Det så vi fra virkningen av operatorene $\hat{x}\hat{p}_x$ og $\hat{p}_x\hat{x}$ på en vilkårlig tilstand Φ . Resultatene blir forskjellige. Dette kan vi uttrykke vha. kommuteringsrelasjoner som

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

som impliserer at dersom to operatører ikke kommuter, så kan vi ikke bestemme begge skarpt. Med skarpt meiner vi at uskarpheten til en størrelse \hat{A} er null, dvs. $\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2} = 0$. Sagt litt annerledes, dersom to fysiske operatører kan ha veldefinerte forventningsverdier uten uskarphet samtidig **og samme bølgefunksjon**, da kommuterer operatorene.

Motsatt vei, kan vi si at dersom to operatører kommuterer, da har de samme egenfunksjoner og skarpe egenverdier.

Banespinnet er definert som $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, noe som igjen gir oss banespinnets ulike projeksjoner

$$L_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) = yp_z - zp_y, \quad (7.7)$$

$$L_y = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) = zp_x - xp_z, \quad (7.8)$$

$$L_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = xp_y - yp_x. \quad (7.9)$$

Dersom vi nå skal anvende kvantemekanikk, bruker vi at den kvantemekaniske operatoren for banespinnet er gitt ved $\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$. Spørsmålet som vi stiller oss er: hvordan ser kommuteringsrelasjonen ut for de ulike projeksjonene av banespinnet? La oss se på følgende kommutator

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x, \quad (7.10)$$

som vi kan omskrive som

$$(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y), \quad (7.11)$$

og pynter vi litt til (se oppgave 5.3)

$$\hat{\mathbf{p}}_z \hat{\mathbf{z}} (\hat{\mathbf{y}} \hat{\mathbf{p}}_x - \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}}_y) + \hat{\mathbf{z}} \hat{\mathbf{p}}_z (\hat{\mathbf{p}}_y \hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{p}}_x \hat{\mathbf{y}}) = [\hat{\mathbf{p}}_z, \hat{\mathbf{z}}] (\hat{\mathbf{y}} \hat{\mathbf{p}}_x - \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}}_y) = i\hbar \hat{\mathbf{L}}_z = [\hat{\mathbf{L}}_x, \hat{\mathbf{L}}_y]. \quad (7.12)$$

Det betyr at siden L_x og L_y ikke kommuterer, så kan vi ikke bestemme begge skarpt. På tilsvarende vis finner vi at

$$[\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_x] = i\hbar \hat{\mathbf{L}}_y, \quad (7.13)$$

og

$$[\hat{\mathbf{L}}_y, \hat{\mathbf{L}}_z] = i\hbar \hat{\mathbf{L}}_x. \quad (7.14)$$

Her skiller vi lag med klassisk fysikk, Kvantemekanisk betyr det at siden de ulike projeksjonene ikke kommuterer, så kan ikke L_x , L_y og L_z ha samme egenfunksjoner, ei heller kunne bestemmes skarpt samtidig. Kun en av dem kan bestemmes skarpt.

Dersom vi bruker banespinnets kvadrert gitt ved

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2 + \hat{\mathbf{L}}_z^2 \quad (7.15)$$

kan vi vise at z -komponenten av $\hat{\mathbf{L}}$ kommuterer med $\hat{\mathbf{L}}^2$. Det betyr at disse to operatorene har felles egenfunksjoner. Dette ser vi ved å rekne ut kommutatoren (se også oppgave 2.6)

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}^2] &= [\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_x^2] + [\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_y^2] + [\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_z^2] \\ &= [\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_x] \hat{\mathbf{L}}_x + \hat{\mathbf{L}}_x [\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_x] + [\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_y] \hat{\mathbf{L}}_y + \hat{\mathbf{L}}_y [\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_y] \\ &= i\hbar (\hat{\mathbf{L}}_y \hat{\mathbf{L}}_x + \hat{\mathbf{L}}_x \hat{\mathbf{L}}_y) - i\hbar (\hat{\mathbf{L}}_x \hat{\mathbf{L}}_y + \hat{\mathbf{L}}_y \hat{\mathbf{L}}_x) = 0. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Vi skal nå gå over til polarkoordinater og vise at Schrödingers likning kan separeres i tre ulike likninger som kun avhenger av r , θ og ϕ definert ved

$$x = r \sin \theta \cos \phi,$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi,$$

$$z = r \cos \theta.$$

I polarkoordinater¹ har vi at operatoren ∇^2 som inngår i leddet for den kinetiske energien

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m},$$

kan skrives som (se Rottmann)

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \sin \theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right\}. \quad (7.17)$$

Helt tilsvarende finner vi at z , x og y komponentene til banespinnets er gitt ved

$$\hat{\mathbf{L}}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (7.18)$$

$$\hat{\mathbf{L}}_x = i\hbar \left(\sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot(\theta) \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (7.19)$$

¹Ulike uttrykk for ∇ , og banespinnets projeksjoner finner dere i boka kap. 6-2.

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot(\theta) \sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (7.20)$$

som gir at \hat{L}^2 blir

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \frac{1}{\sin(\theta)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right\} \quad (7.21)$$

Legg merke til at likning (7.17) for ∇^2 inneholder \hat{L}^2 ! Det skal vi benytte oss av når vi nå skal omskrive Schrödingers likning. Schrödingers likning er gitt ved

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi), \quad (7.22)$$

hvor $\psi(r, \theta, \phi)$ er egenfunksjonen. Innsetting av uttrykket for ∇^2 i polarkoordinater gir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right\} \psi(r, \theta, \phi) + V(r) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi) \quad (7.23)$$

som vi kan omskrive til

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi). \quad (7.24)$$

Legg merke til at L^2 er på operatorform. Vi har heller ikke spesifisert potensialet $V(r)$. Vi kan definere hamiltonfunksjonen vår som

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r). \quad (7.25)$$

Vi legger merke til at \hat{H} og \hat{L}^2 kommuterer

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right), \hat{L}^2 \right] + \frac{1}{2mr^2} [\hat{L}^2, \hat{L}^2] + [V(r), \hat{L}^2] = 0. \quad (7.26)$$

På tilsvarende vis, siden \hat{L}^2 og \hat{L}_z kommuterer, har vi også at

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0. \quad (7.27)$$

Det betyr at \hat{H} , \hat{L}^2 og \hat{L}_z har felles egenfunksjon ψ og skarpe egenverdier gitt ved følgende likninger

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (7.31)$$

$$\hat{L}^2\psi = E_L\psi, \quad (7.32)$$

og

$$\hat{L}_z\psi = E_{L_z}\psi. \quad (7.33)$$

Det er disse egenverdiene vi skal bestemme. Spesielt skal vi vise at energien E er gitt ved Bohrs formel og at banespinnets egenverdi E_L og dets projeksjon på z -aksen er kvantisert. Det siste faller automagisk ut fra Schrödingers likning, og vi trenger ikke å postulere kvantisering av banespinn slik Bohr gjorde ved å sette $L = n\hbar$.

At vi får tre kvantetall, et fra hver egenverdi, skyldes at vi trenger tre uavhengige koordinater for å beskrive elektronets posisjon. Det at vi har tre skarpe egenverdier betyr også at disse størrelsene er såkalla bevegelseskonstanter, de er bevarte. Klassisk har vi også at banespinn og energien er bevart for et sentralsymmetrisk potensial.

Vi antar så at egenfunksjonen er separabel

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi) = RPF, \quad (7.34)$$

som innsatt i Schrödingers likning gir

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right) RPF = ERPF \quad (7.35)$$

Vi multipliserer begge sider med

$$-\frac{2mr^2}{RPF\hbar^2}, \quad (7.36)$$

og finner når vi setter inn for \hat{L}^2 at

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{P \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{F \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} - \frac{2mr^2}{\hbar^2} V(r) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E = 0. \quad (7.37)$$

Den radielle delen er nå skilt ut. Det samme gjelder for vinkeldelen, slik at når vi setter inn Coulombpotensialet $V(r) = -ke^2/r$, hvor $k = 1/4\pi\epsilon_0$ er en konstant, så finner vi

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mrke^2}{\hbar^2} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E = -\frac{1}{P \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{F \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2}. \quad (7.38)$$

Vi ser at venstre og høyre side er uavhengige av hverandre, og vi kan sette

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mrke^2}{\hbar^2} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E = C_r, \quad (7.39)$$

og

$$C_r = -\frac{1}{P \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{F \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2}, \quad (7.40)$$

som vi omskriver til

$$-\frac{1}{F} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} = C_r \sin^2(\theta) + \frac{\sin(\theta)}{P} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right). \quad (7.41)$$

C_r er en konstant. Vi ser igjen at sistnevnte likning har ei venstre og høyre side som er uavhengige av hverandre slik at vi kan sette opp tre uavhengige likninger

$$\frac{1}{F} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} = -C_\phi^2 \quad (7.45)$$

$$C_r \sin^2(\theta) P + \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right) = C_\phi^2 P, \quad (7.46)$$

og

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mrke^2}{\hbar^2} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E = C_r \quad (7.47)$$

Disse tre likningene skal gi oss tre kvantetall. Løsningen for $F(\phi)$ er på forma

$$F(\phi) = A \exp(i m_l \phi), \quad (7.48)$$

med $m_l^2 = C_\phi^2$ og A en normeringskonstant. Husker vi tilbake til definisjonen på $L_z = -i\hbar \partial / \partial \phi$, har vi

$$L_z F(\phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} F(\phi) = \hbar m_l F(\phi), \quad (7.49)$$

som er på forma $A\psi = a\psi$.

Vi har ikke sagt noe om hvilke verdier m_l kan ha. Kan de f.eks. være kontinuerlige eller tar de kun diskrete verdier? Den ϕ -avhengige delen av den totale egenfunksjonen gir oss et hint. Siden det samme punktet i rommet er representert ved

$$\phi = \phi + 2k\pi, \quad (7.50)$$

med k en konstant, må vi ha

$$F(\phi) = F(\phi + 2\pi), \quad (7.51)$$

som betyr

$$\exp(i m_l \phi) = \exp(i m_l (\phi + 2\pi)), \quad (7.52)$$

eller at

$$\exp(i m_l 2\pi) = 1. \quad (7.53)$$

Sistnevnte relasjon er oppfylt kun dersom m_l er et heltall. Projeksjonen av banespinn langs z -aksen er altså kvantisert! Vi kan ikke tillate alle mulige verdier for m_l .

Normalisering gir

$$\int_0^{2\pi} A^* \exp(-i m_l \phi) A \exp(i m_l \phi) d\phi = 1, \quad (7.54)$$

som gir

$$A^* A \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi A^* A = 1, \quad (7.55)$$

slik at funksjonen F blir

$$F(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i m_l \phi). \quad (7.56)$$

Vi skal så se på løsningen av likninga som kun avhenger av θ . Definerer vi $x = \cos(\theta)$, med tilhørende

$$\frac{dx}{d\theta} = -\sin(\theta) = -\sqrt{1-x^2}, \quad (7.57)$$

har vi at

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta} \frac{dP}{dx} = -\sqrt{1-x^2} \frac{dP}{dx}, \quad (7.58)$$

slik at vi kan omskrive likning (4.74) til

$$C_r(1-x^2)P - m_l^2 P + (1-x^2) \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP}{dx} \right) = 0. \quad (7.59)$$

Denne differensiallikningen finner dere bla. i Rottman (se under spesielle funksjoner, avsnitt 6) og har som løsning de såkalte Legendre og tilordna Legendre polynomer). Tar vi tilfellet $m_l = 0$, kan vi utvikle P som en potensrekke

$$P(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad -1 \leq x \leq 1, \quad (7.60)$$

som ved innsetting gir en rekursjonsformel for koeffisientene a_n gitt ved

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{n(n+1) + C_r}{(n+1)(n+2)}. \quad (7.61)$$

Dette forholdet går som $n/(n+2)$ når n er stor, dvs. samme forhold som for funksjonen $\sum_n x^n/n = \ln(1-x)$. Funksjonen divergerer når $x = 1$, som svarer til $\theta = 0$. Dette kan bare unngås dersom rekka bryter av for en endelig verdi av $n = l$. Det skjer bare dersom

$$C_r = -l(l+1), \quad (7.62)$$

hvor l svarer altså til den gitte verdien av n hvor rekka bryter av. Merk at l er et ikke-negativt heltall! Det tilhørende polynomet blir av grad l og innsetting av $C_r = -l(l+1)$ i likning (4.87) gir oss

$$l(l+1)(1-x^2)P - (1-x^2)\frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{dP}{dx}\right) = 0, \quad (7.63)$$

som kalles Legendre differensiallikning og har som løsning de ovennevnte Legendre polynomene. Den generelle likningen blir da en funksjon av l og m_l , dvs

$$m_l^2 P + l(l+1)(1-x^2)P - (1-x^2)\frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{dP}{dx}\right) = 0, \quad (7.64)$$

hvis løsning er gitt ved de såkalla sfæriske harmoniske funksjoner

$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = P(\theta)F(\phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m_l)!}{4\pi(l+m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos(\theta)) \exp(im_l\phi), \quad (7.65)$$

hvor polynomet $P_l^{m_l}$ er det såkalte tilordna Legendre polynomet. Vi omskriver siste likning som

$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = \sin^{|m_l|}(\theta) \times (\text{polynom}(\cos\theta)) \exp(im_l\phi), \quad (7.66)$$

med eksempler

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad (7.67)$$

for $l = m_l = 0$,

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta), \quad (7.68)$$

for $l = 1$ og $m_l = 0$,

$$Y_{1\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) \exp(\pm i\phi), \quad (7.69)$$

for $l = 1$ og $m_l = \pm 1$,

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2(\theta) - 1) \quad (7.70)$$

for $l = 2$ og $m_l = 0$ osv.

Vi kan oppsummere resultatene hittil på følgende vis

For den delen av egenfunksjonen som avhenger av vinklene θ og ϕ ser vi at banespinnets projeksjon langs z -aksen er kvantisert og gitt ved kvantetallet m_l . Tilsvarende er banespinn-
et gitt ved kvantetallet l . Vi har følgende egenskaper

1.

$$l \geq 0$$

2.

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

3.

$$m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$$

4.

$$\hat{\mathbf{L}}^2 P(\theta) F(\phi) = \hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm_l}(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

5.

$$\hat{\mathbf{L}}_z P(\theta) F(\phi) = \hat{\mathbf{L}}_z Y_{lm_l}(\theta, \phi) = m_l \hbar Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

Merk også at l og m_l kan være null! Vi kan ha null banespinn! I Bohrs atommodell kan vi ikke ha null banespinn, siden heltallet n i $L = n\hbar$ er større eller lik 1. I klassisk fysikk, dersom vi tenker på en planetbevegelse (jorda rundt sola) kan vi heller ikke ha null banespinn. Dersom det var tilfelle ville det bety at jorda kunne oscillert fram og tilbake langs ei rett linje med sola som sentrum. Jorda måtte da passere massesenterpunktet, som er sola. At banespinn er null er et kvantemekanisk resultat, og det finnes et vell av eksperiment som støtter opp om dette resultatet.

Dersom vi vil lage oss et bilde av null banespinn for hydrogenatomet, kan vi forestille oss at elektronet oscillerer fram og tilbake gjennom protonet i et plan. For å få til det må vi nok bruke bølgeegenskapen til materien, og forestille oss protonet og elektronet som materiebølger som passerer hverandre.

Vi har nå fiksert to kvantetall som svarer til bevaring av to størrelser, det totale banespinn og dets projeksjon langs z -aksen. Løsning av den radielle Schrödingers likning vil gi oss ytterligere et kvantetall.

7.3 Den radielle Schrödinger likning

Dersom vi nå ser tilbake på likning (7.47), så kan vi omskrive den vha. $L^2 \psi(r, \theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) \psi(r, \theta, \phi)$ til

$$-\frac{\hbar^2 r^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \right) - \frac{ke^2}{r} R(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R(r) = E R(r). \quad (7.71)$$

Det er vanlig å løse den med hensyn på $u(r) = rR(r)$ slik at vi kan omskrive forrige likning til

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - \left(\frac{ke^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = E u(r). \quad (7.72)$$

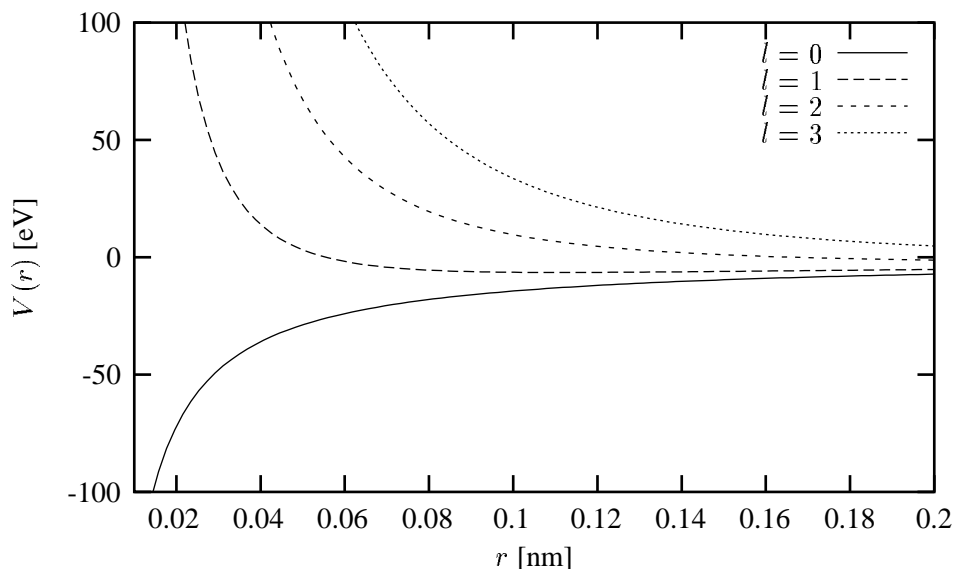
Sammenlikner vi med det endimensjonale tilfellet kan vi si at den radielle Schrödingers likning er ekvivalent med en en-dimensjonal bevegelse under et effektivt potensial

$$V_{eff}(r) = -\frac{ke^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}, \quad (7.73)$$

hvor leddet med $l(l+1)$ er et sentrifugal potensial da den tilsvarende 'kraft'

$$F = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right)$$

er positiv og peker dermed bort fra origo. Figurene 7.1 og 7.2 viser dette potensialet for ulike verdier av l . Figur 7.1 er for små verdier av r , mens 7.2 gir potensialet for større verdier av r . Vi skal merke oss



Figur 7.1: Det effektive potensialet for ulike l -verdier men for små verdier av r .

følgende i tilknytting disse to figurene.

For små verdier av r og $l \neq 0$, ser vi at potensialet er frastøtende. Det er sentrifugaldelen av potensialet som 'skyver' elektronet bort fra protonet. For $l = 0$ har vi kun Coulomb potensialet, som da tiltrekker elektronet. Siden vi ikke har noe frastøting her, betyr det at elektroner med $l = 0$ har en større sannsynlighet for å være nær kjerner enn elektroner i tilstander med $l > 0$. At dette er tilfelle skal vi se på når vi har den radielle egenfunksjonen, se f.eks. oppgave 7.4.

Når vi øker r , tar Coulombledet over sentrifugalleddet, og vi får et tiltrekkende potensial også for $l > 0$. Husk hele tiden at den totale bindingsenergien (den energien som binder elektronet til kjernen) er summen av potensiell og kinetisk energi.

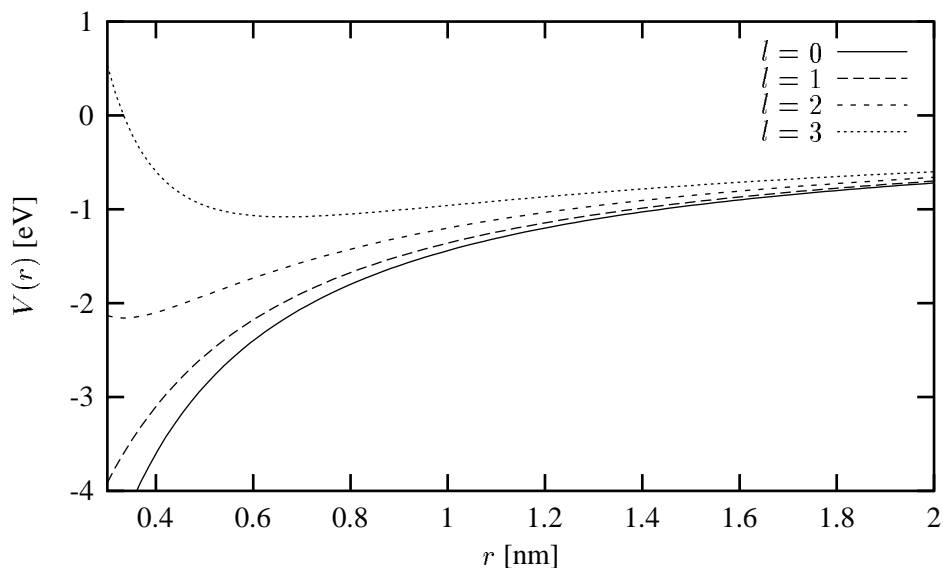
En klassisk analog til dette potensialet finner vi ved å se på en satellitt som går i bane rundt jorda. Den vil ha et banespinnledd som går som L^2 samt en gravitasjonsenergi som trekker satellitten mot jorda. Coulombpotensialet spiller samme rolle som gravitasjonsenergien.

Nå definerer vi en ny variabel

$$\rho = r \frac{\sqrt{8m|E|}}{\hbar}, \quad (7.74)$$

samt parameteren

$$\lambda = \frac{ke^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}, \quad (7.75)$$



Figur 7.2: Det effektive potensialet for ulike l -verdier men for store verdier av r . Merk at for store r tar Coulombledet over slik vi at ender opp med tiltrekning til slutt.

slik at den radielle Schrödingers likning kan skrives

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} - \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0. \quad (7.76)$$

I grensa ρ stor reduseres siste likning til

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} \approx \frac{1}{4} u(\rho) \quad (7.77)$$

hvis løsning er på forma

$$u(\rho) = e^{\pm \rho/2}, \quad (7.78)$$

hvor bare minustegnet kan aksepteres, for ellers vil $u(\rho)$ divergere, noe som igjen leder til uendelig stor sannsynlighetstetthet.

Vi følger nå samme oppskrift som for den harmoniske oscillatoren og antar at den radielle funksjonen $u(\rho)$ er gitt ved

$$u(\rho) = e^{-\rho/2} v(\rho), \quad (7.79)$$

hvor v er et polynom

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^{s+k}, \quad (7.80)$$

med $a_0 \neq 0$. Innsetting gir oss

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) v(\rho) = 0. \quad (7.81)$$

Denne differensiallikningen har som løsning de såkalte Laguerre polynomene (se igjen Rottmann under spesielle funksjoner), og gir ved innsetting av polynomuttrykket at for $k = 0$ (når vi sammenlikner ledd med samme potens i ρ)

$$a_0(s(s-1) - l(l+1))\rho^{s-2} = 0, \quad (7.82)$$

som gir at $s = -l$ eller $s = l+1$. Dersom vi har $s = -l$, med l et endelig positivt heltall, vil bølgefunksjonen divergere ved $r = 0$. Vi må ha $s = l+1$. Det gir

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^{k+l+1}. \quad (7.83)$$

Det er mulig å vise at betingelsen for at rekka for Laguerre polynomet ikke skal divergere er gitt ved

$$\lambda = n \geq l+1, \quad (7.84)$$

hvor n er et heltall. Benytter vi deretter definisjonen på λ og ρ har vi

$$|E| = \frac{ke^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}, \quad (7.85)$$

som er samme uttrykk vi fant for Bohrs atommodell for energien. I tillegg har vi

$$\rho = r \sqrt{\frac{8ke^2}{2ma_0\hbar^2}} = \frac{2r}{na_0} \quad (7.86)$$

med Bohrradien

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{mke^2}.$$

Den radielle bølgefunksjonen kan skrives som

$$u_n(r) = e^{-r/na_0} v\left(\frac{r}{a_0}\right), \quad (7.87)$$

som igjen betyr at

$$R_{nl} = re^{-r/na_0} v\left(\frac{r}{a_0}\right). \quad (7.88)$$

eller dersom vi forenkler kan den skrives som

$$R_{nl} = r^l e^{-r/na_0} \times (\text{polynom}(r)). \quad (7.89)$$

Den totale egenfunksjonen, med radiell og vinkelavhengighet er gitt ved

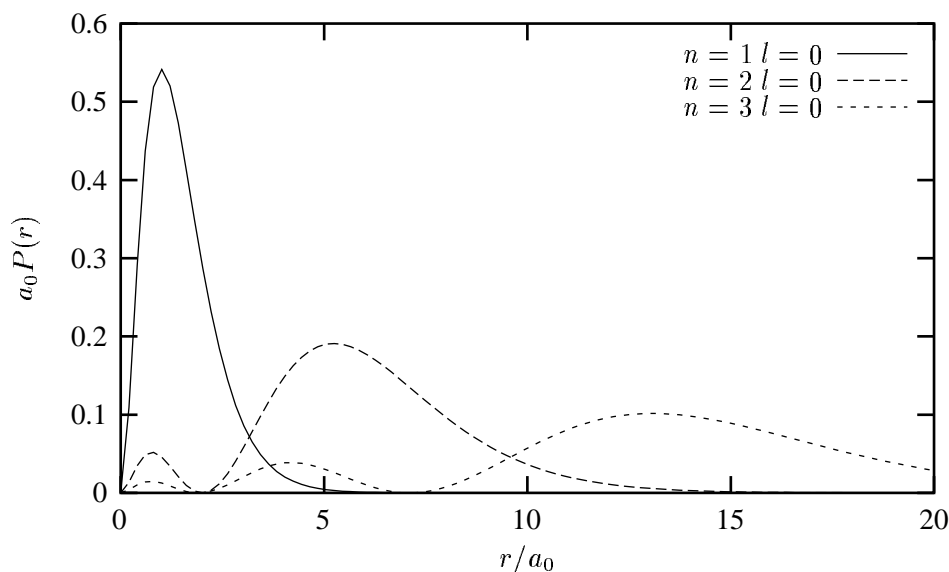
$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = \psi_{nlm_l} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) = R_{nl} Y_{lm_l} \quad (7.90)$$

Her lister vi noen eksempler på bølgefunksjonen for hydrogenatomet, med både vinkel og radiell del. For $n = 1$ og $l = m_l = 0$ (grunntilstanden) har vi

$$\psi_{100} = \frac{1}{a_0^{3/2} \sqrt{\pi}} e^{-r/a_0}, \quad (7.91)$$

mens den første eksiterte tilstanden for $l = 0$ er

$$\psi_{200} = \frac{1}{4a_0^{3/2} \sqrt{2\pi}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}. \quad (7.92)$$



Figur 7.3: Plot av $a_0 P(r)$ for $l = 0$ tilstander opp til $n = 3$.

For tilstander med $l = 1$ har vi for $n = 2$ og $m_l = 0$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4a_0^{3/2}\sqrt{2\pi}} \left(\frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0} \cos(\theta). \quad (7.93)$$

For $m_l = \pm 1$ finner vi

$$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8a_0^{3/2}\sqrt{\pi}} \left(\frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}. \quad (7.94)$$

Historisk kalles tilstander med $l = 0$ for s -tilstander (s for sharp), $l = 1$ for p -tilstander (p for pure), $l = 2$ for d -tilstander (d for diffuse), $l = 3$ for f -tilstander, $l = 4$ for g -tilstander, $l = 5$ for h -tilstander osv. i alfabetisk rekkefølge med stigende l -verdi. Det vil si at en tilstand med $n = 1$ og $l = 0$ har den spektroskopiske notasjonen $1s$. Tilsvarende for $n = 2$ har vi $2s$. På samme vis kan vi lage oss en spektroskopisk notasjon for $l = 1$ tilstandene. For $n = 2$ og $l = 1$ har vi den spektroskopiske notasjonen $2p$. Tilsvarende for $n = 3$ har vi $3p$. Slik kan vi fortsette for andre verdier av l og n .

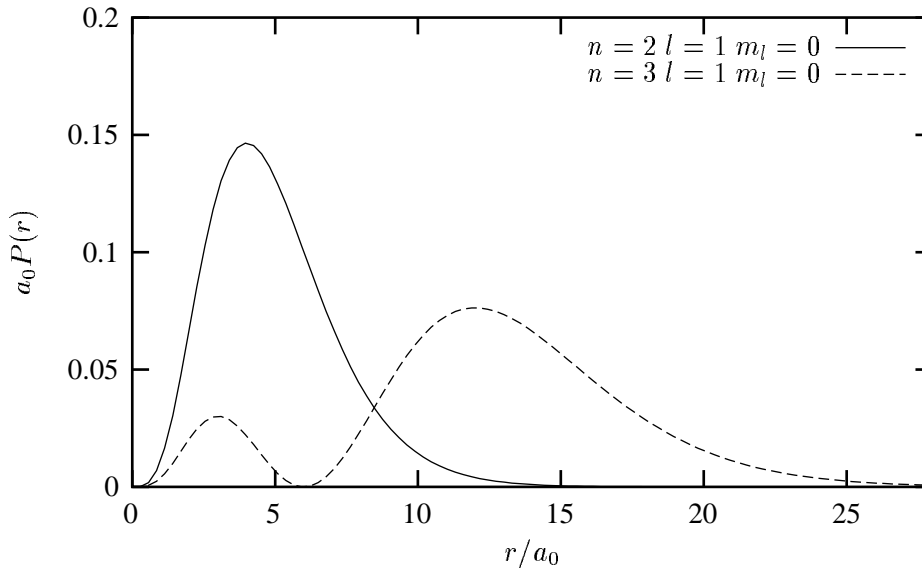
Det vi skal legge merke til er at energien avhenger kun av kvantetallet n , og er gitt ved

$$E_n = \frac{E_0}{n^2}, \quad (7.95)$$

hvor $E_0 = -13.6$ eV. Det betyr at $2s$ og $2p$ tilstandene som begge har $n = 2$ men ulikt banespinn, har samme energi. Det at to tilstander med ulike egenfunksjoner gir opphav til samme energi kalles degenerasjon. Vi har allerede sett det i tilknytning det tre-dimensjonale bokspotensialet. At to eller flere tilstander med ulike kvantetall gir samme energi skyldes symmetrien i vekselvirkningen, her den sfæriske symmetrien til Coulombpotensialet. I neste avsnitt skal vi bryte denne symmetrien ved å sette på et magnetfelt.

Vi definerer nå sannsynlighetstettheten for den radielle delen av egenfunksjonen som

$$P_{nl} dr = R_{nl}^* R_{nl} r^2 dr, \quad (7.96)$$


 Figur 7.4: Plot av $a_0 P(r)$ for $l = 1$ tilstander opp til $n = 3$ for $m_l = 0$.

som uttrykker sannsynligheten for å finne elektronet i et bestemt område mellom r og $r + dr$, dvs. en bestemt avstand fra protonet. Denne sannsynligheten er også normert til 1, akkurat som den tilsvarende sannsynligheten for de sfæriske harmoniske funksjonene. Den totale sannsynligheten blir dermed

$$P_{nlm_l}(r, \theta, \phi) d\tau = R_{nl}(r) * R_{nl}(r) r^2 dr Y_{lm_l}(\theta, \phi) * Y_{lm_l}(\theta, \phi) d\Omega, \quad (7.97)$$

med romvinkelen $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$.

I figur 7.3 og 7.4 har vi plottet P_{nl} som funksjon av r/a_0 for ulike l og n verdier. Med sannsynlighetstettheten kan vi rekne ut midlere radius gitt ved

$$\langle r_{nl} \rangle = \int_0^\infty r P_{nlm_l}(r, \theta, \phi) d\tau = \int_0^\infty r P_{nl} dr, \quad (7.98)$$

som gir

$$\langle r_{nl} \rangle = \frac{a_0}{2} (3n^2 - l(l+1)). \quad (7.99)$$

Vi kan også vise at

$$\langle r_{nl}^2 \rangle = \int_0^\infty r^2 P_{nl} dr, \quad (7.100)$$

kan skrives

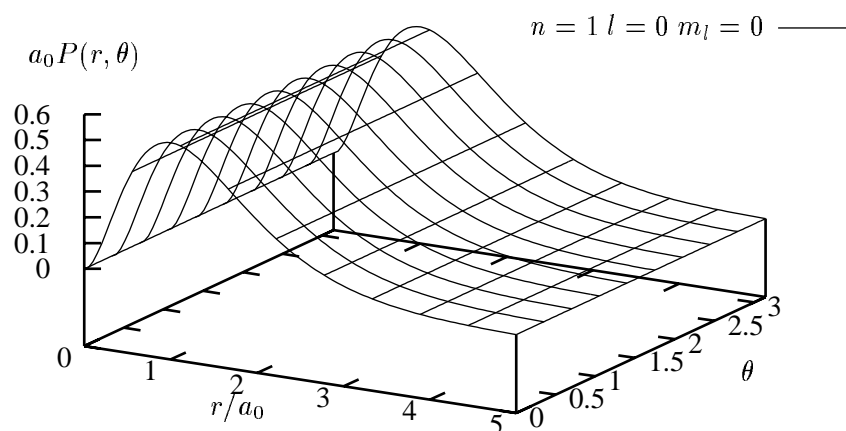
$$\langle r_{nl}^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2} (5n^2 + 1 - 3l(l+1)). \quad (7.101)$$

Vi kan dermed finne standardavviket

$$\Delta r_{nl} = \sqrt{\langle r_{nl}^2 \rangle - \langle r_{nl} \rangle^2}, \quad (7.102)$$

som ved innsetting gir

$$\Delta r_{nl} = \frac{a_0}{2} \sqrt{n^4 + 2n^2 - l^2(l+1)^2}. \quad (7.103)$$



Figur 7.5: Romlig fordeling av $a_0 P(r, \theta)$ for grunntilstande i hydrogenatomet.

Utifra Heisenbergs uskarphetsrelasjon har vi dermed

$$\Delta p_{nl} \geq \frac{\hbar}{2\Delta r_{nl}} = \frac{\hbar}{a_0 \sqrt{n^4 + 2n^2 - l^2(l+1)^2}}. \quad (7.104)$$

Utifra disse resultatene kan vi nå prøve å tolke formen til egenfunksjonene i figurene 7.3 og 7.4 utifra uskarphetsrelasjonen.

La oss se på figur 7.3, da den samme diskusjon gjelder for figur 7.4. For $n = 1$ og $l = 0$ har vi en uskarphet i r og p gitt ved henholdsvis

$$\Delta r_{10} = \frac{a_0}{2} \sqrt{3}, \quad (7.105)$$

og

$$\Delta p_{10} \geq \frac{\hbar}{a_0 \sqrt{3}}. \quad (7.106)$$

Ser vi på tilfellet med $n = 3$ men fremdeles $l = 0$, finner vi

$$\Delta r_{30} = \frac{3a_0}{2} \sqrt{10}, \quad (7.107)$$

og

$$\Delta p_{30} \geq \frac{\hbar}{3a_0 \sqrt{10}}. \quad (7.108)$$

Legg merke til følgende. Når vi øker n , øker Δr mens Δp minsker. At Δr øker ser vi på utstrekningen til bølgefunksjonen. For $n = 1$ strekker den seg ut til ca. $5 - 6a_0$, mens for $n = 3$ strekker den seg ut til ca. $25a_0$.

Hvorfor minsker bevegelsesmengden? For $n = 1$ er energien $E_0 = -13.6$ eV. For $n = 3$ er energien $E_0/9$. Når energien minsker, minsker også uskarpheten i bevegelsesmengde. Når uskarpheten i bevegelsesmengde minsker, må uskarpheten i posisjon øke. Utifra Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Ustrekningen av bølgefunksjonen er dermed nært knytta til Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Tilsvarende argument gjelder for elektronet med banespinn $l = 1$ og ulike n verdier, eller andre bane-spinn.

Legg også merke til det faktum at i figur 7.3 (7.4) ser vi at for tilstander som har mindre energi (i absoluttverdi) enn den første, har vi nullpunkter for sannsynlighetstettheten. Det skyldes at egenfunksjonen har noder, dvs. nullpunkter. Dette så vi også for de eksiterte tilstandene til den en-dimensjonale potensialbrønnen i avsnitt 4.4.2. Klassisk finner vi det samme for en streng som svinger og er fastspent i begge ender. Desto større energi strengen har, desto flere noder har bølgefunksjonen. For bundne tilstander i kvantemekanikk har vi det samme, desto høyere vi går opp i eksitasjonsenergi, desto flere noder utviser bølgefunksjonen.

La oss å se på sannsynlighetsfordelingen for elektronet i grunntilstanden fra figur 7.3 (tilfellet med $n = 1$ og $l = 0$). Vi så ovenfor at midlere radius var gitt ved $\langle r_{10} \rangle = 3a_0/2$ med en fluktuasjon $\Delta r_{10} = a_0\sqrt{3}/2$. I middell befinner altså elektronet seg lenger borte fra protonet enn hva vi finner fra Bohrs atommodell. Fra sistnevnte modell, går elektronet i en bane med avstand a_0 fra protonet.

Men dersom vi ser på sannsynlighetstettheten for $n = 1$ og $l = 0$ finner vi at den maksimale verdier avstanden fra protonet kan ha er gitt ved

$$\frac{dP_{10}(r)}{dr} = 0 = 2re^{-2r/a_0} - \frac{2}{a_0}r^2e^{-2r/a_0} \quad (7.109)$$

som gir

$$r_{\text{maks}} = a_0. \quad (7.110)$$

Formlen for Bohrradien er gitt ved a_0n^2 . Deriverer vi sannsynlighetstettheten for P_{21} , dvs. $n = 2$ og $l = 1$, se figur 7.4, finner vi igjen samsvar med Bohrs atommodell. Men den midlere radius for $\langle r_{21} \rangle = 5a_0$. Den kvantemekaniske tolkning av egenfunksjonen som vha. begrepet sannsynlighetstetthet, leder oss til midlere verdier som er forskjellige fra den enkle Bohrmodellen, som baserte seg på et 'planetbilde', dvs. elektronet i bane rundt en kjerne.

Kvantemekanikken gitt ved Schrödingers likning gir oss ikke bare energien og kvantisering av spinn, men også muligheten til å rekne ut andre størrelser.

Som bevegelseslov (naturlov) har dermed Schrödingers likning muligheten til å si mer om et system enn mer enkle modeller.

Vi kan f.eks. bruke egenfunksjonene til å rekne ut midlere kinetisk energi for en gitt tilstand nl gitt ved

$$\langle \frac{p^2}{2m} \rangle_{nl} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{nlm_l}^*(r, \theta, \phi) \nabla^2 \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi, \quad (7.111)$$

eller en forventningsverdi for en vilkårlig operator \hat{A} gitt ved

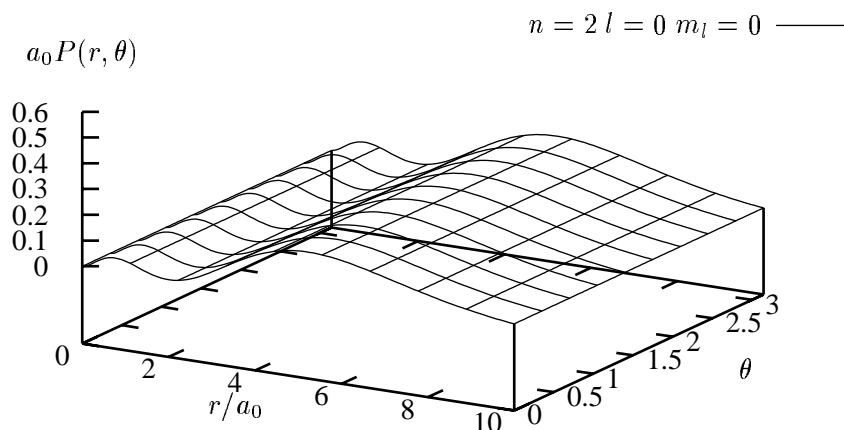
$$\langle \hat{A} \rangle_{nl} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{nlm_l}^* \hat{A} \psi_{nlm_l} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \quad (7.112)$$

Vi kan også når vi f.eks. skal se på elektriske dipoloverganger i neste kapittel (avsnitt 8.3, studere overgangssannsynligheten fra en tilstand $\psi_{n'l'}$ til en tilstand gitt ved ψ_{nl} . Denne overgangen kan vi skrive som

$$\langle \hat{A} \rangle_{n'l' \rightarrow nl} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{nlm_l}^* \hat{A} \psi_{n'l'm_l'} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \quad (7.113)$$

Slike beregninger var ikke mulig innafor ramma av Bohrs atommodell. Vi får litt igjen med alt strevet med å sette opp Schrödingers likning.

Vi avslutter dette avsnittet med figurer om den romlige fordelingen av sannsynlighetstettheten P . Siden avhengigheten av vinkelen ϕ forsvinner når vi regner ut $|\psi|^2$, trenger vi kun å plote $|\psi|^2$ som funksjon av r og θ . Plottet av $|\psi|^2$ for grunntilstanden er gitt i figur 7.5. Siden vinkelen ϕ representerer projeksjonen av r i xy -planet kan dere tenke dere figur 7.5 som et snitt av en tre-dimensjonal funksjon i xz -planet. Denne figuren vil, siden $|\psi|^2$ ikke avhenger av hvor vi er xy -planet, være den samme for alle ϕ -verdier. For $l = 0$ tilstander er det heller ikke noen avhengighet av vinkelen θ . Det ser vi også i figur 4.6 for $n = 2$



Figur 7.6: Romlig fordeling av $a_0 P(r, \theta)$ for den første eksiterte tilstand med $l = 0$ i hydrogenatomet.

og $l = 0$.

For tilstander med $l > 0$ har vi derimot en avhengighet av θ , noe figurene 7.6, 7.7 og 7.9 viser.

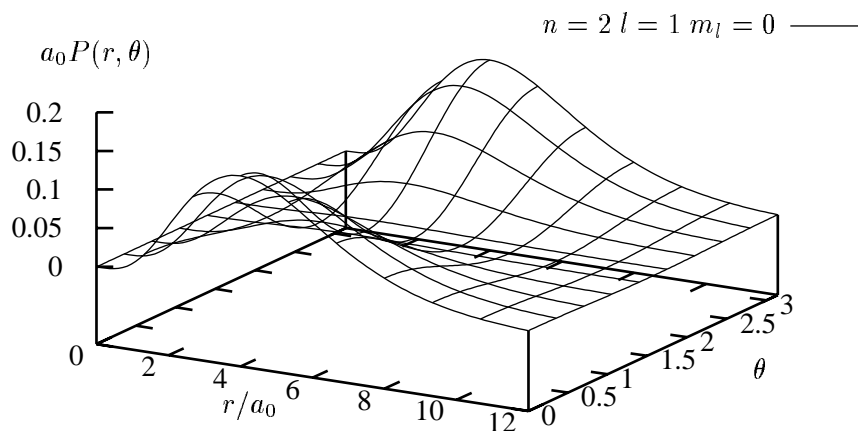
7.4 Kvantisering av banespinn i to dimensjoner

Studier av to-dimensjonale systemer er svært aktuelle i faste stoffers fysikk. Nylig, se f.eks. tidsskriftet Physical Review Letters, bind 84 (2000) s. 2223, klarte forskere ved University of Santa Barbara og universitetet i München å isolere enkeltelektroner (som et kunstig hydrogenatom) i såkalla kvantepunkter, eller Quantum dots, som er to-dimensjonale systemer av liten utstrekning, i dette tilfellet ca. 50 nm, som består av ett eller flere elektroner. Slike systemer er bla. tenkt som kandidater for å lage en kvantedatamaskin. Kvantepunkter er altså mikroskopiske områder Vi skal rekne på en partikkel som beveger seg fritt på en sirkel med radius r i xy -planet. Legg merke til at r er konstant. Det betyr at hvis vi går over fra kartesiske koordinater (x, y) til polarkoordinater (r, ϕ) , så kan partikkelens bevegelse beskrives kun ved hjelp av ϕ . Partikkelens hastighet er i polarkoordinater gitt ved $\mathbf{v} = r \frac{d\phi}{dt} \mathbf{e}_\phi \equiv r\omega \mathbf{e}_\phi$, der \mathbf{e}_ϕ er en enhetsvektor. Partikkelens banespinn er da gitt ved

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} = mr^2\omega \mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\phi = mr^2\omega \mathbf{e}_z$$

Dermed ser vi at banespinnet er rettet langs z -aksen, og har lengden

$$L_z = mr^2\omega = mrv.$$



Figur 7.7: Romlig fordeling av $a_0 P(r, \theta)$ for den første eksiterte tilstand med $l = 1$ i hydrogenomet med $m_l = 0$.

Den kinetiske energien blir

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m r^2 \omega^2.$$

Fra $L_z = m r \omega$ fås $\omega = \frac{L_z}{m r^2}$, og dermed

$$E_k = \frac{1}{2} m r^2 \frac{L_z^2}{m^2 r^4} = \frac{L_z^2}{2 m r^2}.$$

Vi skal nå behandle partikkelen kvantemekanisk. Det betyr at L_z må bli en operator. I kartesiske koordinater er den gitt ved

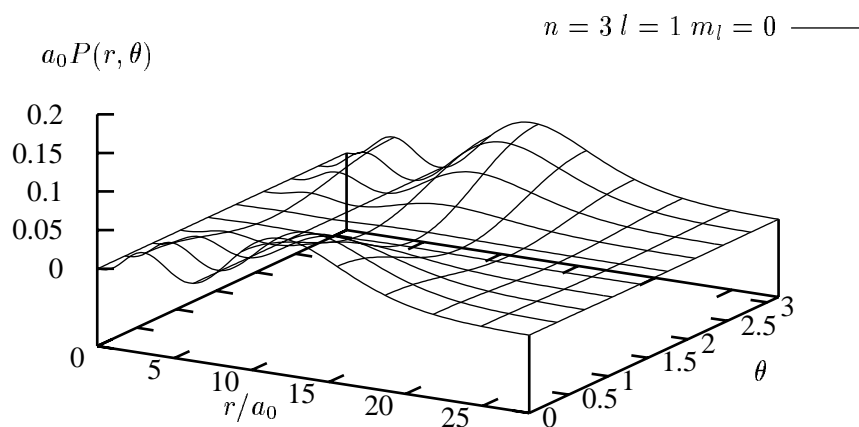
$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

I polarkoordinater har vi at $x = r \cos \phi$, $y = r \sin \phi$, slik at $\phi = \phi(x, y) = \arctan(y/x)$. Da får vi at

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \phi} \\ &= -r \sin \phi \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \phi \frac{\partial}{\partial y} \\ &= x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}. \end{aligned}$$

Dermed ser vi at i polarkoordinater er $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$. Siden partikkelen kan bevege seg fritt, har den bare kinetisk energi. Da ser vi fra b) at Hamiltonoperatoren er gitt ved

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2 m r^2} = -\frac{\hbar^2}{2 m r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$



Figur 7.8: Romlig fordeling av $a_0 P(r, \theta)$ for den andre eksiterte tilstand med $l = 1$ i hydrogenatomet med $m_l = 0$.

Et rimelig krav til bølgefunksjonen er at den skal være ** tydig**, det vil si at den skal ha samme verdi i et punkt selv om vi beskriver det p  to forskjellige m ter. Et punkt p  sirkelen kan angis med vinkelen ϕ , men det kan like gjerne angis ved $\phi + 2\pi$. Siden $\psi(\phi)$ er sannsynlighetsamplituden for   finne partikkelen i et punkt p  sirkelen, ville det v re litt rart om ψ skulle forandre seg dersom vi byttet ut ϕ med $\phi + 2\pi$. Vi forlanger derfor at

$$\psi(\phi + 2\pi) = \psi(\phi).$$

Vi skal l se Schr dingerlikningen $\hat{H}\psi = E\psi$, dvs.

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(\phi) = E\psi(\phi),$$

m.a.o

$$\psi''(\phi) = -k^2 \psi(\phi)$$

der $k \equiv \sqrt{2mr^2 E/\hbar^2}$. Denne likningen har generell l sning

$$\psi(\phi) = Ae^{ik\phi} + Be^{-ik\phi}.$$

Krav om  tydighet gir

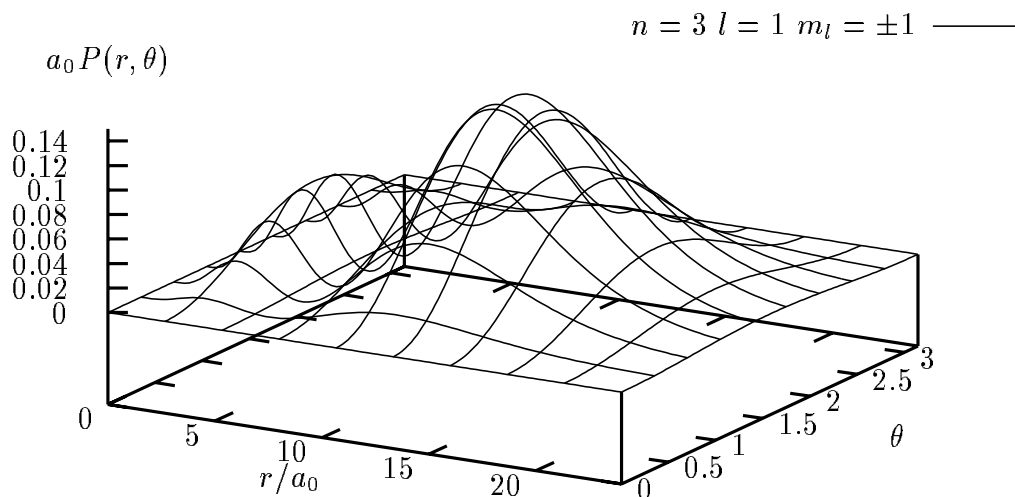
$$Ae^{ik(\phi+2\pi)} + Be^{-ik(\phi+2\pi)} = Ae^{ik\phi} + Be^{-ik\phi},$$

som gir at

$$e^{i2\pi k} = 1 \Rightarrow k = n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Merk at vi kan ha $n = 0$, da dette gir $\psi = \text{konstant}$, som er en akseptabel l sning av Schr dingerlikningen. Siden $k = \sqrt{2mr^2 E/\hbar^2} = n$, blir de kvantiserte energiniv ene

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mr^2}.$$



Figur 7.9: Romlig fordeling av $a_0 P(r, \theta)$ for den andre eksiterte tilstand med $l = 1$ i hydrogenatomet med $m_l = \pm 1$.

Nå kan vi imidlertid sjonglere litt med denne løsningen. Vi ser nemlig at både $e^{ik\phi}$ og $e^{-ik\phi}$ er løsninger, og dermed egenfunksjoner for \hat{H} . Men vi ser også at

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0,$$

siden \hat{H} er proporsjonal med \hat{L}_z^2 . Da vet vi at vi kan finne simultane egentilstander for \hat{L}_z og \hat{H} . Men:

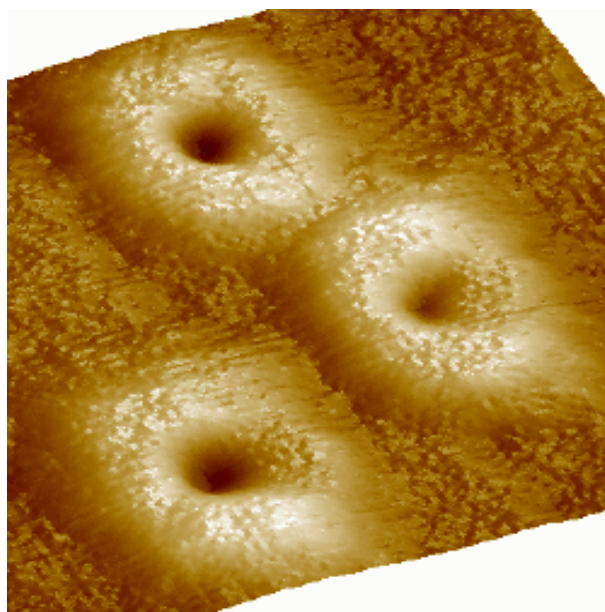
$$\begin{aligned} \hat{L}_z(Ae^{ik\phi} + Be^{-ik\phi}) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}(Ae^{ik\phi} + Be^{-ik\phi}) \\ &= \hbar k(Ae^{ik\phi} - Be^{-ik\phi}) \neq \text{konst} \times \psi(\phi) \end{aligned}$$

Dermed er ψ på den generelle formen ikke en egenfunksjon for \hat{L}_z . Derimot ser vi at $Ae^{ik\phi}$ og $Be^{-ik\phi}$ hver for seg er egenfunksjoner for \hat{L}_z . Det er da ingenting i hele verden som kan hindre oss i å velge som egenfunksjoner

$$\psi_n(\phi) = e^{ik\phi} = e^{in\phi}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Disse er da egenfunksjoner for både \hat{H} og \hat{L}_z . Siden $\hat{L}_z \psi_n(\phi) = n\hbar \psi_n(\phi)$, ser vi at tilstandene ψ_n og ψ_{-n} har forskjellig angulærmoment. Imidlertid er energien bare avhengig av n^2 , så ψ_n og ψ_{-n} er degenererte. Konklusjon:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mr^2}, \quad \psi_n(\phi) = Ae^{in\phi}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$



Figur 7.10: Disse 50 nm i diameter ringene kan hver være vert for et enkelt elektron som i går sirkel i en rein kvantetilstand som kan kontrolleres av et ytre påsatt magnetfelt.

7.5 Oppgaver

7.5.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 7.1, Eksamen H-1997

- a) Gi en kort oversikt over de krav man stiller til den kvantemekaniske bølgefunksjonen $\psi(x)$, spesielt hva som kreves av bølgefunksjonen i en overgang hvor den potensielle energien $V(x)$ går fra en endelig verdi til $V(x) = \infty$.

I det følgende skal vi først se på et 1-dimensjonalt problem: En partikkel med masse m beveger seg i et potensialfelt gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ -V_0 & \text{for } 0 \leq x < a \\ 0 & x \geq a \end{cases}$$

med $V_0 > 0$.

- b) Tegn en skisse som viser de karakteristiske trekk ved bølgefunksjonen $\psi_1(x)$ for grunntilstanden og bølgefunksjonen $\psi_2(x)$ for den første eksiterte tilstanden for det tilfelle at begge tilstandene er bundne.
- c) I det følgende skal bredden a av den potensielle energien ha en slik verdi a_1 at energien for grunntilstanden blir $E_1 = -(1/2)V_0$.

Vis at

$$a_1 = \frac{3\pi\hbar}{4\sqrt{mV_0}}.$$

- d) Vis at det ikke finnes bundne eksiterte tilstander når den potensielle energien har bredden a_1 .

Vi skal nå behandle et tilsvarende problem i tre dimensjoner. I dette tilfelle er den potensielle energien gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{for } 0 \leq x < a_1 \\ 0 & x \geq a_1 \end{cases}$$

hvor a_1 er den samme konstanten som ble funnet i punkt c). Til hjelp i beregningen oppgir vi operatoren $\hat{\nabla}^2$ i polarkoordinater

$$\hat{\nabla}^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2.$$

Her er $\hat{\mathbf{L}}^2$ kvadratet av operatoren for banespinnet.

- e) Skriv opp Schrödingerligningen for dette tilfelle. Vis at energi egenfunksjonene kan skrives på formen $(1/r)u(r)f(\theta, \phi)$ og forklar hvorfor de samtidig er egenfunksjoner $\hat{\mathbf{L}}^2$. Vis at ligningen for $u(r)$ er gitt ved

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{eff}(r)u(r) = Eu(r).$$

Finn uttrykket for $V_{eff}(r)$.

- f) Finn de mulige energi egenverdiene som har $l = 0$ (s-tilstandene).
g) Tegn kurven for $V_{eff}(r)$ for $l \neq 0$ og forklar hvorfor det ikke finnes bundne tilstander når kvantetallet l for banespinnet er større enn 2.

Kort fasit

- a) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1, 5.2
b) For $0 \leq x \leq a$: $\psi_1(x) = A \sin(kx)$, $k = \sqrt{mV_0/\hbar^2}$.
For $a < x$: $\psi_2(x) = B \exp(-\beta x)$, $\beta = k$
c) Svaret er oppgitt i oppgaven.
d) Bølgefunksjonen for en mulig eksitert bunden tilstand med energi E er $\psi(x) \sim \sin(k'x)$, $k' = \sqrt{2m(E + V_0)/\hbar^2}$. Siden $E < 0$ må $k' < \sqrt{2mV_0}/\hbar$ og argumentet i bølgefunksjonen i punktet $x = a_1$ blir $k'a_1 = 3\pi/4\sqrt{2} \approx 1,06\pi$. Fra figuren fremgår det at vi må ha $k'a_1 > 3\pi/2$. Følgelig ingen eksitert tilstand.
e) Siden den potensielle energi kun avhenger av r kan alltid bølgefunksjonen skrives som et produkt som angitt i oppgaven. Ligninger for $u(r)$ er som angitt i oppgaven med

$$V_{eff} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - V_0 \quad 0 \leq r \leq a_1$$

$$V_{eff} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad a_1 < r$$

- f) $l = 0$ gir samme energi egenverdligning og med samme randbetingelser som i det 1-dimensjonale tilfellet og med samme egenverdi $-1/2V_0$.
g) For at vi skal få bundne tilstander må $V_{eff}(r = a_1) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2ma_1^2} - V_0 < 0$. For $l < 2$ er dette oppfylt.

Oppgave 7.2

Et elektron beveger seg i et to-dimensjonalt, uendelig dypt kassepotensial $V(x, y)$ med utstrekning $L \times L$, dvs. gitt ved

$$\begin{aligned} V(x, y) &= 0 && \text{for } |x| < L/2 \text{ og } |y| < L/2, \\ V(x, y) &= \infty && \text{ellers.} \end{aligned}$$

- Skriv ned Hamilton operatoren for systemet og finn energi egenverdiene og energi egenfunksjonene.
- Normér egenfunksjonene.
- Hva er degenerasjonen til de tre laveste energinivåene?
- Beregn forventningsverdiene $\langle \hat{x} \rangle$, $\langle \hat{p}_x \rangle$ og $\langle \hat{p}_y^2 \rangle$ når elektronet befinner seg i grunntilstanden.

Oppgave 7.3

En partikkel med masse m beveger seg fritt på en sirkel med radius r i xy -planet.

- Hva er det klassiske uttrykket for z -komponenten av banespinnet L_z ? (Banespinnet er parallelt med z -aksen slik at $L = L_z$).
- Hva er partikkelens kinetiske energi uttrykt ved L_z ?
- Bruk kvantiseringsregelen $L_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ og vis at hamiltonoperatoren for systemet er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

- Hvilke krav må stilles til partikkelens bølgefunksjon $\psi(\phi)$? Finn $\psi(\phi)$ og de kvantiserte energi egenverdiene for systemet.
- Vi antar nå at partikkelen er et elektron, men vi ser bort fra egenspinnet. Et homogent magnetfelt parallelt med z -aksen $\vec{B} = B\vec{e}_z$ settes på. Hva blir nå $\psi(\phi)$ og de kvantiserte energi egenverdiene for systemet?

Vi betrakter nå en partikkel på den samme ringen, men med et potensial $V(\phi)$ gitt ved

$$V(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 < \phi < \pi \\ +\infty & \text{for } \pi \leq \phi < 2\pi \end{cases}$$

- Finn $\psi(\phi)$ og de kvantiserte energi egenverdiene for systemet.
- Energi egenverdiene for en partikkel i 1 dimensjon i en uendelig dyp brønn med bredde L er gitt ved

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

Sammenlign med resultatet fra f) og forklar.

Løsning

- a) Det klassiske uttrykk for en partikkels banespinn er gitt ved $\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v}$. Komponenten parallell med z-aksen blir da $L_z = rmv$

- b) Partikkelen klassiske kinetiske energi er gitt ved

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2mr^2}L_z^2$$

- c) Den kvantemekaniske Hamilton operatoren blir

$$\hat{H}_0 = \hat{T} = \frac{1}{2mr^2}\hat{L}_z = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

- d) Egenverdi ligningen får formen

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial^2\psi(\phi)}{\partial\phi^2} = E\psi(\phi) \quad (7.114)$$

Bølgefunksjonen $\psi(\phi)$ må være en-tydig for alle ϕ . Siden partikkelen beveger seg på en sirkel, betyr dette at $\psi(\phi) = \psi(\phi + n\pi)$. Med dette kravet til egenfunksjonene blir løsningen av lign(1)

$$\psi_n(\phi) = Ae^{in\phi} + Be^{-in\phi}$$

hvor n er et helt positivt tall. Dette gir energi egenverdiene

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mr^2}n^2$$

- e) Når partikkelen plasseres i et homogent magnetfelt parallelt med z-aksen, får Hamilton operatoren for systemet et ekstra energiledd

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m}B\hat{L}_z$$

Siden egenfunksjonene $\psi_n(\phi)$ også er egenfunksjon for \hat{L}_z blir de nye energi egenverdiene

$$\begin{aligned} E(B) &= E_n + \frac{e}{2m}Bn\hbar \\ &= \frac{\hbar^2}{2mr^2}n^2 + \frac{e}{2m}Bn\hbar \end{aligned}$$

- f) På grunn av potensialet $V(\phi)$ er bølgefunksjonen $\psi(\phi) = 0$ for $\pi < \phi < 2\pi$ og

$$\begin{aligned} \psi_n(\phi = 0) &= 0 \rightarrow B = -A \\ \psi_n(\phi = \pi) &= 0 \rightarrow \psi_n(\phi) = 2Ai \sin(n\phi) \end{aligned}$$

Energi egenverdiene blir

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mr^2}n^2$$

med kvantetallet n som et positivt helt tall.

- g) Partikkelen beveger seg langs en halvsirkel $0 < \phi < \pi$ Setter vi lengden av halvsirkelen lik $L = \pi r$ blir energi egenverdiene

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

som er kvantemekanisk identisk med en partikkel i en uendelig dypt potensialbrønn med bredde L .

Oppgave 7.4

De radielle bølgefunksjonene for elektronet i hydrog n atomet med hovedkvantetall $n = 2$ er for s- og p-tilstanden gitt ved henholdsvis

$$R_{20}(r) = N_{20} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) \exp \left(-\frac{r}{2a_0} \right)$$

$$R_{21}(r) = N_{21} \frac{r}{a_0} \exp \left(-\frac{r}{2a_0} \right).$$

- Bestem normeringskonstantene N_{20} og N_{21} .
- For hvilken verdi av r er sannsynligheten for   finne elektronet st rst n r hydrog n atomet antas   v re i p-tilstanden? Sammenlign resultatet med hva som f lger fra Bohrs atommodell.
- N r atomet er i denne tilstanden, hva er sannsynligheten for   finne elektronet innenfor   Bohr-radius?
- Regn ut den tilsvarende sannsynligheten n r atomet er i s-tilstanden og sammenlign med resultatet under punkt c). Hvordan kan man forklare denne forskjellen?

L sning

B lgefunksjonen har formen $R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$. De to komponentene normaliseres hver for seg

$$\int_{\Omega} Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

$$\int_0^{\infty} (R_{nl}(r))^2 r^2 dr = 1$$

- Normaliseringskonstanten for $n = 2$, $l = 0$ er bestemt av

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^{\infty} R_{20}^2(r) r^2 dr = N_{20}^2 \int_0^{\infty} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} r^2 dr \\ &= N_{20}^2 a_0^3 \int_0^{\infty} (2 - t)^2 t^2 e^{-t} dt = N_{20}^2 a_0^2 \int_0^{\infty} (4t^2 - 4t^3 + t^4) e^{-t} dt \\ &= N_{20}^2 a_0^3 (4\Gamma(3) - 4\Gamma(4) + \Gamma(5)) = 8N_{20}^2 a_0^3 \end{aligned}$$

og $N_{20} = 1 / (2\sqrt{2a_0^3})$. Γ -funksjonene er gitt i Rottman side 104.

Normaliseringskonstanten for $n = 2$, $l = 1$ er bestemt av

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^{\infty} R_{21}^2(r) r^2 dr = N_{21}^2 \int_0^{\infty} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} r^2 dr \\ &= N_{21}^2 a_0^3 \int_0^{\infty} t^4 e^{-t} dt = 24N_{21}^2 a_0^3 \end{aligned}$$

og $N_{21} = 1 / (2\sqrt{6a_0^3})$.

b) Sannsynligheten for å finne partikkelen i området $\langle r, r + dr \rangle$ er gitt ved

$$P_{21}(r)dr = (R_{21}(r))^2 r^2 dr = N_{21}^2 \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} r^2 dr$$

Maksimum sannsynlighet er gitt ved

$$\frac{dP_{21}(r)}{dr} = \frac{N_{21}^2}{a_0^2} \left(4r^2 - \frac{r^4}{a_0} \right) e^{-r/a_0} = 0$$

som gir $r_{21}(maks) = 4a_0$. Bohrs atommodell gir følgende kvantiseringsbetingelse $r_n = n^2 a_0$ og med samme resultat $r_{21}^{(Bohr)} = 4a_0$.

c) Sannsynligheten for å finne partikkelen innenfor en Bohr radius er gitt ved

$$\int_0^{a_0} P_{21}(r) r^2 dr = N_{21}^2 \int_0^{a_0} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} r^2 dr = (N_{21})^2 a_0^3 \int_0^1 t^4 e^{-t} dt$$

Dette integralet kan løses ved delvis integrasjon

$$\begin{aligned} \int_0^1 t^n e^{-t} dt &= -e^{-1} + n \int_0^1 t^{n-1} e^{-t} dt \\ &= n! - (1 + n + n(n-1) + \dots + n!) e^{-1} \end{aligned}$$

og

$$\int_0^{a_0} P_{21}(r) r^2 dr = 1 - \frac{65}{24} e^{-1} = 0.0036$$

d) Den tilsvarende beregning for $n = 2, l = 0$ gir

$$\begin{aligned} \int_0^{a_0} P_{20}(r) r^2 dr &= N_{21}^2 \int_0^{a_0} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} r^2 dr \\ &= \frac{1}{8} \int_0^1 (4t^2 - 4t^3 + t^4) e^{-t} dt = 1 - \frac{21}{8} e^{-1} = 0.034 \end{aligned}$$

Begge tilstandene $n = 2, l = 0$ og $n = 2, l = 1$ har det meste av sin sannsynlighets tetthet for $r > a_0$, men p-tilstanden, $n = 2, l = 1$ er den vesenlig mindre for små r på grunn av sentrifugalbarrieren $-l(l+1)/r^2$ i Hamilton operatoren.

Oppgave 7.5, Eksamen V-1993

Energi egenverdligningen for et elektron i et hydrog n-atom er gitt ved

$$\hat{H}_0 \psi_{nlm_l} = -E_0 \frac{1}{n^2} \psi_{nlm_l},$$

hvor E_0 er en konstant.

a) Sett opp Hamilton-operatoren \hat{H}_0 og skriv ned hvilke betingelser kvantetallene n, l og m_l m  oppf lle.

Kvantetallet m_l tilfredsstiller egenverdi-ligningen

$$\left(\frac{d^2}{d\phi^2} + m_l^2 \right) \Phi(\phi) = 0.$$

b) Finn $\Phi(\phi)$ (normering er unødvendig) og vis hvilke betingelser randkravene for Φ gir på m_l .

Bølgefunksjonen for s -tilstanden med $n = 2$ er gitt ved

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{\rho}{2} \right) \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right), \quad \rho = \frac{r}{a_0}$$

c) Vis at bølgefunksjonen er normert. (Forslag: Bruk $\int_0^\infty \rho^k e^{-\rho} d\rho = k!$, hvor k er et heltall.) Finn middelveiden (forventningsverdien) for radien $\langle r_{2,0,0} \rangle$ og den radius som elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i. Forklar kort hvorfor det er forskjell i disse to radiene.

Anta at Hamilton-operatoren har et ekstra ledd gitt ved

$$\hat{H}_1 = \frac{E_0}{16\hbar^2} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2).$$

d) Finn egenverdiene for $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$. Tegn alle energinivåene med $n = 1$ og 2 før og etter \hat{H}_1 leddet er innført. Hvilken degenerasjon har nivåene i de to tilfellene?

Kort fasit

a) Hamilton operatoren har formen

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

hvor $n \geq 1$, ($n = 1, 2, 3, \dots$), $l \leq n - 1$, ($l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$)
og $|m_l| \leq l$, ($m_l = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l$).

b) Løsningen er $\Phi(\phi) = C e^{im_l\phi}$ og randkravet $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ gir $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

c) Normering

$$N = \int \psi_{200}^* \psi_{200} \rho^2 a_0^3 \sin\theta d\theta d\phi d\rho = 1$$

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2} \int_0^\infty (\rho^3 - \rho^4 + \frac{1}{4}\rho^5) e^{-\rho} d\rho = 6a_0$$

For å finne den radius elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i, tar utgangspunkt i $P = r^2 e^{-r/a_0} (2 - r/a_0)^2$ og krever $dP/dr = 0$. Det gir

$$r(2 - \frac{r}{a_0})(4 - 6\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{a_0^2}) = 0.$$

med følgende løsninger: $r_1 = 0$, $r_2 = 2a_0$, og $r_{3,4} = (3 \pm \sqrt{5})a_0$. Innsatt i likningen for P , finner vi at den r som gir maksimum er

$$r = r_3 = a_0(3 + \sqrt{5})$$

Forskjellen i r skyldes at fordelingen $P(r)$ er skjev (usymmetrisk) med hale for store r .

d) Vi kan omforme ekstraledet til $\hat{\mathbf{H}}_1 = (E_0/16\hbar^2)(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_z^2)$. Dette gir egenverdligningen

$$(\hat{\mathbf{H}}_0 + \hat{\mathbf{H}}_1) \psi_{nlm_l} = E_0 \left(-\frac{1}{n^2} + \frac{1}{16}(l(l+1) - m_l^2) \right) \psi_{nlm_l}.$$

Dette gir energinivåer:

- a) $n = 0, l = 0, m_l = 0$, degenerasjon = 1
- b) $n = 1, l = 0, m_l = 0$, degenerasjon = 1
- c) $n = 1, l = 1, m_l = 0$, degenerasjon = 1
- $n = 1, l = 1, m_l = \pm 1$, degenerasjon = 2

Oppgave 7.6, Eksamen V-1994

Vi skal i denne oppgaver først se på et 1-dimensjonalt kvantemekanisk problem. Bølgefunksjonen for grunntilstanden for en partikkel med masse m er gitt ved

$$\psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{1}{2}a^2x^2\right).$$

hvor A er en normaliseringskonstant.

- a) Sett opp energi egenverdligningen for partikkelen og bestem den potensielle energien $V(x)$ som gir $\psi_0(x)$ som løsning for grunntilstanden. Finn grunntilstandsenergien E_0 .
- b) Finn normaliseringskonstanten A .
- c) Vis at

$$\psi_1(x) = \sqrt{2}ax\psi_0(x)$$

også er løsning av egenverdligningen under a). Finn den tilsvarende energien E_1 .

- d) Beregn $\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle$, $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$, $\langle \hat{\mathbf{x}}^2 \rangle$ og $\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle$ for grunntilstanden $\psi_0(x)$.
- e) Uskarpheten for en operator i kvantemekanikken er definert ved

$$\Delta A = \sqrt{\langle \hat{\mathbf{A}}^2 \rangle - \langle \hat{\mathbf{A}} \rangle^2}.$$

Bruk dette til å finne $\Delta x \cdot \Delta p$ for grunntilstanden $\psi_0(x)$. Kommentér resultatet.

Vi skal gå over til å studere problemet ovenfor i tre dimensjoner. Den potensielle energien $V(x)$ overføres til $V(r)$, i.e. samme funksjon, men nå avhengig av den radielle avstanden r .

- f) Sett opp egenverdligningen i det tre-dimensjonale tilfelle og vis at funksjonen

$$\Phi_{n,p,q}(x, y, z) = \psi_n(x)\psi_p(y)\psi_q(z),$$

er en løsning hvor $n, p, q = 0, 1, 2, \dots$. Angi degenerasjonen for grunntilstanden og den første eksiterte tilstanden.

- g) Egenfunksjonene i det tre-dimensjonale tilfellet vil samtidig være egenfunksjoner for banespinn operatorene $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{\mathbf{L}}_z$. Finn verdier for kvantetallene l og m_l for operatorene $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{\mathbf{L}}_z$ i grunntilstanden $\Phi_{0,0,0}$.

Kort fasit

- a) $V(x) = (\hbar^2 a^4 / 2m)x^2$, $E_0 = (\hbar^2 a^2 / 2m)$.
- b) $A = (a^2 / \pi)^{1/4}$.
- c) $E_1 = 3E_0$.
- d) $\langle x \rangle = 0$, $\langle p \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle = (1/2)a^2$, $\langle p^2 \rangle = (1/2)\hbar^2 a^2$
- e) $\Delta x \cdot \Delta p = (1/2)\hbar$
- f) Degenerasjonen av grunntilstand er 1, av 1. eksiterte 3.
- g) $l = 0$, $m_l = 0$.

Oppgave 7.7

En partikkel med masse m beveger seg i et tre-dimensjonalt harmonisk oscillator potensial med potensiell energi $V(r) = (1/2)kr^2$, hvor k er en konstant. Dette systemet skal vi først studere ved bruk av Bohrs atomteori

- a) Sett opp Bohrs kvantiserings betingelse og bruk den til å beregne energien og r^2 for alle tillatte sirkulære baner for partikkelen.

Vi skal deretter studere det samme problem ved bruk av Schrödingers kvantemekanikk.

- b) Sett opp systemets Hamilton operator og vis at

$$\psi(\vec{r}) = N \exp(-\alpha r^2)$$

er en egentilstand for systemet for en bestemt verdi av α og finn energi egenverdien.

- c) Beregn $\langle \hat{r}^2 \rangle$ for systemet i tilstanden $\psi(\vec{r})$ og sammenlign resultatet med punkt a).

7.5.2 Numeriske oppgaver**Oppgave 7.8**

Vi skal her studere hydrogenatomet og vi skal bl.a. se på den radielle schrödingerlikningen. I den numeriske biten skal vi normere de bølgefunksjonene vi har funnet numerisk, og dette krever en del spennende teknikker i f.eks. Maple.

Vi skal se på $1s$ -, $2s$ - og $2p$ -tilstandene i atomet. I motsetning til numerisk oppgave 2, skal vi ikke lete etter egenverdiene for energien; de er gitt i oppgaven.

Analytisk del

Vi ser på den radielle schrödingerlikningen. Det er vanlig å sette $u(r) = rR(r)$, og løse likningen m.h.p. denne:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \left(\frac{ke^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = Eu(r). \quad (7.115)$$

Vi ser at denne likningen er ekvivalent med den endimensjonale schrödingerlikningen, men under et effektivt potensial:

$$V_{\text{eff}} = -\frac{ke^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \quad (7.116)$$

- a) Forklar kort hva symbolene $1s$, $2s$ og $2p$ står for, og hvorfor energiene til $2s$ og $2p$ er like.
- b) I den numeriske løsningen innfører vi en dimensjonsløs variabel $\rho = r/\beta$, hvor β er en eller annen konstant. Vis at vi da kan omskrive (7.115) til:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(\rho)}{\partial \rho^2} - \frac{mke^2\beta}{\hbar^2 \rho} u(\rho) + \frac{l(l+1)}{2\rho^2} u(\rho) = \frac{m\beta}{\hbar^2} E u(\rho). \quad (7.117)$$

Vi kan velge oss en gunstig β ved å sette

$$\frac{mke^2\beta}{\hbar^2} = 1. \quad (7.118)$$

Kjenner du igjen hva β er for noe? (Hint: Tenk på Bohr!) Vi innfører deretter en *skalert egenverdi* λ ved:

$$\lambda = \frac{m\beta^2}{\hbar^2} E. \quad (7.119)$$

Vis nå, ved innsetting av β og den eksakte verdien $E = E_0/n^2$, der $E_0 = (\frac{ke^2}{\hbar})^2/2$, at

$$\lambda = -\frac{1}{2n^2}.$$

Numerisk del

- c) Den likningen vi skal løse numerisk er altså gitt ved

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(\rho)}{\partial \rho^2} - \frac{u(\rho)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{2\rho^2} u(\rho) - \lambda u(\rho) = 0. \quad (7.120)$$

Se på tilstandene $1s$ og $2s$. Her bør du ikke velge $\rho = 0$ for randbetingelsene, da dette vil gi en numerisk divergens. (Merk at i likningen så deler vi på ρ !) Velg heller en liten verdi, for eksempel $\epsilon = 10^{-8}$, hver gang du skal bruke “null” i randbetingelsene.

Fremstill de radielle bølgefunksjonene grafisk. Forklar kort hvorfor de er forskjellige. For hvilken verdi av ρ vil $R(\rho)$ gå mot null?

Neste underoppgave går litt i dybden omkring egenverdier og tilhørende egenfunksjoner. Vi skal egentlig “leke litt,” og i en senere numerisk oppgave skal vi anvende resultatene herfra direkte i den såkalte *shooting method* for å finne egenverdier numerisk.

Det kan være en fordel å studere kapittel 5-6 i læreboka (Eigenfunctions and Eigenvalues).

- d) Vi skal nå undersøke hva som skjer med bølgefunksjonen dersom vi velger en verdi for λ som *ikke* er på formen $-1/n^2$. Velg henholdsvis en verdi som er *litt for høy* og en som er *litt for lav* i forhold til en egenverdi, og fremstill de resulterende bølgefunksjonene du får ved løsning av (7.120) grafisk. Kommentér resultatet. Prøv å forklare formen til de ulike bølgefunksjonene.
- e) Finn bølgefunksjonen for tilstanden $2p$. Her kan du få bruk for at for små verdier av ρ er $u(\rho) \sim \rho^{l+1}$. Dette gir noe ulike randbetingelser på $u(\rho)$.

Fremstill sannsynlighetstettheten sammen med det effektive potensialet grafisk, og forklar hvorfor sannsynligheten for å finne et elektron nær kjernen er mindre for $2p$ -tilstanden enn for $2s$ -tilstanden.

Kapittel 8

HYDROGENATOMET

You know, it would be sufficient to really understand the electron. *Albert Einstein*

8.1 Elektronets spinn

I forrige kapittel så vi at det frie hydrogenatomet utviste en degenerasjon i energien, dvs. flere tilstander med ulike kvantetall m_l og l hadde samme energi for samme verdi av kvantetallet n . Denne degenerasjonen skyldes at Coulomb potensialet har en sfærisk symmetri. I dette avsnittet skal vi se at når vi setter på et magnetfelt i en bestemt retning opphever vi denne symmetrien og dermed også degenerasjonen i energi. Konkret skal vi se på den såkalte Zeeman effekten, elektronets egenspinn, spinn-bane vekselvirkningen og deres innvirkning på energispekteret til hydrogenatomet. Vi avslutter med å se på regler for såkalla elektriske dipoloverganger.

Egenskapene vi utleder her vil være av betydning for vår forståelse og studier av det periodiske system. Kvantetallene vi har for å beskrive et system er basert på symmetrien til vekselvirkningen, og mye av den innsikt vi finner ved å studere hydrogenatomet kan overføres til andre fagfelt, som f.eks. molekylfysikk, kjernefysikk og partikkelfysikk.

8.1.1 Zeeman effekten

En ladd partikkel¹ med ladning q som beveger i en sirkulær sløyfe med radius r og med en hastighet v setter opp en strøm i

$$i = \frac{q}{T} = \frac{qv}{2\pi r}. \quad (8.1)$$

En slik strøm i en sirkulær bane setter igjen opp et magnetisk dipolmoment μ_L , hvis absoluttverdi er gitt ved

$$|\mu_L| = iA, \quad (8.2)$$

hvor A er sløyfas areal. Vi kan uttrykke dette dipolmomentet vha. banespinnet L . Absoluttverdien av banespinnet er gitt ved $|\mathbf{L}| = mvr$, som innsatt i uttrykket for μ_L gir

$$|\mu_L| = iA = \frac{qv}{2\pi r} \pi^2 r^2 = \frac{qvr}{2}, \quad (8.3)$$

eller

$$\frac{|\mu_L|}{|\mathbf{L}|} = \frac{qvr}{2mvr} = \frac{q}{2m}. \quad (8.4)$$

¹Lesehenvisning er kap. 8-1, 8-2 og 8-3, sidene 375-389.

Siden elektronet har negativ ladning $q = -e$, finner vi

$$|\mu_L| = -\frac{e}{2m}|\mathbf{L}|, \quad (8.5)$$

eller som vektorer

$$\mu_L = -\frac{e}{2m}\mathbf{L}. \quad (8.6)$$

Dersom vi setter på et magnetisk felt, får vi et kraftmoment på strømsløyfa gitt ved

$$\tau = \mu_L \times \mathbf{B}, \quad (8.7)$$

som igjen gir en potensiell energi

$$\Delta E = -\mu_L \mathbf{B}. \quad (8.8)$$

Det er vanlig å introdusere en størrelse som kalles Bohrmagneton μ_B definert som

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}, \quad (8.9)$$

hvis verdi er $\mu_B = 9.274 \times 10^{-24}$ J/T (T står for Tesla), eller dersom vi ønsker å bruke eV/G, hvor $1\text{T} = 10^4\text{G}$ (hvor G står for Gauss) har vi $\mu_B = 5.733 \times 10^{-9}$ eV/G. Vi kan da omskrive bidraget til den potensielle energien ΔE vha. banespinn L til

$$\Delta E = \frac{e}{2m}\mathbf{L}\mathbf{B} = \frac{g_L\mu_B}{\hbar}\mathbf{L}\mathbf{B}, \quad (8.10)$$

hvor $g_L = 1$ og er en faktor som uttrykker forholdet mellom ladningsfordelingen og massefordelingen. Vi har introdusert den her for å ha en viss symmetri i likningene når vi i neste underavsnitt skal se på elektronets egenspin.

Det siste uttrykket, med unntak av faktoren \hbar , er utleda fra klassisk fysikk. Det vil si igjen at energien ΔE kan ta alle mulige verdier som er tillatt av vinkelen mellom \mathbf{L} og \mathbf{B} . Vi har da et kontinuerlig sett av verdier for ΔE . Vi skal se straks at kvantemekanisk er ikke dette tilfelle, kun bestemte verdier for ΔE er tillatte.

Dersom vi setter på et magnetisk felt i retning z -aksen, B_z , vil energien ΔE ha sin maksimale eller minimale verdi når banespinn L_z , dvs. at vinkelen mellom B -feltet og banespinn L er null. Klassisk får vi da følgende uttrykk for Hamiltonfunksjonen H for et elektron som går i bane rundt et proton og med et påsatt magnetfelt langs z -aksen B_z

$$H_{\text{klassisk}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{ke^2}{r} + \frac{e}{2m}L_zB_z = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{ke^2}{r} + \frac{g_L\mu_B}{\hbar}L_zB_z. \quad (8.11)$$

Dersom vi nå erstatter den klassiske bevegelsesmengde med den tilsvarende kvantemekaniske operator $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ og den tilsvarende operator for banespinnets projeksjon på z -aksen $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$, finner vi at den kvantemekaniske hamiltonfunksjonen er gitt ved

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{ke^2}{r} + \frac{e}{2m}\hat{L}_zB_z. \quad (8.12)$$

Vi merker oss at den nye hamiltonfunksjonen kan skrives som den vi hadde fra kapittel 7,

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{ke^2}{r}, \quad (8.13)$$

pluss et ledd som avhenger av banespinnets projeksjon langs z -aksen, dvs.

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_0 + \frac{e}{2m} \hat{\mathbf{L}}_z B_z. \quad (8.14)$$

Siden B -feltet er kun en konstant virker det ikke på en bølgefunksjon. Da vi har at

$$[\hat{\mathbf{H}}_0, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{\mathbf{H}}_0, \hat{\mathbf{L}}_z] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_z] = 0, \quad (8.15)$$

må vi også ha

$$[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{H}}_0] = [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{L}}_z] = 0, \quad (8.16)$$

som igjen betyr at $\hat{\mathbf{H}}$, $\hat{\mathbf{H}}_0$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{\mathbf{L}}_z$ har samme egenfunksjon ψ som vi fant for det frie hydrogenatomet. B -feltet er konstant, slik at når vi opererer på en bølgefunksjon for hydrogenatomet $\psi(r, \theta, \phi)$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi), \quad (8.17)$$

har vi

$$\frac{e}{2m} B_z \hat{\mathbf{L}}_z \psi_{nlm_l} = \frac{e}{2m} B_z m_l \hbar \psi_{nlm_l}, \quad (8.18)$$

eller vha. Bohrmagnetonen finner vi at

$$\frac{g_L \mu_B}{\hbar} B_z \hat{\mathbf{L}}_z \psi_{nlm_l} = m_l \mu_B B_z \psi_{nlm_l}. \quad (8.19)$$

Dette gir oss at

$$\hat{\mathbf{H}} \psi_{nlm_l} = \hat{\mathbf{H}}_0 \psi_{nlm_l} + m_l \mu_B B_z \psi_{nlm_l}. \quad (8.20)$$

Fra kapittel 7 har vi

$$\hat{\mathbf{H}}_0 \psi_{nlm_l} = E_n \psi_{nlm_l}$$

hvor $E_{nl} = E_0/n^2$ med $E_0 = -13.6$ eV. Den totale energien blir dermed

$$E_{nlm_l} = \frac{E_0}{n^2} + m_l \mu_B B_z \quad (8.21)$$

For $l \neq 0$ ser vi at vi opphever degenerasjonen i energi for de ulike verdiene av m_l .

Ser vi konkret på tilfellet for $n = 2$ og $l = 1$, dvs. en såkalt $2p$ tilstand finner vi følgende tre energieigenverdier når vi setter på et magnetfelt langs z -aksen

$$E_{21+1} = \frac{E_0}{4} + \mu_B B_z,$$

$$E_{21-1} = \frac{E_0}{4} - \mu_B B_z,$$

og

$$E_{210} = \frac{E_0}{4},$$

som er lik energien for E_{200} slik at for $m_l = 0$ er $2s$ og $2p$ fremdeles degenererte. Denne oppsplittingen av nivåene pga. et påsatt magnetfelt blei observert allerede i 1896 av den hollandske fysiker Zeeman. Men forklaringen kom først med kvantemekanikken og kvantisering av banespinn. Kun bestemte nivåer er tillatt, og ikke et kontinuerlig sett slik klassisk fysikk gir. Effekten kalles den normale Zeeman effekten. Vi skal merke oss her at vi har opphevd degenerasjon i m_l som vi så i forrige avsnitt for det frie hydrogenatomet. I det tilfellet ga den sfæriske symmetrien til Coulomb potensialet at alle m_l for en gitt verdi av kvantetallet n hadde samme energi.

8.1.2 Elektronets spinn og den anomale Zeeman effekten

Eksperiment² på 20-tallet i forrige århundre leda til postulering av elektronets egenspinn, med verdi $s = 1/2$ og kvantisering langs z -aksen på $m_s \pm 1/2$, noe som svarer til en degenerasjon på $2s + 1 = 2$ dersom vi trekker en parallell til banespinn l med degenerasjon i m_l på $2l + 1$.

Et elektron har, i tillegg til et banespinn L , også et egenspinn S som har en diskret verdi $1/2$. Klassisk finnes det ikke noen tilsvarende tilfeller, dog kan vi tenke oss en analogi til jorda som går i bane rundt sola. Jorda har dermed et banespinn L i sitt kretsløp rundt sola på et år. Men i tillegg roterer jorda om sin egen akse, som igjen gir opphav til dag og natt. Dette siste rotasjonsspinnet kan vi tenke på som en analogi til elektronets egenspinn. Goudsmit og Uhlenbeck, som postulerte at elektronet har et egenspinn, forestilte seg at elektronet kunne tenkes som en liten kule som roterer om sin egen akse. Problemet med slike analogier burde være opplagt, mens vi ikke har noen problemer med å forestille oss jorda som tilnærma sfærisk, viser eksperiment at elektronet har en utstrekning på maks 10^{-16} m, slik at vi kan betrakte det som nærmest en punktpartikkel. En kjerne har f.eks typiske radiuser på 10^{-14} m, mens hydrogenatomet, som vi så i forrige avsnitt, har en midlere radius på $3/2$ Bohrradier, ca. 0.08 nm.

Før vi diskuterer eksperimentene som leda til elektronets spinn, er det noen sider ved teorien vi har utvikla til nå som kan være verd litt ettertanke. Dersom vi utelukker egenspinnet som et eget kvantetall, har vi sett at vi trenger tre kvantetall for å beskrive elektronet i hydrogenatomet. Det skyldes at vi har tre uavhengige koordinater som trengs for å beskrive elektronets posisjon. Hver frihetsgrad gir opphav til et kvantetall! Fra et klassisk ståsted kan vi dermed si at det er bare rom for tre kvantetall. Med elektronets egenspinn har vi et nytt kvantetall. Men elektronet er ikke en klassisk partikkel.

I Schrödingers likning har vi ikke noe problem med å innpasse et nytt kvantetall som elektronets egenspinn, men teorien vår forutsier ikke denne egenskapen. **Vi må derfor innafor ramma av Schrödingers likning postulere egenspinnet til elektronet.** Ei heller gir den oss massen til elektronet.

Det faktum at spinnet også kun tar verdien $1/2$ betyr at vi ikke kan ta den klassiske grensa for store kvantetall, gitt ved korrespondanseprinsippet. Vi kan sjølsagt gjenvinne den klassiske grense ved å la $\hbar \rightarrow 0$, men siden elektronet ikke er en klassisk partikkel, vi bør derfor være forsiktige når skal vi trekke paralleller til klassiske systemer.

Eksperimentet som leda til postuleringen av elektronets egenspinn kom fra studier av sølvatomer i 1921 av Stern og Gerlach. De sendte sølvatomer gjennom et inhomogent magnetfelt for å studere kvantisering av banespinn. I et inhomogent magnetfelt, vil igjen en magnetisk dipol gi opphav til en korleksjon til den potensielle energien gitt ved $U = -\mu_L B$, som svarer til en kraft som virker på atomet gitt ved (vi velger for enkelthetsskyld ei kraft i z -retning)

$$F_z = -\frac{\partial U}{\partial z} = \mu_L \frac{\partial B_z}{\partial z}, \quad (8.22)$$

som viser at krafta F_z er proporsjonal med μ_L . Kvantemekanisk og klassisk har vi sett at μ_L er proporsjonal med banespinn. Men kvantemekanikken gir oss kun diskrete verdier for banespinn. Fra foregående underavsnitt har vi sett at projeksjonen av L på z -aksen ga opphav til et sett med energier som var proporsjonal med m_l , hvor m_l kan anta $2l + 1$ mulige verdier. En skulle derfor i eksperimentet kunne observere $2l + 1$ nivå. For sølvatomer i grunntilstanden med banespinn null skulle de ikke observere noen som helst avhengighet av magnetfeltet. Eksperimentene viste derimot at strålen av sølvatomer blei avbøyd i to diskrete komponenter, en som var avbøyd i positiv z -retning og en i negativ z -retning. Phipps og Taylor gjentok et tilsvarende eksperiment men da for hydrogenatomer i grunntilstanden i 1927, fremdeles med $l = 0$. En tilsvarende oppsplitting blei observert.

²Lesehenviing er kap. 84. og 8-5, sidene 390-397.

Enten er noe galt med teorien vår ellers er det noe som mangler. I tillegg skal vi merke oss at $2l + 1$ gir et oddetall nivåer, mens her har vi kun to. Goudsmit og Uhlenbeck foreslo i 1925 at denne oppsplittingen skyldes at elektronet kan betraktes som en roterende ladning, en spinnende ladning. Elektronet har altså et innbygd dipolmoment. Først med Diracs formulering av en relativistisk kvantemekanikk, var en istand til å lage en teori som inneholdt denne frihetsgraden til elektronet. Innafor ramma av Schrödingers ikke-relativistiske kvantemekanikk er vi nødt til å postulere denne egenskapen. Oppsummert har vi følgende.

- Oppsplittingen skyldes det magnetiske dipolmomentet til elektronet.
- Elektronet har et egenspin som vi kaller \mathbf{S} som gir opphav til et dipolmoment (på lik linje med uttrykket for dipolmomentet pga. banespinnet)

$$\mu_S = -g_S \frac{e}{2m} \mathbf{S}, \quad (8.23)$$

hvor g_S kalles den gyromagnetiske faktor. Denne størrelsen er forskjellig fra 1 da elektronet ikke kan betraktes som et sfærisk legeme med konstant forhold mellom ladning og masse. Denne faktoren er målt til å være

$$g_S = 2.00232.$$

- Siden vi har ei oppsplitting i kun to nivåer for $l = 0$ postulerer vi at egenspinnet S har degenerasjon (igjen på lik linje med hva vi gjorde for l)

$$2s + 1 = 2, \quad (8.24)$$

som betyr at

$$s = \frac{1}{2}, \quad (8.25)$$

dvs. at elektronet har spinnverdi på $1/2$. Den kvantemekaniske spinnoperatoren $\hat{\mathbf{S}}$ har som forventningsverdi

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \chi = s(s+1) \hbar^2 \chi, \quad (8.26)$$

og

$$\hat{S}_z \chi = m_s \hbar \chi, \quad (8.27)$$

hvor χ er spinndelen av egenfunksjonen ψ . Kvantetallet m_s tar verdien $m_s = \pm 1/2$ og

$$|\hat{\mathbf{S}}| = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{3}. \quad (8.28)$$

Egenfunksjonen ψ er nå gitt ved

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi_{nlm_l s m_s}(r, \theta, \phi) = \psi_{nlm_l 1/2 m_s}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \chi_{sm_l}(s), \quad (8.29)$$

med følgende kvantetall og operatører (vi dropper (r, θ, ϕ) i uttrykket for egenfunksjonen ψ)

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{nlm_l 1/2 m_s} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{nlm_l 1/2 m_s}, \quad (8.30)$$

$$\hat{\mathbf{L}}_z \psi_{nlm_l 1/2 m_s} = m_l \hbar \psi_{nlm_l 1/2 m_s}, \quad (8.31)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \psi_{nlm_l 1/2 m_s} = \hbar^2 s(s+1) \psi_{nlm_l 1/2 m_s}, \quad (8.32)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_z \psi_{nlm_l 1/2 m_s} = m_s \hbar \psi_{nlm_l 1/2 m_s}. \quad (8.33)$$

Hamiltonfunksjonen vår tar nå følgende form med magnetfelt påsatt i z -retning

$$\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{ke^2}{r} + \frac{e}{2m}(g_L \hat{\mathbf{L}}_z + g_S \hat{\mathbf{S}}_z)B_z, \quad (8.34)$$

med egenverdilikning

$$\hat{\mathbf{H}}\psi_{nlm_l 1/2m_s} = E_{nlm_l 1/2m_s} \psi_{nlm_l 1/2m_s}, \quad (8.35)$$

med hamiltonoperatoren

$$\hat{\mathbf{H}} = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{ke^2}{r} + \frac{eB_z}{2m}(g_L \hat{\mathbf{L}}_z + g_S \hat{\mathbf{S}}_z) \right]. \quad (8.36)$$

Eigenverdien for energien er derved gitt

$$E_{nlm_l 1/2m_s} = \frac{E_0}{n^2} + \frac{eB_z}{2m}\hbar(g_L m_l + g_S m_s), \quad (8.37)$$

eller

$$E_{nlm_l 1/2m_s} = \frac{E_0}{n^2} + \mu_B B_z (g_L m_l + g_S m_s), \quad (8.38)$$

Dersom vi ser tilbake på $n = 2$ og $l = 1$ tilstanden fra forrige underavsnitt, ser vi at vi har nå 2 mulige m_s verdier, $m_s = \pm 1/2$ og tre mulige m_l verdier, $m_l = \pm 1$ og $m_l = 0$. Det gir oss totalt seks egenverdier for energien, slik at vi får en ytterligere oppsplitting av nivåene i forhold til den normale Zeeman effekten. Denne tilleggsoppsplittingen pga. elektronets egenspinnet kalles for den anomale Zeeman effekten. For $n = 2$ og $l = 1$ finner vi dermed følgende egenverdier. Siden vi nå har to mulige verdier for m_s

$$E_{21+1+1/2} = \frac{E_0}{4} + \mu_B B_z (g_L + \frac{g_S}{2}),$$

$$E_{21+1-1/2} = \frac{E_0}{4} + \mu_B B_z (g_L - \frac{g_S}{2}),$$

$$E_{210+1/2} = \frac{E_0}{4} + \frac{\mu_B B_z}{2} g_S,$$

$$E_{210-1/2} = \frac{E_0}{4} - \frac{\mu_B B_z}{2} g_S,$$

$$E_{21-1+1/2} = \frac{E_0}{4} + \mu_B B_z (\frac{g_S}{2} - g_L),$$

og

$$E_{21-1-1/2} = \frac{E_0}{4} - \mu_B B_z (g_L + \frac{g_S}{2}).$$

Vi merker oss at dersom g_S hadde vært eksakt lik 2, ville $E_{21+1-1/2}$ og $E_{21-1+1/2}$ ha samme verdi $E_0/4$. Tilsvarende er nå grunntilstanden for $n = 1$ og $l = 0$ oppsplitta i to nivåer istedet for et, nemlig

$$E_{100+1/2} = E_0 + \frac{\mu_B B_z}{2} g_S,$$

$$E_{100-1/2} = E_0 - \frac{\mu_B B_z}{2} g_S.$$

Siden $\mu_B = 5.733 \times 10^{-9}$ eV/G, trenger vi verdier for $B \sim 10^{10}$ G dersom korreksjonen pga. det magnetiske dipolmomentet fra banespinn og egenspinnet til elektronet skal være på størrelse med E_0 .

Det beste vi kanskje får til idag er magnetfelt på ca. $B \sim 10^4$ G, eller noen få Tesla. En antar at ved overflata på en nøytronstjerne kan en ha magnetfelt på størrelse med 10^{12} G. Det vil igjen si at nivåene til et atom som hydrogenatomet vil være svært forskjellige på ei nøytronstjerne sammenlikna med jorda. Sjøl om feltet er på størrelse med den maksimale verdi av B som er oppnåelig i labben, er korreksjonen veldig liten. Men den er observerbar og beretter på et vakkert vis om kvantisering av spinn og dermed brudd med klassisk fysikk. Kun bestemte verdier av energikorreksjonen $\mu_L B$ og $\mu_S B$ er tillatte.

8.1.3 Totalt spinn

I klassisk mekanikk spiller det totale banespinn en viktig rolle, da dets tidsderiverte er lik kraftmomentet på systemet under betraktning. På tilsvarende vis kan vi skrive det totale spinnet³ i kvantemekanikken som summen av banespinn og egenspinntilstand gitt ved

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \quad (8.39)$$

Siden denne formelen gjelder for både en-elektron systemer som hydrogenatomet og for atomer med flere elektroner, innfører vi her følgende notasjon. **Kvantetall som henviser til en-elektron tilstander gis små bokstaver. Kvantetall som representerer fler-elektron systemer gis store bokstaver.** De siste tilstandene er satt sammen av kvantetallene til et eller flere elektroner. Det er viktig at dere merker dere denne form for notasjon. Grunnen er at når vi ser på det periodiske systemet i neste kapittel, så kan vi bygge opp kvantetallene til et fler-elektron system ved å legge sammen en-elektron kvantetall.

Generelt kommer vi til å bruke store bokstaver for operatorene, dvs. at f.eks. det totale spinn er gitt $\hat{\mathbf{J}}$. Siden sistnevnte er satt sammen av $\hat{\mathbf{L}}$ og $\hat{\mathbf{S}}$ må den også utvise diskrete kvantetall J og M_J . Egenverdiene til det totale spinnet er dermed gitt ved

$$|\hat{\mathbf{J}}| = \hbar \sqrt{J(J+1)}, \quad (8.40)$$

og projeksjonen langs z -aksen (det magnetiske kvantetallet) er

$$J_z = M_J \hbar, \quad (8.41)$$

med følgende degenerasjon

$$M_J = -J, -J+1, \dots, J-1, J. \quad (8.42)$$

Med gitt verdi på L og S kan vi bestemme antallet mulige verdier av J ved å studere z -komponenten til $\hat{\mathbf{J}}$. Den er gitt ved

$$\hat{\mathbf{J}}_z = \hat{\mathbf{L}}_z + \hat{\mathbf{S}}_z. \quad (8.43)$$

Dersom vi ser bort ifra spinn-bane vekselvirkningen som vi skal diskutere i neste underavsnitt, vil både $\hat{\mathbf{L}}_z$ og $\hat{\mathbf{S}}_z$ ha kvantetall $L_z = M_L \hbar$ og $S_z = M_S \hbar$ slik at

$$M_J \hbar = M_L \hbar + M_S \hbar, \quad (8.44)$$

eller

$$M_J = M_L + M_S. \quad (8.45)$$

Siden maksimal verdi av M_L er L og M_S er S har vi

$$(M_J)_{\text{maks}} = L + S. \quad (8.46)$$

³Lesehenvisning er kap 8-8, sidene 405-410.

Nå skal vi utelukkende se på hydrogenatomet, da er $S = s = 1/2$. I tråd med notasjonen vi definerte ovenfor bruker vi nå små bokstaver for kvantetallene, men ikke operatorene, for en-elektroner systemer slik som hydrogenatomet. For hydrogenatomet har vi at maksimal verdi av $M_S = m_s = 1/2$ slik at vi får

$$(m_j)_{\text{maks}} = l + \frac{1}{2}. \quad (8.47)$$

Bruker vi (8.42) og det faktum at maksimal verdi av $M_J = m_j$ er j har vi at

$$j = l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, l - \frac{3}{2}, l - \frac{5}{2}, \dots \quad (8.48)$$

For å bestemme hvor denne rekka slutter kan vi bruke vektorulikheten

$$|\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}| \geq \left| |\hat{\mathbf{L}}| - |\hat{\mathbf{S}}| \right|. \quad (8.49)$$

Bruker vi $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ har vi

$$|\hat{\mathbf{J}}| \geq |\hat{\mathbf{L}}| - |\hat{\mathbf{S}}|, \quad (8.50)$$

eller

$$|\hat{\mathbf{J}}| = \hbar\sqrt{J(J+1)} \geq |\hbar\sqrt{L(L+1)} - \hbar\sqrt{S(S+1)}|, \quad (8.51)$$

og spesialisert vi det hele til hydrogenatomet med $s = 1/2$ finner vi

$$|\hat{\mathbf{J}}| = \hbar\sqrt{j(j+1)} \geq |\hbar\sqrt{l(l+1)} - \hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}|. \quad (8.52)$$

Det er deretter mulig å vise at for hydrogenatomet er det kun to mulige verdier av j som tilfredsstiller denne ulikheten, nemlig

$$j = l + \frac{1}{2} \text{ og } j = l - \frac{1}{2}, \quad (8.53)$$

og dersom $l = 0$ har vi

$$j = \frac{1}{2}. \quad (8.54)$$

Vi skal vente med eksempler og spektroskopisk notasjon til avsnitt 8.2. Før det skal vi først definere spinn-bane vekselvirkningen.

8.1.4 Spinn-bane vekselvirkningen

Spinn-bane vekselvirkningen⁴ skyldes et internt magnetisk felt som settes opp av protonet (kjernen) og som kopler til elektronets spinn og gir opphav til korreksjon til bindingsenergien. For et atom slik som hydrogenatomet er denne korreksjonen liten i forhold til energien $E_n = E_0/n^2$, hvor $E_0 = -13.6$. Typisk er den 4-5 størrelsesordener mindre enn bindingsenergien E_n vi fant i avsnitt 7.4. Vi skal rekne på dette nedenfor. Denne korreksjonen, som er proporsjonal med finstrukturkonstanten α

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c},$$

gir opphav til en oppsplitting og finstruktur i energispektret. For tyngre atomer, er feltet som settes opp av kjernen større, og dermed blir også spinn-bane vekselvirkningen viktigere. Før vi går videre er det viktige å skille to ting.

⁴Lesehenvielse er kap 8-9, sidene 410-416.

- For hydrogenatomet har vi sett at energien er degenerert, for en gitt verdi av hovedkvantetallet n har vi $2n^2$ mulige tilstander. Alle disse tilstandene har samme energi. Når vi setter på et ytre magnetfelt kan vi oppheve denne degenerasjonen.
- Finstrukturen pga. spinn-bane vekselvirkningenskyldes et magnetisk felt satt opp av kjernen, og er derfor en korreksjon til energien som skyldes interne frihetsgrader, og ikke et ytre påsatt magnetisk felt.

La oss utlede uttrykket for spinn-bane vekselvirkningen. Argumentasjonen her følger et klassisk bilde⁵. Hittil har vi sett på energien og andre størrelser utifra kjernen som referanse ramme. Dersom vi derimot velger elektronet som referanse ramme, vil kjernen ha en hastighet $-\mathbf{v}$ og bevege seg i en sirkulær bane om elektronet. Det gir opphav til en strøm $\mathbf{j} = -Ze\mathbf{v}$, som igjen, i henhold til Ampere's lov, setter opp et magnetisk felt

$$\mathbf{B} = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}, \quad (8.55)$$

som ved bruk av banespinnet $\mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} = -m\mathbf{v} \times \mathbf{r}$ kan omskrives

$$\mathbf{B} = \frac{Ze\mu_0}{4m\pi} \frac{\mathbf{L}}{r^3}, \quad (8.56)$$

og bruker vi at

$$\epsilon_0\mu_0 = \frac{1}{c^2},$$

har vi

$$\mathbf{B} = \frac{Ze}{4mc^2\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{L}}{r^3}. \quad (8.57)$$

Elektronets dipolmoment satt opp av egenspinnet vekselvirker med det magnetiske feltet og gir et bidrag til energien. I underavsnitt 4.5.2 viste vi at dette dipolmomentet var gitt ved likning (4.163) og kunne skrives som

$$g_S \frac{e}{2m} \mathbf{S},$$

slik at bidraget til energien kan skrives som

$$\Delta E = g_S \frac{e}{2m} \mathbf{S} \cdot \frac{Ze}{4mc^2\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{L}}{r^3}. \quad (8.58)$$

Velger vi å sette $g_S = 2$ har vi

$$\Delta E = \frac{Ze^2}{4m^2c^2\pi\epsilon_0 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \quad (8.59)$$

Det finnes en ytterligere relativistisk korreksjon på samme form, den såkalte Thomas presesjonen, slik at den totale korreksjonen blir

$$\Delta E = V_{SL} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2\pi\epsilon_0 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \quad (8.60)$$

hvor vi har valgt å kalle denne korreksjonen til energien for V_{SL} . Dette er et klassisk uttrykk, og velger vi å introdusere kvantemekaniske operatører for banespinnet og egenspinnet har vi

$$V_{SL} = Z\alpha \frac{\hbar}{2m^2c} \frac{\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{r^3}, \quad (8.61)$$

⁵Spinn-bane vekselvirkningen er en relativistisk korreksjon og kan utledes formelt vha. relativistisk kvantemekanikk (FYS 303), men dette er utenfor pensum i FY102.

hvor vi har brukt definisjonen på finstrukturkonstanten α for å omskrive siste ledd.

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}) = \hat{\mathbf{L}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2, \quad (8.62)$$

som gir

$$\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{2}, \quad (8.63)$$

med den følge at vi kan skrive spinn-bane vekselvirkningen som

$$V_{SL} = Z\alpha \frac{\hbar}{4m^2c} \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{r^3}. \quad (8.64)$$

Dette er det generelle uttrykket, men siden vi legger vekt på hydrogenatomet i dette avsnittet, skal vi sette $S = s = 1/2$. Når Denne operatoren legges til hamiltonfunksjonen for hydrogenatomet, $\hat{\mathbf{H}}_0$ i likning (4.153), så kan ikke $\hat{\mathbf{L}}_z$ og $\hat{\mathbf{S}}_z$ lenger bestemmes skarpt. Vi velger derfor å klassifisere en tilstand vha. kvantetallene n, l, j og m_j . Vi kan da rekne ut virkningen av spinn-bane vekselvirkningen på en tilstand ψ_{nljm_j} gitt ved

$$V_{SL}\psi_{nljm_j} = Z\alpha \frac{\hbar}{4m^2c} \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{r^3} \psi_{nljm_j}, \quad (8.65)$$

som sammen med

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \psi_{nljm_j} = j(j+1)\hbar^2 \psi_{nljm_j}, \quad (8.66)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{nljm_j} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{nljm_j}, \quad (8.67)$$

og

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \psi_{nljm_j} = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)\hbar^2 \psi_{nljm_j} = \frac{3}{4}\hbar^2 \psi_{nljm_j}, \quad (8.68)$$

kan vi skrive

$$V_{SL}\psi_{nljm_j} = Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m^2c} \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{r^3} \psi_{nljm_j}. \quad (8.69)$$

Nå er ikke dette forventningsverdien av operatoren siden vi også har en avhengighet av r , og egenfunksjonen ψ er ikke en egenfunksjon for r , akkurat som den heller ikke er en egenfunksjon av bevegelsesmengden. Når vi da skal rekne ut bidraget til energien, må vi finne middelveiden

$$\langle V_{SL} \rangle = \int \psi_{nljm_j}^* V_{SL} \psi_{nljm_j} d\mathbf{r}, \quad (8.70)$$

som ved innsetting av hele operatoren er

$$\langle V_{SL} \rangle = Z\alpha \frac{\hbar}{4m^2c} \int \psi_{nljm_j}^* \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{r^3} \psi_{nljm_j} d\mathbf{r}, \quad (8.71)$$

eller

$$\langle V_{SL} \rangle = Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m^2c} \int \psi_{nljm_j}^* \frac{(j(j+1) - l(l+1) - 3/4)}{r^3} \psi_{nljm_j} d\mathbf{r}, \quad (8.72)$$

som ved ytterligere pynting gir

$$\langle V_{SL} \rangle = Z\alpha \frac{\hbar^3 (j(j+1) - l(l+1) - 3/4)}{4m^2c} \int \psi_{nljm_j}^* \frac{1}{r^3} \psi_{nljm_j} d\mathbf{r}. \quad (8.73)$$

Vi trenger å rekne ut forventningsverdien

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int \psi_{nljm_j}^* \frac{1}{r^3} \psi_{nljm_j} d\mathbf{r}, \quad (8.74)$$

som gir

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2}{a_0^3 n^3 l(l+1)(2l+1)}, \quad (8.75)$$

som vi igjen omskrives vha. av definisjonen på Bohrradien

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Ze^2 m} = \frac{\hbar}{Z\alpha mc},$$

til

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \left(\frac{Z\alpha mc}{\hbar n} \right)^3 \frac{2}{l(l+1)(2l+1)}. \quad (8.76)$$

Innsatt i uttrykket for forventningsverdien av spinn-bane vekselvirkningen har vi da følgende uttrykk

$$\langle V_{SL} \rangle = \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} mc^2 \left(\frac{(j(j+1) - l(l+1) - 3/4)}{l(l+1)(2l+1)} \right). \quad (8.77)$$

Vi kan forenkle dette uttrykket ytterligere dersom vi bruker at energien for hydrogenatomet gitt ved

$$|E_n| = \frac{|E_0|}{n^2},$$

hvor $E_0 = -13.6$ eV. Det siste leddet kan vi omskrive vha. av finstrukturkonstanten til

$$|E_0| = \frac{\alpha^2}{2} mc^2,$$

som innsatt i likning (8.77) gir

$$\langle V_{SL} \rangle = |E_n| \frac{Z^4 \alpha^2}{n} \left(\frac{(j(j+1) - l(l+1) - 3/4)}{l(l+1)(2l+1)} \right). \quad (8.78)$$

Vi merker oss at dette bidraget til energien er for små verdier av Z mye mindre enn E_n , da vi har finstrukturkonstanten kvadrert, dvs.

$$\alpha^2 \sim \left(\frac{1}{137} \right)^2.$$

Siden dette er en relativistisk korreksjon, ser vi at dersom vi øker Z så øker også spinn-bane vekselvirkningen. Dersom vi går tilbake til vår diskusjon av Bohratomet, så vi i likning (1.132) at hastigheten et elektron har i en bestemt Bohrbane n var gitt ved

$$v_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n \hbar}.$$

For små verdier av Z , slik vi har i hydrogenatomet, er dermed hastigheten bare noen få prosent av lyshastigheten, og vi kan trygt neglisjere relativistiske korreksjoner. Når vi øker ladningstallet derimot, kan hastigheten nå størrelser nær lyshastigheten. Dermed bør relativistiske effekter komme inn, og spinn-bane vekselvirkninger er en relativistisk korreksjon.

I en relativistisk formulering av kvantemekanikken følger spinn-bane vekselvirkningen automatisk. Her har vi brukt et tilnærmet klassisk bildet for å utlede denne korreksjonen.

Siden hydrogenatomet kun har to mulige j -verdier for en bestemt l ⁶, en for $j = l + 1/2$ og en for $j = l - 1/2$ trenger vi kun å studere to tilfeller.

La oss rekne ut denne korreksjonen til energien E_n .

1. $j = l + 1/2$ gir

$$\langle V_{SL} \rangle = |E_n| \frac{Z^4 \alpha^2}{n(l+1)(2l+1)}. \quad (8.79)$$

Den totale energien blir dermed

$$E_{nlj=l+1/2} = -|E_n| \left(1 - \frac{Z^4 \alpha^2}{n(l+1)(2l+1)} \right). \quad (8.80)$$

2. $j = l - 1/2$ gir

$$\langle V_{SL} \rangle = -|E_n| \frac{Z^4 \alpha^2}{nl(2l+1)}. \quad (8.81)$$

Den totale energien blir dermed

$$E_{nlj=l-1/2} = -|E_n| \left(1 + \frac{Z^4 \alpha^2}{nl(2l+1)} \right). \quad (8.82)$$

Vi kan deretter rekne ut hvor stor energiforskjellen er mellom to nivåer med samme verdi for l men ulik total j . Tar vi differansen mellom tilstandene med $j = l + 1/2$ og $j = l - 1/2$ finner vi

$$\delta_{SL} = |E_n| \frac{Z^4 \alpha^2}{nl(l+1)}. \quad (8.83)$$

Velger vi $n = 2$ og $l = 1$ og setter inn for finstrukturkonstanten, ladning $Z = 1$ og $|E_2| = 3.4 \text{ eV}$ finner vi

$$\delta_{SL} = 4.53 \times 10^{-5} \text{ eV}, \quad (8.84)$$

som er fem størrelsesordener mindre enn bindingsenergien for denne tilstanden. Derav følger også navnet finstruktur og det tilhørende navnet for α , siden energikorreksjoner er proporsjonal med finstrukturkonstanten.

8.2 Energispekter for hydrogenatomet

Vi skal oppsummere resultatene fra de foregående avsnitt og diskutere energispekteret til hydrogenatomet. Vi skal også innføre den klassiske spektroskopiske notasjonen for tilstander klassifisert ved gitte kvantetall.

I figur 8.1 har vi spektret til hydrogenatomet opp til $n = 4$ for energien når den er gitt ved hamiltonfunksjonen

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{ke^2}{r}.$$

⁶Det skyldes at egenspinnet er $s = 1/2$ siden vi har kun et elektron. For flerelektron systemer, som vi skal studere i neste kapittel, kan vi ha flere verdier for s .

Energien er gitt ved

$$E_n = \frac{E_0}{n^2},$$

med $E_0 = -13.6$ eV, grunntilstanden, eller normaltstanden. Energien er degenerert i dette tilfelle, og selvom vi har trekvantetall, hovedkvantetallet n , banespinnet l og dets projeksjons på z -aksen m_l , avhenger energien kun av n . Vi har en degenerasjon når vi inkluderer egenspinnet på $2n^2$. Hver l -verdi gir $2l + 1$ tilstander, i tillegg har vi to muligheter til pga. egenspinnet. Antall mulige tilstander er vist i parentes under nivået.

For en gitt n har vi at l kan ta verdier

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1.$$

Tilstander med ulike l -verdier gis den spektroskopiske notasjonen som vist i tabellen nedenfor.

Verdi av l	0	1	2	3	4	5	...
Notasjon	s	p	d	f	g	h	...
Antall tilstander	2	6	10	14	18	22	...

Vi skal utvide denne notasjonen i neste kapittel når vi diskuterer det periodiske systemet.

Setter vi på et ytre magnetfelt forandres hamiltonfunksjonen for figur 8.1 til

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{ke^2}{r} + \frac{eB_z}{2m} (g_L \hat{L}_z + g_S \hat{S}_z) \right],$$

med tilhørende energi

$$E_{nlm_l 1/2m_s} = \frac{E_0}{n^2} + \mu_B B_z (g_L m_l + g_S m_s).$$

Opphevingen av degenerasjonen pga. et ytre magnetfelt er vist i figur 8.2 for $n = 1$ og $n = 2$. I figur 8.2 har vi inntegna verdien på kvantetallene m_l og m_s .

Til slutt har vi spekteret for hydrogenatomet når vi tar hensyn til spinn-bane vekselvirkningen. I dette tilfelle har vi ikke noe ytre magnetfelt. Denne oppsplittingen skyldes kun indre frihetsgrader i hydrogenatomet. For $l = 0$ er spinn-bane vekselvirkninger null. Spekteret opp til $n = 3$ er vist i figur 8.3.

I dette tilfellet er energien gitt ved for $j = l + 1/2$

$$E_{nlj=l+1/2} = -|E_n| \left(1 - \frac{Z^4 \alpha^2}{n(l+1)(2l+1)} \right).$$

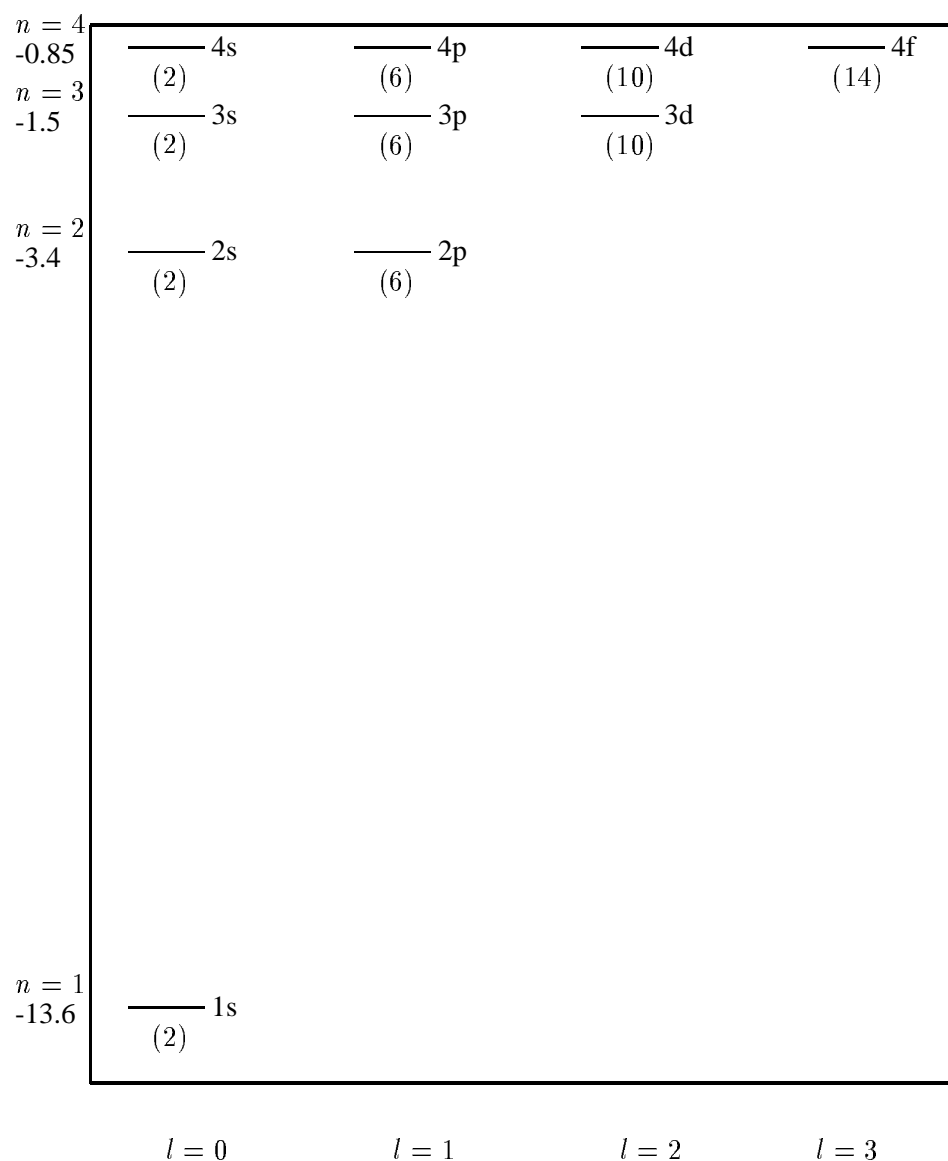
og for $j = l - 1/2$

$$E_{nlj=l-1/2} = -|E_n| \left(1 + \frac{Z^4 \alpha^2}{nl(2l+1)} \right).$$

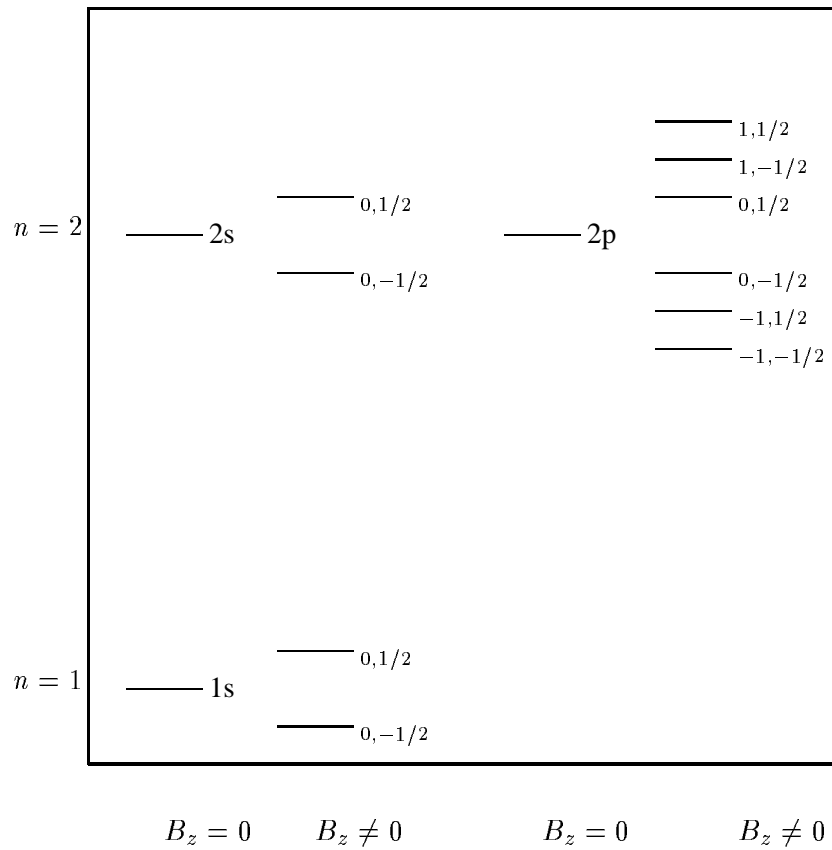
Når det gjelder spinn-bane vekselvirkningen og figur 8.3 har vi innført en notasjon som er standard i spektroskopi. Nivåene klassifiseres utifra banespinn L , spinn S og totalt spinn J . Notasjonen som brukes er

$$^{2S+1}L_J. \quad (8.85)$$

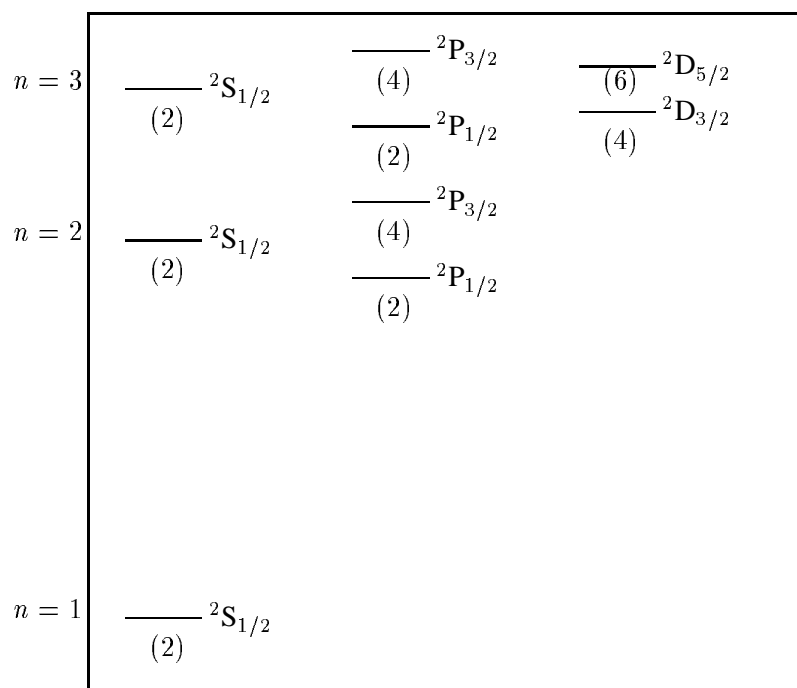
Istedet for små bokstaver for de ulike l -verdiene brukes store bokstaver, som vist i tabellen nedenfor



Figur 8.1: Energitilstander for hydrogenatomet uten spinn-banevekselvirkning og ytre påsatt magnetisk felt B . Energiene er i elektronvolt eV. Tallene i parentes representerer antall mulige tilstander gitt ved degenerasjonen $2l + 1$ samt egenspinnets degenerasjon $2s + 1 = 2$. Som eksempel, for $l = 2$ har vi en degenerasjon i m_l gitt ved $2l + 1 = 5$ I tillegg har vi 2 mulige spinnprojeksjoner m_s , slik at det totale antall tilstander er 10. Når vi setter på et ytre magnetisk felt er det mulig å se denne degenerasjonen.



Figur 8.2: Energitilstander for hydrogenatomet uten spinn-banevekselvirkning men med og uten ytre påsatt magnetisk felt B_z . Her ser vi kun på $n = 1$ og $n = 2$ tilstander. Kvantetallene m_l og m_s er inntegna ved hvert nivå. Avstanden mellom nivåene er kvalitativ. Den kvantitative forskjellen er gitt i teksten.



Figur 8.3: Energitilstander for hydrogenatomet med spinn-banevekselvirkning men uten ytre påsatt magnetisk felt B . Avstanden mellom nivåene er kvalitativ. Tallene i parentes representerer antall mulige tilstander gitt ved degenerasjonen $2j + 1$. Som eksempel, for $j = 3/2$ har vi en degenerasjon i m_j gitt ved 4. Når vi setter på et ytre magnetisk felt er det mulig å oppheve degenerasjonen i m_j .

Verdi av L	0	1	2	3	4	5	...
Notasjon	S	P	D	F	G	H	...

tilstand med $L = l = 1$, $S = s = 1/2$ og $J = j = 3/2$, skrives da som

$$^2P_{3/2}.$$

Tilsvarende, med $L = l = 2$, $S = s = 1/2$ og $J = j = 5/2$, skrives

$$^2D_{5/2}.$$

Det er denne notasjonen vi skal ta med oss når vi beveger oss over til det periodiske systemet.

Vi avslutter med å bemerke at dersom vi setter på et ytre magnetfelt, vil vi få en degenerasjon i m_j også. Det skal vi komme tilbake til i slutten av neste kapittel.

8.3 Elektrisk dipol overgangsregler

La oss anta at vi har to tilstander⁷

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r})e^{-iE_1t/\hbar}, \quad (8.86)$$

og

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = \psi_2(\mathbf{r})e^{-iE_2t/\hbar}. \quad (8.87)$$

med veldefinerte energier og egenfunksjoner.

Dersom vi nå rekner ut

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t)^* \Psi_1(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r})^* \psi_1(\mathbf{r}) \quad (8.88)$$

eller

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t)^* \Psi_2(\mathbf{r}, t) = \psi_2(\mathbf{r})^* \psi_2(\mathbf{r}) \quad (8.89)$$

ser vi at sannsynlighetstettheten er uavhengig av tiden t . Slike tilstander kalles stasjonære. Siden ladningsfordelingen er proporsjonal med sannsynlighetstettheten, betyr det også at ladningsfordelingen til f.eks. et elektron i grunntilstanden til hydrogenatomet er uavhengig av tiden. Det vil igjen si at vi har en statisk ladningsfordeling. En statisk ladningsfordeling sender ikke ut elektromagnetisk stråling. Dersom vi går tilbake til Bohrs tredje postulat om at elektronets energi i en gitt orbital er konstant, ser vi at kvantemekanikken som teori har innbakt Bohrs tredje postulat. Siden vi ikke kan ha emisjon av e.m. stråling fra grunntilstanden, betyr det igjen at elektronet i grunntilstanden ikke kan deaksellereres. Teorien vår gitt ved Schrödingers likning gir oss dermed muligheten for å beskrive stasjonære tilstander, dvs. tilstander som er stabile, uten at vi må postulere dette slik Bohr gjorde.

I tillegg kan vi beregne sannsynligheten for overganger fra en tilstand til en annen. Atomer som blir eksitert sender ut e.m. stråling og returnerer før eller siden til grunntilstanden.

La oss betrakte hydrogenatomet idet det er på vei fra en eksitert tilstand til en lavere liggende tilstand. La oss kalle den eksiterte tilstanden for 2 og den lavereliggende tilstanden for 1, med henholdsvis energi E_2 og E_1 og med de tilsvarende egenfunksjoner Ψ_2 og Ψ_1 definert ovenfor.

⁷Lesehenvisning er kap 7-5, sidene 366-373.

Denne prosessen kan nå beskrives som en superposisjon av tilstandene 1 og 2. Denne tilstanden er gitt ved

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = c_1 \Psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2 \Psi_2(\mathbf{r}, t) = c_1 \psi_1(\mathbf{r}) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2(\mathbf{r}) e^{-iE_2 t/\hbar}. \quad (8.90)$$

Kvantemekanikken tillater at elektronet i hydrogenatomet kan være i begge tilstander 1 og 2, med sannsynlighetstetthet

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t)^* \Psi(\mathbf{r}, t) &= c_1^* c_1 \psi_1^* \psi_1 + c_2^* c_2 \psi_2^* \psi_2 \\ &+ c_2^* c_1 \psi_2^* \psi_1 e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} + c_1^* c_2 \psi_1^* \psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar}. \end{aligned} \quad (8.91)$$

Vi har ikke lenger en stasjonær tilstand da sannsynlighetstettheten er en funksjon av tiden. Det betyr igjen at ladningstettheten oscillerer i tid med en frekvens gitt ved

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}. \quad (8.92)$$

Dersom vi tenker tilbake til FY101, så vil en slik ladningsfordeling sende ut e.m. stråling ved samme frekvens. Men dette er nøyaktig den samme frekvensen til fotonet, i henhold til Bohr og Einstein (se Bohrs fjerde postulat), som blir emittert ved en spontan emisjon, siden energien fotonet får er gitt ved $E_2 - E_1$.

Det enkleste bilde av et atoms ladningsfordeling som oscillerer er det elektriske dipolmomentet. Fra FY101 vet vi at dette er produktet av elektronets ladning og forventningsverdien av \mathbf{r} , hvor r er avstanden fra elektronet til kjernen. Det elektriske dipolmomentet er dermed et mål for avtsanden til elektronets ladningstetthet fra kjernen. Dipolmomentet er gitt ved

$$\mathbf{D} = -e\mathbf{r}. \quad (8.93)$$

Ladningsfordelingen til et oscillerende elektrisk dipolmoment sender ut e.m. stråling med frekvens som svarer til oscillasjonsfrekvensen.

I vårt tilfelle er denne oscillasjonsfrekvensen gitt ved $\nu = E_2 - E_1/h$.

For å lage oss et bilde av dette, anta nå at Ψ_2 svarer til $n = 2$ og $l = 1$, en såkalt $2p$ tilstand. Tilstanden Ψ_1 svarer til grunntilstanden i hydrogenatomet med $n = 1$ og $l = 0$. I figur 7.5 har vi sannsynlighetstettheten (og dermed ladningstettheten) for tilstanden Ψ_1 . Tilsvarende har vi i figur 7.7 sannsynlighetstettheten (og dermed ladningstettheten) for tilstanden Ψ_2 .

Tilstanden Ψ , som er en superposisjon av tilstandene Ψ_1 og Ψ_2 , har nå en sannsynlighetstetthet som oscillerer mellom figur 7.5 og figur 7.7. Denne oscillasjonen gir opphav til utsending av e.m. stråling.

I dette kurset skal vi ikke rekne ut den totale overgangsraten for elektrisk dipolovergang. Vi skal kun vise at denne type overgang er tillatt dersom forskjellen i kvantetallene m_l , l og j er slik at

$$\Delta l = \pm 1, \quad (8.94)$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1, \quad (8.95)$$

og

$$\Delta j = 0, \pm 1. \quad (8.96)$$

Siden overgangssannsynligheten er proporsjonal med dipolmomentet, trenger vi å rekne ut forventningsverdien av \mathbf{r} .

Denne forventningsverdien er gitt ved

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, t) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \quad (8.97)$$

Setter vi inn Ψ uttrykt ved tilstandene Ψ_1 og Ψ_2 har vi

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \rangle = & \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (c_1^* c_1 \psi_1^* \mathbf{r} \psi_1 + c_2^* c_2 \psi_2^* \mathbf{r} \psi_2 + \\ & c_2^* c_1 \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar} + c_1^* c_2 \psi_1^* \mathbf{r} \psi_2 e^{i(E_1-E_2)t/\hbar}) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (8.98)$$

De første to leddene, som ikke involverer ledd som oscillerer med tiden, blir null, som vi skal vise nedenfor. Det elektriske dipolmomentet er dermed proporsjonalt med de to siste ledd.

Dersom vi dropper den tidsavhengige delen, kan vi skrive integralet ovenfor på følgende generelle vis

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_f^* \mathbf{r} \psi_i r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi, \quad (8.99)$$

hvor indeksene i refererer til en begynnelsestilstand ψ_i og f til en slutttilstand ψ_f .

Integralet er tre-dimensjonalt, men den delen som er mest interessant for oss er den som avhenger av vinkelen ϕ . Bruker vi at

$$\mathbf{r} = \mathbf{x} + \mathbf{y} + \mathbf{z} \quad (8.100)$$

med

$$x = r \sin\theta \cos\phi,$$

$$y = r \sin\theta \sin\phi,$$

og

$$z = r \cos\theta$$

har vi at den delen av integralet som avhenger av ϕ kan skilles ut i x , y og z ledd. Leddet som avhenger av x er gitt ved

$$I_x = r \sin\theta \int_0^{2\pi} \psi_f^* r \psi_i \cos\phi d\phi, \quad (8.101)$$

og bruker vi at

$$\psi_i(r, \theta, \phi) = \psi_{n_i, l_i, m_{l_i}}(r, \theta, \phi) = R_{n_i, l_i}(r) P_{l_i, m_{l_i}}(\theta) e^{im_{l_i}\phi},$$

(og tilsvarende for ψ_f) ser vi at det er kun eksponensialfunksjonen $e^{im_{l_i}\phi}$ som inngår i den ϕ -avhengige delen av forventningsverdien. Integralet I_x kan skrives som

$$I_x = r \sin\theta \int_0^{2\pi} e^{im_{l_f}\phi} e^{-im_{l_i}\phi} \cos\phi d\phi, \quad (8.102)$$

eller

$$I_x = r \sin\theta \int_0^{2\pi} e^{im_{l_f}\phi} e^{-im_{l_i}\phi} \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} d\phi. \quad (8.103)$$

Tilsvarende har vi for I_y at

$$I_y = r \sin\theta \int_0^{2\pi} e^{im_{l_f}\phi} e^{-im_{l_i}\phi} \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i} d\phi, \quad (8.104)$$

og for I_z har vi

$$I_z = r \sin\theta \int_0^{2\pi} e^{im_{l_f}\phi} e^{-im_{l_i}\phi} d\phi, \quad (8.105)$$

og siste ledd er forskjellig fra null bare dersom

$$m_{l_f} - m_{l_i} = \Delta m = 0, \quad (8.106)$$

mens I_x og I_y gir

$$m_{l_f} - m_{l_i} = \Delta m = \pm 1, \quad (8.107)$$

og vi har dermed vist den første overgangsregelen.

Når vi så skal se på forandringen i kvantetallet l , trenger litt mer informasjon.

I oppgave 2.13 studerte vi et eksempel i en dimensjon hvor forventningsverdien av x skulle reknes ut. Utifra symmetrien til bølgefunksjonen

$$\psi(-x) = (-)^l \psi(x),$$

kunne vi vise at denne forventningsverdien var null. I tre dimensjoner har vi at når vi ser på symmetrien til egenfunksjonene må vi studere oppførselen når $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$ og $z \rightarrow -z$. Siden vi har valgt å jobbe med polarkoordinater, blir forandringen $r \rightarrow r$ siden $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, $\theta \rightarrow \pi - \theta$ og $\phi \rightarrow \pi + \phi$. Det betyr at det er kun vinkeldelen i vår egenfunksjon, som er på forma $R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)$, som påvirkes av denne speilingen. Generelt har vi

$$\psi(r, \pi - \theta, \pi + \phi) = (-)^l \psi(r, \theta, \pi), \quad (8.108)$$

hvor l er banespinnet. Pariteten til egenfunksjonene bestemmes dermed av verdien på banespinnet.

Denne variabel forandringen leder til at forventningsverdien i likning (8.99) blir

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \rangle &= \int_0^\infty \int_\pi^0 \int_0^{2\pi} (-)^{l_f} \psi_f^*(-\mathbf{r}) (-)^{l_i} \psi_i r^2 \sin(\theta) dr (-d\theta) d\phi \\ &= -(-)^{l_f+l_i} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_f^*(\mathbf{r}) \psi_i r^2 \sin(\theta) dr (d\theta) d\phi. \end{aligned} \quad (8.109)$$

Dersom vi ikke skal ha inkonsistens mellom siste uttrykk og likning (8.99) må vi ha at

$$-(-)^{l_f+l_i} = (-)^{l_f+l_i+1} = 1, \quad (8.110)$$

som igjen impliserer at l_f og l_i ikke kan ha samme paritet. Dersom l_i og l_f er begge odde eller like, må forventningsverdien av \mathbf{r} være null.

Pariteten til \mathbf{r} er odde, da \mathbf{r} forandrer fortegn når $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$ og $z \rightarrow -z$. Dersom egenfunksjonene da har samme paritet, enten odde eller like, blir integranden odde og integralet blir dermed null.

Av dette følger at

$$\Delta l = \pm 1. \quad (8.111)$$

Det er en dypere sammenheng også bak denne overgangsregelen. Fotonet har totalt spinn lik 1, og for at banespinn skal være bevart, må vi ha at l_f og l_i har en forskjell på 1. Men, fotonet kan selvsagt ha totalt spinn større enn 1 også, da vi kan legge til banespinn til egenspinnet. Men da er det totale spinn til fotonet større enn 1, og vi har ikke lenger en elektrisk dipolovergang. Vi snakker da heller om f.eks. elektrisk kvadrupoloverganger osv. La oss avslutte med å gå tilbake til likning (8.98).

Leddene som inneholder den samme egenfunksjonen

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (c_1^* c_1 \psi_1^* \mathbf{r} \psi_1 + c_2^* c_2 \psi_2^* \mathbf{r} \psi_2) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi, \quad (8.112)$$

blir null da egenfunksjonene har samme paritet. De eneste leddene som kan gi noe er dermed kryssleddene hvor slutt og begynnelsestilstandene er forskjellige

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(c_2^* c_1 \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} + c_1^* c_2 \psi_1^* \mathbf{r} \psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \right) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi, \quad (8.113)$$

dog kan ikke tilstandene ψ_1 og ψ_2 ha samme paritet.

Hva betyr det? Dersom ψ_1 representerer $n = 2$ og $l = 0$ og ψ_2 representerer $n = 1$ og $l = 0$ er denne overgangen forbudt da vi har samme paritet. Derimot kan vi ha en overgang dersom ψ_1 representerer $n = 2$ og $l = 1$ og ψ_2 representerer $n = 1$ og $l = 0$.

Som tilleggsregel (som vi ikke skal bevise her) har vi også

$$\Delta j = 0, \pm 1,$$

men vi kan ikke ha en overgang fra $j = 0$ til $j = 0$.

8.4 Oppgaver

8.4.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 8.1

I denne oppgaven ser vi bort fra elektronets egenspinn. H-atomet kan da beskrives ved tilstandsfunksjonene $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ som har følgende egenskaper:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_0 \psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= E_n \psi_{nlm_l}(\vec{r}), \\ \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= l(l+1) \hbar^2 \psi_{nlm_l}(\vec{r}), \\ \hat{\mathbf{L}}_z \psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= m_l \hbar \psi_{nlm_l}(\vec{r}), \\ \int \psi_{nlm_l}^*(\vec{r}) \psi_{nlm_l}(\vec{r}) d\vec{r} &= \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m_l,m_{l'}}, \\ \delta_{k,k'} &= \begin{cases} 1 & \text{for } k = k' \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases} \end{aligned}$$

a) Hva kaller vi ligninger av denne typen?

Operatoren $\hat{\mathbf{H}}_0$ er tidsuavhengig. Kvantetallet n kan anta verdiene $1, 2, \dots$. For en gitt verdi av n kan l anta verdiene $0, 1, \dots, n-1$, og m_l kan for en gitt verdi av l anta verdiene $-l, -l+1, \dots, l$.

I denne oppgaven trengs ingen andre opplysninger enn de som er gitt ovenfor. Det er ikke nødvendig å kjenne de eksplisitte uttrykkene for operatorene $\hat{\mathbf{H}}_0$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{\mathbf{L}}_z$. Det skal ikke tas hensyn til elektronets egenspinn.

b) Hvilke fysiske størrelser er representert ved operatorene $\hat{\mathbf{H}}_0$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{\mathbf{L}}_z$?

c) Hvilke fysiske størrelser har skarpe verdier i tilstanden $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$?

Ved tiden $t = 0$ er H-atomets tilstand beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$. Tids- utviklingen av tilstandsfunksjonen er bestemt av den tidsavhengige Schrödingerligningen

$$\hat{H}_0 \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t).$$

d) Bestem tilstandsfunksjonen som beskriver H-atomets tilstand ved tiden t .

La H-atomets tilstand ved tiden $t = 0$ nå være gitt ved tilstandsfunksjonen

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^l \psi_{nlm_l}(\vec{r}). \quad (8.114)$$

e) Vis at $\Phi(\vec{r})$ er normert.

f) Vis at tilstandsfunksjonen ved tiden t er

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right). \quad (8.115)$$

g) Bestem middelveien for operatorene \hat{H}_0 , \hat{L}^2 og \hat{L}_z i tilstanden som er beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ i lign. (8.115).

En størrelse A er representert ved operatoren \hat{A} . Flukturasjoner ΔA i tilstanden Ψ er definert slik:

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

h) Finn flukturasjonen av størrelsene representert ved operatorene \hat{H}_0 , \hat{L}^2 og \hat{L}_z i tilstanden som er beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ i lign. (8.115).

La H-atomets tilstand ved tiden $t = 0$ være gitt ved tilstandsfunksjonen $\Phi(\vec{r})$ i lign. (8.114) og la oss tenke oss at vi foretar en ideell måling av L_z .

i) Hvor stor er sannsynligheten for å observere den bestemte verdien $m_l \hbar$ for L_z ved tiden $t = 0$?

j) Vil denne sannsynligheten være avhengig av ved hvilken tid $t > 0$ målingen utføres?

Vi lar nå H-atomet befinne seg i et homogent magnetfelt B og velger z-aksen langs magnetfeltet. Hamilton operatoren for systemet er da

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m} B \hat{L}_z,$$

der $-e$ er elektronets ladning og m er elektronets masse.

k) Bestem H-atomets energi i tilstanden $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$.

l) Er tilstanden $\Phi(\vec{r})$ i lign. (1.1) en energi egentilstand for \hat{H} ? Begrunn svaret.

l) Bestem middelveien av \hat{H} i tilstanden $\Phi(\vec{r})$.

Oppgave 8.2

Ved overgangen fra en p-tilstand til en s-tilstand i et atom oppstår en spektrallinje med bølglengde $\lambda = 6438,0 \text{ \AA}$. Atomet plasseres nå i et magnetfelt med styrke $B = 1,0 \text{ T}$. Vi skal i denne oppgaven ikke ta hensyn til koblingen mellom elektronets spinn og dets banespinn.

- Hvordan splittes s- og p-nivåene og hva blir deres energiforskyvning?
- Hvor mange nye spektrallinjer som tilfredsstiller kriteriene for elektrisk dipolstråling oppstår fra den gitte overgangen?
- Hva blir bølglengdene til disse nye spektrallinjene?

Løsning

- a) Atomer i et ytre magnetfelt \vec{B} langs z-aksen gir Zeeman splitting

$$\hat{H} = \hat{H}(B=0) + \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot \vec{L} \quad (8.116)$$

$$= \hat{H}(B=0) + \mu_B B \frac{1}{\hbar} L_z \quad (8.117)$$

hvor μ_B er Bohr-magneton. Dette gir ingen effekt på s-nivåene ($L = 0$). For p-nivåene får vi

$$E = E_0 + \mu_B B \quad M = +1 \quad (8.118)$$

$$= E_0 \quad M = 0 \quad (8.119)$$

$$= E_0 - \mu_B B \quad M = -1 \quad (8.120)$$

- b) Overgangen $p \rightarrow s$ blir splittet i tre komponenter. Utvalgsregler for dipolstråling er $\Delta L = \pm 1$ og $\Delta M = 0, \pm 1$. Dette gir

$$p(M=+1) \rightarrow s(M=0) \quad \Delta M = +1 \quad (8.121)$$

$$p(M=0) \rightarrow s(M=0) \quad \Delta M = 0 \quad (8.122)$$

$$p(M=-1) \rightarrow s(M=0) \quad \Delta M = -1 \quad (8.123)$$

- c) I beregningen bruker vi konstantene

$$h = 4,135669 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}, \quad hc = 1239,84 \text{ eV nm} \quad (8.124)$$

$$\mu_B = 5,788383 \cdot 10^{-5} \text{ eV T} \quad (8.125)$$

$$\Delta E_0 = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 1,925819 \text{ eV} \quad (8.126)$$

Dette gir

$$E = E_0 \pm \mu_B \cdot 0,1 \text{ T} = (1,925819 \pm 5,8 \cdot 10^{-5}) \text{ eV} \quad (8.127)$$

$$\lambda_{M=+1} = 643,78 \text{ nm} \quad (8.128)$$

$$\lambda_{M=0} = 643,80 \text{ nm} \quad (8.129)$$

$$\lambda_{M=-1} = 643,82 \text{ nm} \quad (8.130)$$

Oppgave 8.3

Spinn–bane koblingen er en relativistisk effekt som skyldes at elektronet har et egenspinn i tillegg til banespinn i bevegelsen omkring atomkjernen.

- Forklar hvorfor koblingen splitter spektrallinjen for overgangen $2p \rightarrow 1s$ i H-atomet i to linjer. Det er påvist eksperimentelt at disse har en separasjon $\Delta\lambda = 5,3 \cdot 10^{-4}$ nm.
- Spinn–bane koblingen kan beskrives ved operatoren $\hat{\mathbf{H}}_{LS} = A\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$. Finn verdien på konstanten A for overgangen i a).

Løsning

- Atomer med spinn–bane kobling

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_0 + A\vec{L} \cdot \vec{S} \quad (8.131)$$

$$= \hat{\mathbf{H}}_0 + \frac{1}{2}A \left(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2 \right) \quad (8.132)$$

Når systemet er i tilstanden ψ_{nljm_j} i.e. en egentilstand for operatorene $\hat{\mathbf{J}}^2$, $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$ og \hat{J}_z får vi

$$\hat{\mathbf{H}}\psi_{nljm_j} = \left(E_0 + \frac{\hbar^2}{2}A (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \right) \psi_{nljm_j}$$

For en s-tilstand har vi: $l = 0$ $s = j = 1/2$ og $E = E_0(s)$.

For en p-tilstand har vi: $l = 1$ $s = 1/2$ som gir $j = 1/2, 3/2$ og energiene blir

$$E_{3/2} = E_0(p) + \frac{\hbar^2}{2}A \left(\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right) = E_0(p) + \frac{\hbar^2}{2}A \quad (8.133)$$

$$E_{1/2} = E_0(p) + \frac{\hbar^2}{2}A \left(\frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right) = E_0(p) - \hbar^2 A \quad (8.134)$$

Overgangene

$$p_{3/2} \rightarrow s_{1/2} \quad \Delta E_{3/2} = \Delta E + \frac{\hbar^2}{2}A \quad (8.135)$$

$$p_{1/2} \rightarrow s_{1/2} \quad \Delta E_{1/2} = \Delta E - \hbar^2 A \quad (8.136)$$

hvor $\Delta E = E_0(p) - E_0(s)$.

- Forskjell i bølgelengde

$$\Delta\lambda = \frac{hc}{\Delta E_{1/2}} - \frac{hc}{\Delta E_{3/2}} = hc \left(\frac{1}{\Delta E - \hbar^2 A} - \frac{1}{\Delta E + \frac{1}{2}\hbar^2 A} \right)$$

som gir

$$\frac{\Delta\lambda}{hc} = \frac{\frac{3}{2}\hbar^2 A}{(\Delta E - \hbar^2 A)(\Delta E + \frac{1}{2}\hbar^2 A)} \approx \frac{3\hbar^2 A}{2(\Delta E)^2}$$

siden $\Delta E = E(p) - E(s) = 10,2$ eV og $\hbar^2 A \ll \Delta E_0$. Resultatet blir da

$$\hbar^2 A = \frac{2}{3} \frac{\Delta\lambda}{hc} (\Delta E)^2 \approx 3,0 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

Oppgave 8.4, Eksamen V-1998

I denne oppgaven skal vi til å begynne med se bort i fra elektronets egenspin. Energi-egenverdiligningen for et elektron i hydrog  atomet er da gitt ved

$$\hat{H}_0 \psi_{nlm_l} = -\frac{E_0}{n^2} \psi_{nlm_l}$$

der E_0 er en konstant.

- a) Sett opp Hamilton-operatoren \hat{H}_0 og skriv ned hvilke betingelser kvantetallene n , l og m_l m   oppfylle. Hvilken fysisk betydning har kvantetallene l og m_l ? Hva er degenerasjonsgraden for en gitt n ?

Den laveste energi-egentilstanden er gitt ved

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = A \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

der A er en normeringskonstant og $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$. Til hjelp i det f  lgende oppgir vi at i sf  riske koordinater er

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2.$$

Videre kan du f   bruk for integralet $\int_0^\infty \rho^k \exp(-\rho) d\rho = k!$ der k er et heltall.

- b) Vis ved innsetting i egenverdiligningen at ψ_{100} er en egentilstand for \hat{H}_0 og bestem konstanten E_0 uttrykt ved naturkonstanter. (Til kontroll oppgis at $E_0 = 13.6$ eV.)
- c) Vis at normeringskonstanten A har verdien $A = 1/\sqrt{\pi} a_0^{3/2}$. Beregn middelverdien $\langle r_{100} \rangle$ for radien i denne tilstanden og den radius som elektronet med st  rst sannsynlighet befinner seg i.
- d) Beregn b  lgelengden for fotonet som sendes ut n  r hydrog  atomet g  r fra en $2p$ -tilstand til $1s$ -tilstanden (grunntilstanden).

Vi skal n   ta hensyn til elektronets egenspin. P   grunn av spinn-banekoblingen f  r Hamilton-operatoren da et tilleggsledd

$$\hat{H}_{LS} = C \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

der $\hat{\mathbf{S}}$ er operatoren for elektronets egenspin og C er en konstant.

- e) Beregn de nye energiene for $2p$ - og $1s$ -tilstandene uttrykt ved C . Vis at spektrallinjen for overgangen fra $2p$ til $1s$ blir splittet i to linjer. Det er p  vist eksperimentelt at disse har en separasjon $\Delta\lambda = 5.3 \cdot 10^{-4}$ nm. Bruk dette til    finne verdien p   konstanten C for denne overgangen.

Kort fasit

- a) $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$, der r er elektronets avstand fra kjernen. Kvantetallene m   oppfylle $n = 1, 2, \dots$, $l = 0, 1, \dots, n-1$ og $m_l = -l, -l+1, \dots, l$. Fysisk betydning: Kvantetalle l bestemmer lengden av banespinnet og m_l projeksjonen p   kvantiserings-aksen. Degenerasjonsgrad for gitt n :

$$\text{deg}(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$

b) Ved innsetting i egenverdligningen fås

$$\hat{H}_0\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \left(\frac{\hbar^2}{ma_0} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{A}{r} e^{-r/a_0} - \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} A e^{-r/a_0},$$

$$\text{som gir } a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \text{ og } E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = 13.6 \text{ eV}.$$

c) Normalisering:

$$1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr A^2 e^{-2r/a_0}$$

$$\text{gir } A = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}}.$$

$$\langle r_{100} \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr \psi_{100}^*(r, \theta, \phi) r \psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{3}{2} a_0.$$

Radiell sannsynlighetsfordeling: $P(r) = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0}$, $\frac{dP}{dr} = 0$ gir

$r(1 - \frac{r}{a_0}) = 0$, dvs. $r = 0$ eller $r = a_0$, der $r = a_0$ gir størst sannsynlighet.

$$\text{d) } \frac{hc}{\lambda} = E_2 - E_1 \text{ gir } \lambda = \frac{4hc}{3E_0} = 121.6 \text{ nm}.$$

e) Har at

$$\langle \hat{H}_{LS} \rangle = \frac{C\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)].$$

For $1s$ er $l = 0$, $j = s = \frac{1}{2}$ som gir $\langle \hat{H}_{LS} \rangle = 0$, slik at $E_{1s} = -E_0$. For $2p$ er $l = 1$, $s = \frac{1}{2}$ som gir $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ og $E_{1/2} = -\frac{E_0}{4} - C\hbar^2$, $E_{3/2} = -\frac{E_0}{4} + \frac{C\hbar^2}{2}$. Vi får da to linjer med bølgelengde hhv. $\lambda_{1/2} = \frac{hc}{E_{1/2} - E_{1s}}$ og $\lambda_{3/2} = \frac{hc}{E_{3/2} - E_{1s}}$. Ved å løse $\lambda_{1/2} - \lambda_{3/2} = \Delta\lambda = 5.3 \cdot 10^{-4} \text{ nm}$ med hensyn på C fås $C = 6.9 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-1} \text{ s}^{-2}$.

Del III

ANVENDELSER

Kapittel 9

DET PERIODISKE SYSTEMET

9.1 Introduksjon

Med utgangspunktet i resultatene fra hydrogenatomet, skal vi prøve å forstå det periodiske systemet utifra kvantemekanikk.

Et av kjennetegnene er at vi har grunnstoffer med liknende kjemiske egenskaper men høyst ulik verdi på kjerneladningen Z . Eksempler er atomene i edelgasserien, helium ($Z = 2$), neon ($Z = 10$), argon ($Z = 18$), krypton ($Z = 38$) osv., eller alkalimetallene, med atomer som f.eks. litium ($Z = 3$), natrium ($Z = 11$), kalium ($Z = 19$) osv. Felles for edelgassene er at ionisasjonsenergien, dvs. energien som trengs for å løsrive et elektron er stor i forhold til f.eks. alkalimetallene. Figur 9.1 viser ionisasjonsenergien som funksjon av kjerneladningen Z opp til $Z = 50$. Det er bla. denne trenden kvantemekanikken med Schrödingers likning var i stand til å forklare. For å forstå det periodiske systemet og dets oppbygging skal vi først gå til det nest enkleste atomet, helium med to elektroner i stedet for ett. I de etterfølgende avsnitt skal vi diskutere egenskapene til andre elementer.

9.2 Heliumatomet, en første tilnærming

Heliumatomet består av to elektroner pluss en kjerne. Kjerneladningen er $Z = 2$. Når vi skal sette opp den potensielle energien til systemet vårt basert på Coulombpotensialet, må vi også ta hensyn til frastøtingen mellom elektronene.

Vi kaller avstanden mellom elektron 1 og kjernen (som vi nå betrakter som et uendelig tungt massesenter) for r_1 , og avstanden mellom elektron 2 og kjernen for r_2 . Figur 9.2 illustrerer dette¹.

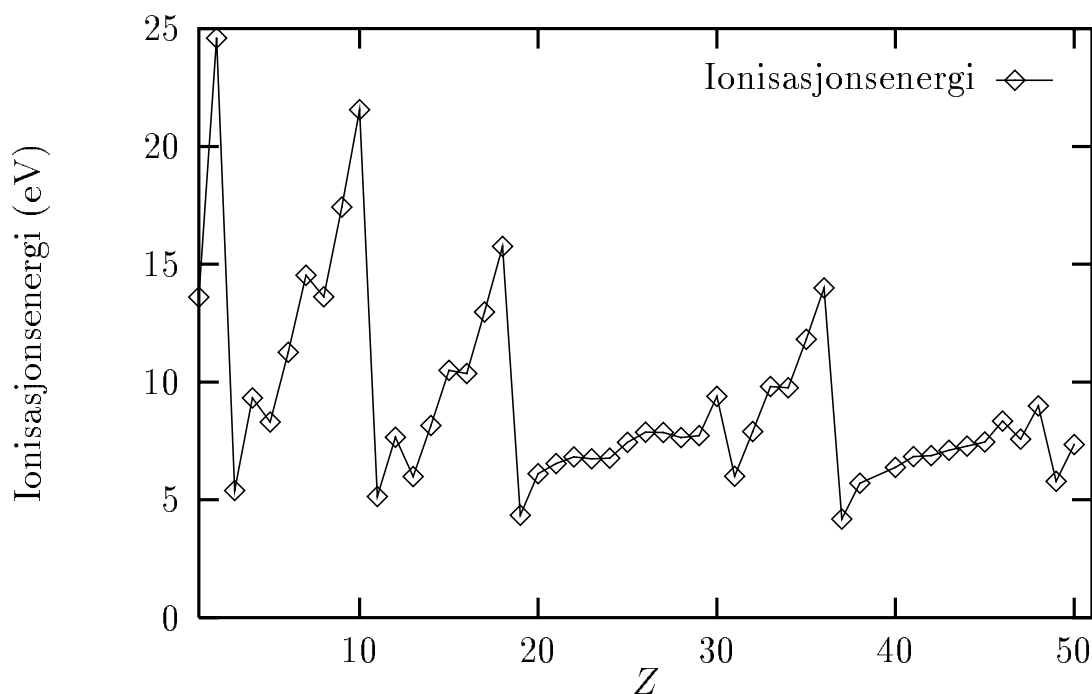
Bidraget til den potensielle energien pga. tiltrekningen fra kjernen på de to elektronene blir dermed

$$-\frac{2ke^2}{r_1} - \frac{2ke^2}{r_2}, \quad (9.1)$$

og legger vi til frastøtingen mellom de to elektronene som er i en avstand $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ har vi at den potensielle energien $V(r_1, r_2)$ er gitt ved

$$V(r_1, r_2) = -\frac{2ke^2}{r_1} - \frac{2ke^2}{r_2} + \frac{ke^2}{r_{12}}, \quad (9.2)$$

¹Vi ser bort ifra bla. den kinetiske energien til partiklene i kjernen, da eksempelvis protonene er mye tyngre enn elektronene. Dette kalles for Born-Oppenheimer approksimasjonen.



Figur 9.1: Ionisasjonsenergi i eV som funksjon av ladningstallet Z til kjernen.

slik at den totale hamiltonfunksjonen for elektronene i heliumatomet kan skrives

$$\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m} - \frac{2ke^2}{r_1} - \frac{2ke^2}{r_2} + \frac{ke^2}{r_{12}}, \quad (9.3)$$

og Schrödingers likning blir dermed

$$\hat{\mathbf{H}}\psi = E\psi. \quad (9.4)$$

Vi ser av uttrykket for den potensielle energien at vi ikke lenger har et enkelt sentralsymmetrisk potensial. For flere partikler blir det enda mer komplisert.

Dersom vi neglisjerer frastøtingen mellom elektroner, kan vi betrakte systemet som bestående av ikke vekselvirkende elektroner, dvs. elektronene føler kun tiltrekningen fra kjernen og vi kan addere deres bidrag til energien.

For heliumatomet betyr det at den potensielle energien blir

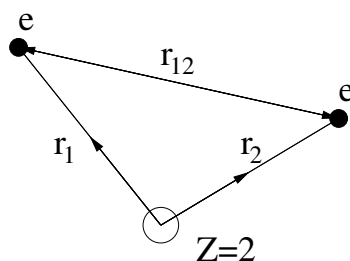
$$V(r_1, r_2) \approx -\frac{Zke^2}{r_1} - \frac{Zke^2}{r_2}. \quad (9.5)$$

Fordelen med denne tilnærmingen er at hvert elektron kan betraktes som uavhengig av det andre, den såkalte uavhengig-elektron model hvor hvert elektron kun ser et sentralsymmetrisk potensial, eller sentralt felt.

La oss se om det kan gi oss noe meningsfylt. Først setter vi $Z = 2$ og neglisjerer fullstendig frastøtingen mellom elektronene.

Vi kan nå bruke resultatene fra hydrogenatomet. Elektron 1 har dermed en hamiltonoperator

$$\hat{\mathbf{h}}_1 = -\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \frac{2ke^2}{r_1}, \quad (9.6)$$



Figur 9.2: Koordinatene brukt i beskrivelsen av heliumatomet.

med tilhørende egenfunksjon og egenverdilikning

$$\hat{\mathbf{h}}_1 \psi_a = E_a \psi_a, \quad (9.7)$$

hvor $a = \{n_a l_a m_{l_a}\}$, kvantetallene fra hydrogenatomet. Energien E_a er dermed

$$E_a = \frac{Z^2 E_0}{n_a^2}, \quad (9.8)$$

med $E_0 = -13.6$ eV, grunntilstanden i hydrogenatomet. Helt tilsvarende har vi for elektron 2

$$\hat{\mathbf{h}}_2 = -\frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m} - \frac{2ke^2}{r_2}, \quad (9.9)$$

med tilhørende egenfunksjon og egenverdilikning

$$\hat{\mathbf{h}}_2 \psi_b = E_b \psi_b, \quad (9.10)$$

hvor $b = \{n_b l_b m_{l_b}\}$, og

$$E_b = \frac{Z^2 E_0}{n_b^2}. \quad (9.11)$$

Siden elektronene ikke vekselvirker kan vi anta at grunntilstanden til heliumatomet er gitt ved produktet

$$\psi = \psi_a \psi_b, \quad (9.12)$$

slik at approksimasjonen til $\hat{\mathbf{H}}$ gir følgende Schrödingers likning

$$\left(\hat{\mathbf{h}}_1 + \hat{\mathbf{h}}_2\right) \psi = \left(\hat{\mathbf{h}}_1 + \hat{\mathbf{h}}_2\right) \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) = E_{ab} \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2). \quad (9.13)$$

Energien blir dermed

$$\left(\hat{\mathbf{h}}_1 \psi_a(\mathbf{r}_1)\right) \psi_b(\mathbf{r}_2) + \left(\hat{\mathbf{h}}_2 \psi_b(\mathbf{r}_2)\right) \psi_a(\mathbf{r}_1) = (E_a + E_b) \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2), \quad (9.14)$$

dvs.

$$E_{ab} = Z^2 E_0 \left(\frac{1}{n_a^2} + \frac{1}{n_b^2} \right). \quad (9.15)$$

Setter vi inn $Z = 2$ og antar at grunntilstanden er gitt ved elektronene i laveste en-elektron tilstand med $n_a = n_b = 1$ blir energien

$$E_{ab} = 8E_0 = -108.8 \text{ eV}, \quad (9.16)$$

mens den eksperimentelle verdien er -78.8 eV . **Vi ser klart at å kutte det frastøtende leddet pga. vekselvirkningen mellom elektronene gjør at vi får for mye binding.**

Ionisasjonsenergien er gitt ved den energien som kreves for å løsrive et elektron. Energien for å løsrive det ene elektronet er i den uavhengige-elektron modellen gitt ved halve bindingsenergien, dvs. 54.4 eV , mens den eksperimentelle verdien er 24.59 eV .

Selv om vi har neglisjert frastøtingen mellom elektronene, kommer fremdeles mesteparten av bidraget til energien fra tiltrekningen mellom kjernen og elektronene. La oss derfor gjøre følgende tankeeksperiment. Anta at vi skal bygge det periodiske systemet vha. den uavhengige elektronmodellen. Vi antar også at alle elektronene kan plasseres i laveste en-elektron orbital gitt ved $n = 1$. For et system med N elektroner og Z protoner blir dermed bindingsenergien når vi plasserer alle elektronene i laveste tilstand

$$E_N = NZ^2 E_0. \quad (9.17)$$

Selv om den effektive ladningen skulle være liten, vil fremdeles bindingsenergien øke som funksjon av elektrontallet og ladningen. Ionisasjonsenergien vil være gitt ved

$$Z^2 E_0, \quad (9.18)$$

som er i strid med de eksperimentelle dataene vist i figur 9.1.

Hvordan komme ut av dette uføret? Svaret er Paulis prinsipp som vi diskuterer i neste avsnitt.

9.3 Identiske partikler og Paulis eksklusjonsprinsipp

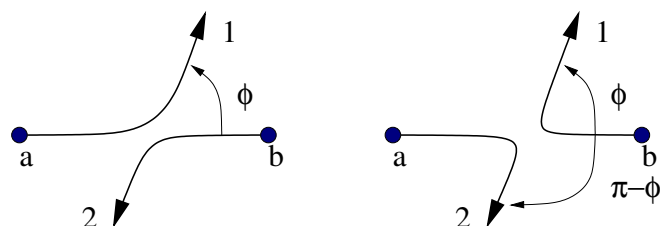
Paulis eksklusjonsprinsipp (1925) er det siste postulatet om naturen som vi skal befatte oss med. Som de tre foregående, Einsteins og Plancks kvantiserings postulat, de Broglies påstand om materiens bølge og partikkel egenskaper og Heisenbergs uskarphetsrelasjon, så er dette påstander om naturen som springer utifra mange forsøk på å tolke og forstå eksperimentelle data. Pauli lanserte eksklusjonsprinsippet i et forsøk på å forstå spektrene til ulike atomer, deres kjemiske egenskaper og ionisasjonsenergier. Eksklusjonsprinsippet sier at den totale bølgefunksjonen for et system av elektroner skal være antisymmetrisk. Mer generelt, så er den totale bølgefunksjonen for et system av **fermioner**, som er partikler med halvtallig spinn, antisymmetrisk. Dette har som følge at fermionene ikke kan ha samme sett kvantetall i ett fler-fermion system. Vi har sett i forrige kapittel at elektronet har et egetspinn, med verdi $s = 1/2$ og to mulige spinnprojeksjoner langs en valgt akse z , $m_s = \pm 1/2$. Bølgefunksjonen for et system av partikler med heltallig spinn, såkalte **Bosoner**, er symmetrisk. Tabell 9.1 lister opp eksempler på partikler med heltallig og halvtallig spinn. Merk at et helium-atom er satt sammen av elektroner. Men dersom vi betrakter et system satt sammen av slike atomer, kan hver partikkel oppfattes som et boson.

Hva er det som ligger til grunn for denne inndelingen utifra partiklenes egetspinn? Elektronene er identiske partikler. Klassisk kan vi dog tenke oss at vi kan skille mellom elektronene. Figur 9.3 viser et støt mellom f.eks. to elektroner. Dersom vi betrakter elektronene som klassiske partikler, kunne vi kanskje tenkt oss et eksperiment hvor vi er i stand til å følge banene til begge elektronene, både før og etter kollisjonen. Dette eksperimentet kan tenkes gjennomført ved en serie av fotobokser som sender ut fotoner som vekselvirker med hvert sitt elektron. I hvert tidsintervall bestemmer vi da nøyaktig de to elektronenes posisjon. Tilsynelatende bør vi derfor være i stand til å skille mellom de to kollisjonene i Figur 9.3.

Tabell 9.1: Bølgefunksjonens symmetri for ulike partikler.

Partikkel	Symmetri	Generisk navn	spinn
e^-	A	Fermion	$\frac{1}{2}$
proton	A	Fermion	$\frac{1}{2}$
nøytron	A	Fermion	$\frac{1}{2}$
μ^-	A	Fermion	$\frac{1}{2}$
kvarker	A	Fermion	$\frac{1}{2}$
α -partikkel	S	Boson	0
He-atom	S	Boson	0
π -meson	S	Boson	0
γ -foton	S	Boson	1
ρ -meson	S	Boson	1

Problemet vårt er vi har glemt Heisenbergs uskarphetsrelasjon. Vi kan ikke bestemme nøyaktig hvor elektron 1 og 2 er til enhver tid. I praksis vil det si at et måleapparat som skal følge elektron 1 sin bevegelse ikke vil være i stand til å skille mellom det to prosessene vist i Figur 9.3. Dette leder oss til begrepet



Figur 9.3: Kollisjon mellom to identiske partikler. Hendingene til venstre og høyre kan ikke skilles når vi har med identiske kvantemekaniske partikler å gjøre.

om identiske og uskilbare partikler. Dersom vi hadde sett på et støt mellom protoner og elektroner vil vi klart, pga. forskjellig masse og ladning, kunne skille hvilke partikler som kommer ut hvor. Vi kan videreføre problemet med identiske og uskilbare partikler til f.eks. to elektroner i heliumatomet. Dersom hvert elektron er i hver sin 1s hydrogenorbital, er det en sterk grad av overlapp mellom bølgefunksjonene. Partiklene er identiske, og vi kan skille mellom elektron 1 og 2.

Konsekvensen er en fundamental forskjell mellom identiske partikler i kvantefysikk og klassisk fysikk, uttrykt ved begrepet om uskilbarhet. Når vi derfor setter opp Schrödingers likning for et system av partikler, må formalismen vår gjenspeile at identiske partikler er uskilbare.

La oss vise det ved et konkret eksempel. I forrige avsnitt satte vi opp Schrödingers likning for to elektroner

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m} - \frac{2ke^2}{r_1} - \frac{2ke^2}{r_2} + \frac{ke^2}{r_{12}} \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (9.19)$$

Her har vi valgt å sette en merkelapp på hvert elektron via posisjonene $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Det er måten vi i praksis vil formulere matematisk problemet vårt. Det er ikke noe i veien for at vi kan bytte om til $\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$. Men, en observabel størrelse slik som systemets total energi skal ikke avhenge av om hvilken merkelapp vi har valgt for henholdsvis elektron 1 og 2.

Problemet vårt er dermed følgende: hvordan skal vi bake inn begrepet om uskilbarhet i bølgefunksjonen, som inneholder den fysiske informasjonen om systemet, og samtidig beholde merkelappene $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ osv.? La oss igjen glemme vekselvirkningen mellom elektronene i den totale Hamiltonfunksjonen for heliumatomet. Schrödingers likning blir dermed

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m} - \frac{2ke^2}{r_1} - \frac{2ke^2}{r_2} \right) \Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (9.20)$$

hvor $\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ er den totale egenfunksjonen. Vi prøver ansatzen

$$\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\alpha(\mathbf{r}_1) \psi_\beta(\mathbf{r}_2), \quad (9.21)$$

hvor ψ er enpartikkel egenfunksjoner hentet fra f.eks. hydrogenatomet. Indeksene α og β kan representere kvantetall som banespinn, egenspinns m.m. Vi forenkler ytterligere og setter

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}_1) = \psi_\alpha(1), \quad (9.22)$$

og

$$\psi_\beta(\mathbf{r}_2) = \psi_\beta(2), \quad (9.23)$$

som betyr at det finnes f.eks. et elektron med kvantetall α i posisjon \mathbf{r}_1 . Vi har dermed

$$\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\alpha(1) \psi_\beta(2), \quad (9.24)$$

men det er ikke noe hinder for at vi har

$$\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\beta(1) \psi_\alpha(2), \quad (9.25)$$

da Ψ_T ikke skal avhenge av vårt valg av merking.

Hvilke konsekvenser får dette for en størrelse som sannsynlighetsfordelingen? Sannsynligheten for å finne dette to-elektron systemet i en bestemt kvantemekanisk tilstand skal være uavhengig av vårt valg av merkelapper.

Sannsynlighetsfordelingen blir

$$\Psi_T^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\alpha^*(1) \psi_\beta^*(2) \psi_\alpha(1) \psi_\beta(2), \quad (9.26)$$

og bytter vi om $1 \rightarrow 2$ og $2 \rightarrow 1$ fås

$$\Psi_T^*(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \Psi_T(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi_\alpha^*(2) \psi_\beta^*(1) \psi_\alpha(2) \psi_\beta(1). \quad (9.27)$$

Men disse sannsynlighetene er ikke like da f.eks.

$$\psi_\alpha(2) \neq \psi_\alpha(1). \quad (9.28)$$

Men dersom vi erstatter

$$\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\alpha(1) \psi_\beta(2),$$

med

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)], \quad (9.29)$$

oppnår vi ved ombyttet $1 \rightarrow 2$ og $2 \rightarrow 1$ at

$$\Psi_S(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) + \psi_\beta(2)\psi_\alpha(1)] = \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (9.30)$$

Indeksen S står for symmetrisk, dvs. at bølgefunksjonen vi har skrevet er symmetrisk i ombyttet av posisjonene til elektronene. Vi har også antatt at de respektive enpartikkel bølgefunksjonene er normerte. Faktoren $1/\sqrt{2}$ er dermed en normeringskonstant for to-elektron funksjonen. Det er lett å overbevise seg selv om at sannsynligheten gitt ved den symmetriske bølgefunksjonen er identisk ved ombytte av partikkel 1 og 2.

Men vi kan også skrive den totale egenfunksjonen på et antisymmetrisk vis

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)], \quad (9.31)$$

hvor indeksen A står for antisymmetrisk. Ved ombyttet $1 \rightarrow 2$ og $2 \rightarrow 1$ ser vi at

$$\Psi_A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) - \psi_\beta(2)\psi_\alpha(1)] = -\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (9.32)$$

Ved ombyttet skifter funksjonen fortegn. Men sannsynlighetstettheten forblir den samme da

$$\Psi_A^*(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \Psi_A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = (-1)^2 \Psi_A^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (9.33)$$

Det er en viktig forskjell mellom en symmetrisk og en antisymmetrisk funksjon. Dersom $\alpha = \beta$ og partiklene befinner seg i samme posisjon finner vi at

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_\alpha(1)\psi_\alpha(1), \quad (9.34)$$

og at

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 0! \quad (9.35)$$

For en antisymmetrisk funksjon kan ikke to partikler ha samme sett kvantetall og være ved samme posisjon. Sannsynligheten for dette er lik null. Det er bla. denne egenskapen Pauli brukte ved den antisymmetriske egenfunksjonene for å kunne tolke oppbyggingen av det periodiske systemet.

For et system av elektroner betyr dette at vi ikke kan plassere mer enn to elektroner i den laveste hydrogenorbitalen $1s$. Dette kommer vi tilbake til i de neste avsnittene. Da Pauli postulerte eksklusjonsprinsippet var dette svaret på et fundamentalt problem som flere, deriblant Bohr hadde søkt etter en generell forklaring for. At ikke mer enn to elektroner kan være i den innerste $1s$ orbitalen pga. eksklusjonsprinsippet, har store konsekvenser for oppbyggingen av atomene, molekyler og de fleste materialer vi kjenner i dag. Dersom alle elektronene kunne plasseres i den innerste orbitalen, ville alle atomer ha oppført seg som edelgasser. Atomene ville da vært tilnærmet inerte og ville f.eks. ikke kunne danne molekyler, og uten molekyler ikke noe liv!

Den antisymmetriske funksjonen kan også skrives som en 2×2 determinant

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) \end{vmatrix}. \quad (9.36)$$

For tre partikler har vi

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) & \psi_\alpha(3) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) & \psi_\beta(3) \\ \psi_\gamma(1) & \psi_\gamma(2) & \psi_\gamma(3) \end{vmatrix}. \quad (9.37)$$

En slik determinant kalles for en Slater determinant. Skriver vi ut denne 3×3 determinanten får vi 6 ledd

$$\begin{aligned} \Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} [& \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3) + \psi_\beta(1)\psi_\gamma(2)\psi_\alpha(3) + \psi_\gamma(1)\psi_\alpha(2)\psi_\beta(3) - \\ & \psi_\gamma(1)\psi_\beta(2)\psi_\alpha(3) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)\psi_\gamma(3) - \psi_\alpha(1)\psi_\gamma(2)\psi_\beta(3)]. \end{aligned} \quad (9.38)$$

Hver av de lineære kombinasjonene er en løsning av Schrödingers likning for den samme totalenergien. Vi ser også at funksjonen er antisymmetrisk ved ombytte av to partikler og at den blir null dersom to partikler er ved samme posisjon og har samme sett kvantetall. En fler-elektron eller fler-fermion determinant basert på en basis av en-partikkel egenfunksjoner burde dermed være enkel å sette opp.

9.4 Heliumatomet

Vi skal i det følgende gi en kort oversikt over hvordan vi bestemmer elektron konfigurasjonen og de karakteristiske egenskaper for grunntilstanden (tilstanden med størst bindingsenergi) i et atom innenfor det som heter **sentralfelt modellen**.

Et atom karakteriseres ved et atomnummer Z . Det angir samtidig antall elektroner i systemet. I sentralfelt modellen antar vi at den elektriske tiltrekningen mellom elektronene og den indre atomkjernen samt frastøtningen elektronene imellom gir opphav til et modifisert Coulombfelt. I dette feltet beveger elektronene seg tilnærmet uavhengig av hverandre på tilsvarende måte som det ene elektronet i hydrogēn atomet. Hvert enkelt elektron er karakterisert ved et sett kvantetall n, l, m_l, m_s med samme fysiske betydningen som i hydrogēn atomet.

O	4p	_____	6	54
	3d	_____	10	
	5s	_____	2	
N	4p	_____	6	36
	3d	_____	10	
	4s	_____	2	
M	3p	_____	6	18
	3s	_____	2	
L	2p	_____	6	10
	2s	_____	2	
K	1s	_____	2	2
Skall Nivå			$N_{e^-} = \sum e^-$	

De mulige elektrontilstandene i et atom ut fra sentralfelt modellen er vist i figuren ovenfor. Der vises spektroskopisk notasjon, maksimalt antall elektroner (N_{e^-}) i et skall og totalt antall elektroner opp til og med et gitt skall, ($\sum e^-$). Vi har i figuren en vertikal skala som angir energiforskjellen mellom tilstandene karakterisert med kvantetallene (nl), og med $(nl) = 1s$ som den laveste - den sterkest bundne tilstand. Rekkefølgen av elektron tilstandene er noe forskjellig fra det vi hadde for hydrogēn atomet og skyldes at elektron frastøtninger er inkludert. Det vil være nødvendig med visse små modifikasjoner i rekkefølgen for enkelte atomer, men i alminnelighet vil elektron tilstandene være som vist på figuren.

Legg merke til visse energi gap, områder hvor avstanden mellom to nabo tilstander er klart større enn gjennomsnittet. Dette gir opphav til en skallstruktur i atomene. Energi gap finner vi mellom $1s$ og $2s$, mellom $2p$ og $3s$ og mellom $3p$ og $4s$ osv. Energi tilstandene mellom to energi gap danner et **skall**.

Hvert sett av nl tilstander innen et skall kalles et *underskall*. Antall elektroner som et underskall ifølge Pauliprinsippet kan inneholde, er vist på figuren i kolonnen N_{e-} . Det er også summert opp for hele skallet.

He atomet har 2 elektroner og fyller opp det innerste $1s$ skallet. Den relativt store avstand til de neste elektron tilstandene forklarer at He er et spesielt stabilt grunnstoff. Samme fenomen opptrer ved de andre energi gapene - Ne ved $Z = 10$, Ar ved $Z = 18$ osv..

Egenskapene til de forskjellige atomene er bestemt av elektron konfigurasjonen og de *spektroskopiske kvantetallene*. Vi skal nå definere hva det er og sette opp regler til å bestemme dem for det enkelte atom. La oss starte med et system av to elektroner. Hvert elektron har et banespinn \vec{l} med tilhørende kvantetall l og m_l . For to-elektron systemet har vi et total banespinn, gitt ved

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2. \quad (9.39)$$

Mer generelt har vi

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^{N_{e-}} \vec{l}_i, \quad (9.40)$$

hvor summen løper over antall elektroner N_{e-} . Det tilhørende kvantetallet L er bestemt ut fra regelen

$$L = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, |l_1 - l_2| + 2, \dots, l_1 + l_2, \quad (9.41)$$

og med $M_L = -L, \dots, +L$ Legg merke til at dette er samme regel som ble brukt til å sette sammen \vec{L} og \vec{S} til \vec{J} i forbindelse med spinn-bane koblingen i hydrogēn atomet.

Eksempel: For $l_1 = 1$ og $l_2 = 2$, får vi fra regelen ovenfor $L = 1, 2, 3$. Videre har hvert elektron et egenspinn \vec{s} med kvantetall $s = 1/2$. Dette gir et totalt egenspinn

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2, \quad (9.42)$$

for to-elektron systemet med kvantetall $S = 0$ eller 1 etter samme regel som i likning (9.41). Mer generelt har vi igjen

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^{N_{e-}} \vec{s}_i, \quad (9.43)$$

hvor summen igjen løper over antall elektroner N_{e-} .

For He med begge elektronene i $(n, l) = (1, 0)$ betyr dette at $l_1 = l_2 = 0$, og likning (9.41) gir $L = 0$. For egenspinnet har vi derimot to muligheter, $S = 0$ eller $S = 1$. Hvilken skal vi velge? Her kommer Pauliprinsippet til hjelp og krever at den totale bølgefunksjonen må være antisymmetrisk. La oss se nærmere på hva dette betyr.

Bølgefunksjonen for ett elektron kan skrives som ψ_{l, m_l, m_s} . Kvantetallet m_s har verdiene $\pm 1/2$. En alternativ skrivemåte for $m_s = +1/2$ er $+$ og for $m_s = -1/2$ er $-$. Den totale bølgefunksjonen for to elektroner i He får r formen

$$\psi(1, 2) = \sqrt{\frac{1}{2}} (\psi_{1,0,0,+}(1) \psi_{1,0,0,-}(2) - \psi_{1,0,0,-}(1) \psi_{1,0,0,+}(2)). \quad (9.44)$$

Romdelen av bølgefunksjonen for de to elektronene er symmetrisk, mens egenspinndelen er antisymmetrisk. Det ser vi ved å omforme likning (9.44) til

$$\psi(1, 2) = \psi_{1,0,0}(1) \psi_{1,0,0}(2) \sqrt{\frac{1}{2}} (|+, - \rangle - |-, + \rangle). \quad (9.45)$$

For egenspinnet bruker vi betegnelsen $|+, - >$ til å angi at elektron nr. 1 har $m_s = +1/2$ (opp), og elektron nr. 2 har $m_s = -1/2$ (ned). I tilstanden $|-, + >$ er de byttet om. Symmetri egenskapen til bølgefunksjonen $\psi(1, 2)$ kan vi formulere slik

$$\psi(1, 2) = \begin{pmatrix} \text{romtilstand} \\ \text{symmetrisk} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \text{spinntilstand} \\ \text{antisymmetrisk} \end{pmatrix}, \quad (9.46)$$

og den totale bølgefunksjonen er antisymmetrisk og tilfredsstiller Pauliprinsippet.

To-elektron bølgefunksjonen for He i likning (9.45) tilfredsstiller Pauliprinsippet og har totalt banespinn $L = 0$. Neste spørsmål blir da hvilket totalt egenspinn S tilstanden har.

For en to-elektron egenspinn funksjon har vi

$$\chi_{S=0}(1, 2) = \sqrt{\frac{1}{2}} (|+, - > - |-, + >). \quad (9.47)$$

Denne tilstanden har $S = 0$ og er antisymmetrisk. Det siste er lett å se av formen. En annen mulighet er en egenspinn tilstand med $S = 1$. Denne kommer i tre varianter avhengig av M_S .

$$\chi_{S=1}(1, 2) = \begin{cases} |+, + > & M_S = +1 \\ \sqrt{\frac{1}{2}} (|+, - > + |-, + >) & M_S = 0 \\ |-, - > & M_S = -1 \end{cases} \quad (9.48)$$

Disse tre tilstandene har $S = 1$ og er alle symmetriske, hvilket også tydelig fremgår av formen. Figur 9.4 viser forskjellen i bølgefunksjoner. Egenspinn tilstanden i likning (9.47) brukes i bølgefunksjonen i likning (9.45). Men vi har også situasjoner hvor romfunksjonen kan være antisymmetrisk. Da bruker vi egenspinn funksjonen i likning (9.48).

For He atomet betyr dette at grunntilstanden har $L = 0$ og $S = 0$. Men vi trenger ett kvantetall til, det totale spinn som i hydrog   ble betegnet med J . Den generelle definisjonen er

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (9.49)$$

I tilfelle He betyr dette $J = 0$.

Et samlet symbol for disse kvantetallene er

$$^{2S+1}L_J, \quad (9.50)$$

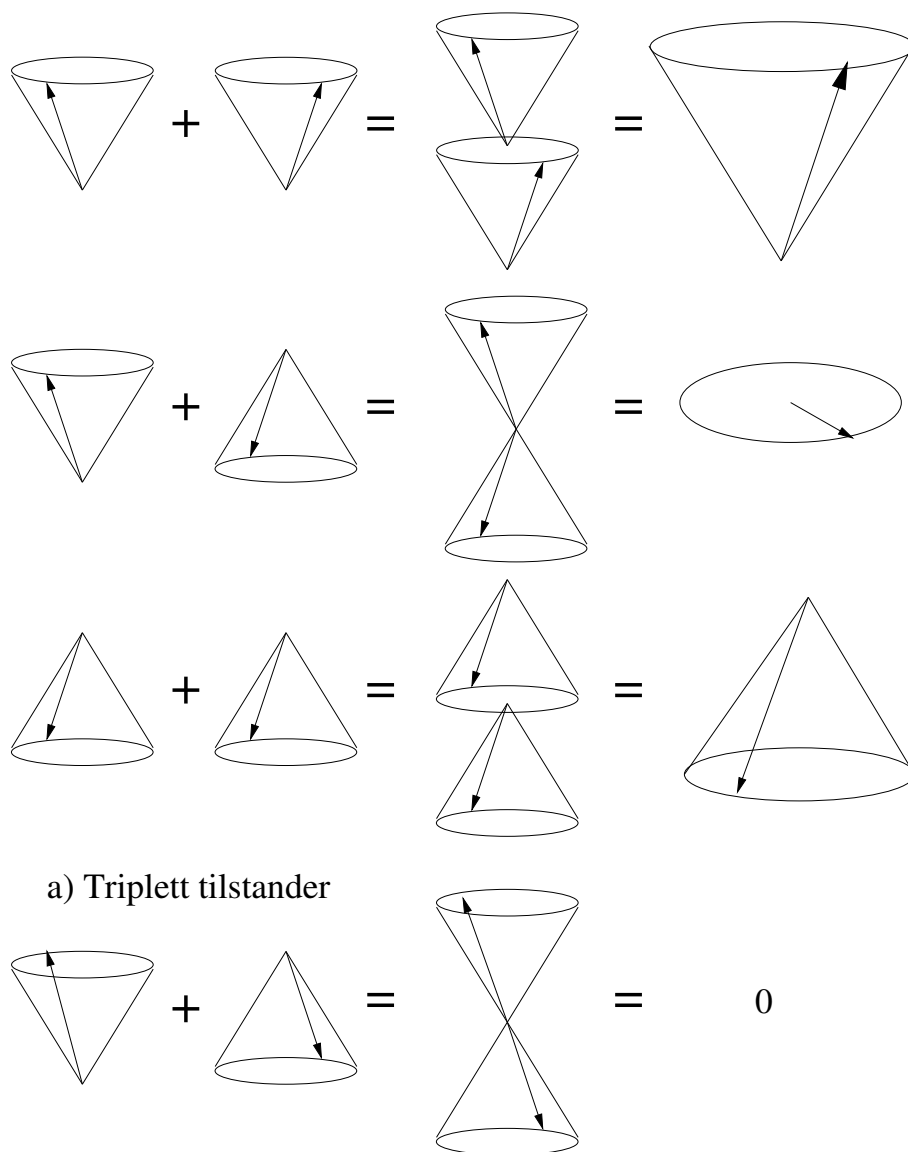
og vi f  r for He: $^{2S+1}L_J = ^1S_0$.

La oss n   anvende denne teorien til    lage en eksitert tilstand i He, dvs. en tilstand som har h  yere energi - mindre bindingsenergi enn He i grunntilstanden. Dette kan vi gj  re ved    flytte ett av elektronene fra $1s$ til $2s$ tilstanden. B  lgefunksjonen f  r da formen

$$\psi(1, 2) = \sqrt{\frac{1}{2}} (R_{1s}(1)R_{2s}(2) + R_{1s}(2)R_{2s}(1)) \chi_{S=0}(1, 2). \quad (9.51)$$

Romdelen av b  lgefunksjonen er symmetrisk og egenspinndelen er antisymmetrisk med $S = 0$, se likning (9.47). Spektroskopisk betegnelse blir 1S_0 . En annen mulighet er

$$\psi(1, 2) = \sqrt{\frac{1}{2}} (R_{1s}(1)R_{2s}(2) - R_{1s}(2)R_{2s}(1)) \chi_{S=1}(1, 2), \quad (9.52)$$



Figur 9.4: Grafisk fremstilling av spinn $S = 0$ og $S = 1$ tilstander som summen av to spinn s_1 og s_2 med magnitudo $\hbar\sqrt{3}/4$. Hvert av spinnene kan bli funnet med lik sannsynlighet på en kjegle som er symmetrisk om den vertikale z -aksen. Men deres orientering er korrelert slik at dersom et av spinnene peker i en bestemt retning så vil også det andre peke i den samme generelle retning. Dersom deres z -komponenter er begge positive $s_{1z} = s_{2z} = +1/2\hbar$ eller begge er negative $s_{1z} = s_{2z} = -1/2\hbar$, blir den totale z -komponenten henholdsvis $S_z = +\hbar$ eller $S_z = -\hbar$. Magnituden til totalspinnet er $S = \sqrt{2}\hbar$. Dersom enkeltspinnene har projeksjoner med ulike verdier, men peker i samme generelle retning, adderes spinn-projeksjonene til $S_z = 0$ men magnituden til totalspinnet er fremdeles $S = \sqrt{2}\hbar$, da vektoren S befinner seg i planet vinkelrett z -aksen. Del a) av figuren illustrerer dette. Da vi har tre muligheter for spinn-projeksjon kalles dette for en tripplett. For singlett tilstanden, peker spinnene i motsatt retning og adderes til totalt spinn $S = 0$ med projeksjon $S_z = 0$. Vi kan si at de to spinnene ikke er i fase med hverandre, som gjenspeiler det faktum at vi har et minus tegn i spinnbølgefunksjonen i likning (9.47). For tripplett tilstanden med $S_z = 0$ er de to spinnene i fase, gjenspeilt i et pluss tegn i spinnbølgefunksjonen i likning (9.48).

hvor romdelen er antisymmetrisk og egenspinndelen symmetrisk med $S = 1$. Det gir spektroskopisk betegnelse 3S_1 . Dette kan vi oppsummere enten ved å sette

$$\psi(1, 2) = \begin{pmatrix} \text{romtilstand} \\ \text{symmetrisk} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \text{spinntilstand} \\ \text{antisymmetrisk} \end{pmatrix}, \quad (9.53)$$

eller

$$\psi(1, 2) = \begin{pmatrix} \text{romtilstand} \\ \text{antisymmetrisk} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \text{spinntilstand} \\ \text{symmetrisk} \end{pmatrix}, \quad (9.54)$$

Eksperimentelt har He-tilstanden i likning (9.52) med $S = 1$ større bindingsenergi enn tilstanden i likning (9.51) med $S = 0$. Dette kan forklares ved at i den antisymmetriske romdelen av bølgefunksjonen i likning (9.52) har de to elektronene i middel større avstand enn i tilstand (9.51). Derved blir elektron frastøtningen mindre. Legg merke til at for en symmetrisk romfunksjon kan de to elektronene være på samme sted i rommet, mens for den antisymmetriske romfunksjonen er sannsynligheten for dette lik null. Spektret for noen av de lavereliggende tilstandene i heliumatom er vist i Figur 9.5.

9.5 System med mer enn to elektroner

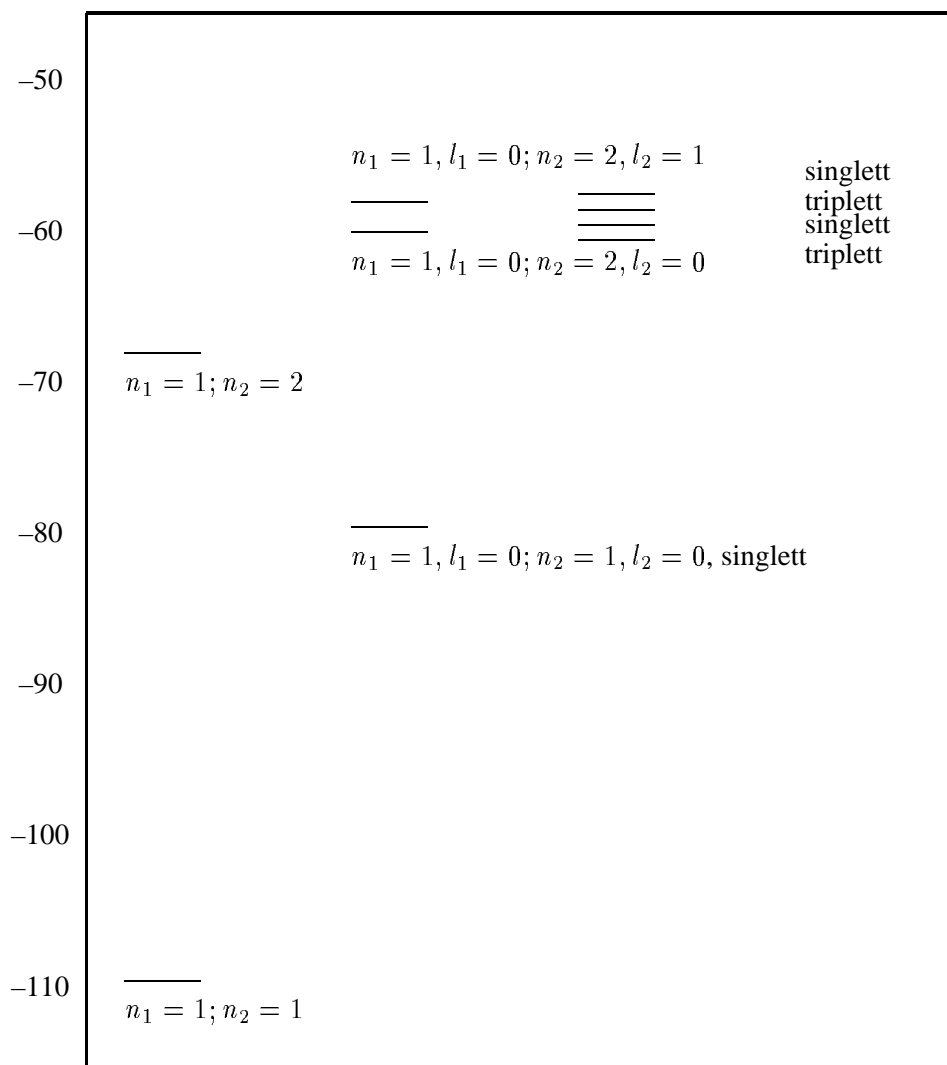
Vi skal nå bruke teorien på systemer med flere elektroner. Med utgangspunkt i de regler vi hittil har presentert kan vi sette opp elektron konfigurasjonen til de 10 første grunnstoffene. Dette er vist i figur 9.6. Symbolet $\uparrow\downarrow$ i figuren betyr at de to elektronene er i en antisymmetrisk spinn tilstand med $S = 0$. For de fem første grunnstoffene er de spektroskopiske kvantetallene:

$$\text{H: } ^2S_{1/2} \quad \text{He: } ^1S_0 \quad \text{Li: } ^2S_{1/2} \quad \text{Be: } ^1S_0 \quad \text{B: } ^2P_J, J = 1/2 \text{ eller } 3/2$$

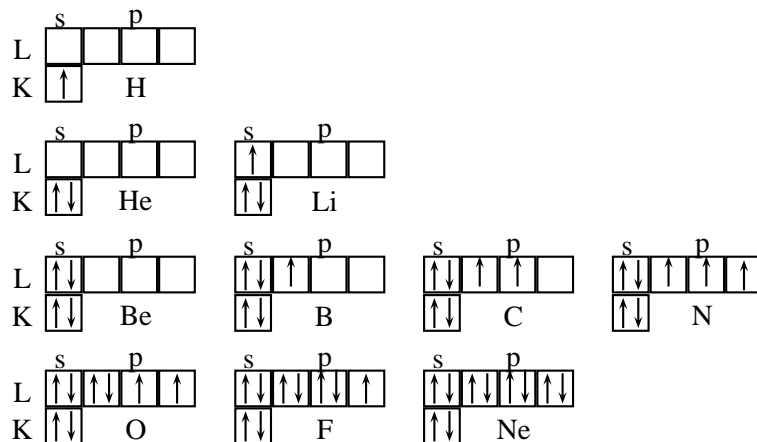
Større problemer blir det med de fem siste grunnstoffene. Her trenger vi noen flere regler:

1. Hvis alle tilstandene i et underskall inneholder elektroner, $(nl)^{2(2l+1)}$, danner det et *lukket skall*. En slik konfigurasjon har totalt $L = 0$ og $S = 0$.
Eksempel: Underskallet $2p$ i Ne inneholder $2 \cdot (2 \cdot 1 + 1) = 6$ elektroner ifølge figur 9.6. Dette er det maksimalt tillatte antall etter Pauliprinsippet, og konfigurasjonen har $L = S = 0$. Det samme argumentet kan vi bruke på skallet $1s$ og underskallet $2s$. Til sammen vil derfor de 10 elektronene i Ne ha $L = S = J = 0$, dvs. 1S_0 .
2. Grunnstoffet N har ifølge figur 9.6 3 elektroner i $2p$ og spinnfunksjonen er $|+, +, +\rangle$. Alle spinnektorene er rettet samme vei, og vi får $M_S = 1/2 + 1/2 + 1/2 = 3/2$ med $S = 3/2$ siden $S \geq M_S$. Dette er et eksempel på **Hunds regel**: *Elektronene fyller et underskall slik at S blir størst mulig når vi tar hensyn til at Pauliprinsippet skal være oppfylt*. Forklaringen er følgende: Vi vet fra He atomet at vi får størst bindingsenergi ved å minimalisere elektron frastøtningen. Det oppnår vi ved å antisymmetrisere romdel av bølgefunksjonen, og etter Pauliprinsippet betyr det å gjøre spinnfunksjonen mest mulig symmetrisk. Dette er Hund's regel og vi ser den anvendt i figur 9.6 både for C, $Z = 6$, N, $Z = 7$, O, $Z = 8$ og F, $Z = 9$.
3. En regel til er viktig og kommer til anvendelse i tilfelle F med $Z = 9$. Fra figur 9.6 ser vi at $2p$ underskallet inneholder 5 elektroner. Adderer vi til ett elektron, får vi et lukket $2p$ underskall. Det gir $L = S = 0$. Vi kan da skrive

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{l}, \quad (9.55)$$



Figur 9.5: Energitilstander for heliumatomet. Energiene er i elektronvolt eV. Kolonnen til venstre angir resultatene for en uavhengig partikkel modell uten Coulomb vekselvirkningen mellom elektronene. Den midterste kolonnen angir resultatet med Coulomb vekselvirkningen men uten den fulle antisymmetriske bølgefunksjonen. Den siste kolonnen angir de eksperimentelle verdiene for de lavest liggende tilstandene og deres teoretiske tolkninger.



Figur 9.6: Elektron konfigurasjonene for de 10 første grunnstoffene.

hvor L er banespinnet for $2p^6$, L_1 er banespinnet for $2p^5$ og l er banespinnet for et elektron i $2p$ skallet. De tilhørende kvantetallene blir $L = 0$, $l = 1$ og L_1 . Bruker vi regelen i likning (9.41), får vi som eneste mulighet $L_1 = 1$. Tilsvarende analyse kan vi gjennomføre for egenspinnet med svar $S_1 = 1/2$.

Konklusjon: Har vi et underskall nl , vil elektron konfigurasjonen $(nl)^{2(2l+1)-1}$ ha samme bane-spinn og egenspinn som et enkelt elektron i samme underskall.

Denne symmetrien betyr at $F, Z = 9$ og $B, Z = 5$ har samme spektroskopiske kvantetall - 2P_J med mulighetene $J = 1/2$ eller $3/2$.

For en fullstendig beskrivelse av de 10 første grunnstoffene i figur 9.6 trenges ennå litt mer teori. Vi får ikke fastlagt banespinn for C, N og O nøyaktig. Men det vil vi overlate til videre studium i kvantefysikken. Vi kan likevel bruke teorien vår til å gi en god beskrivelse av mange grunnstoffer i det periodiske system, ikke bare de som er angitt i figur 9.6.

9.6 Alkalimetallene

I tolkningen av atomære spektra tar vi utgangspunkt i den enkle skallmodellen (sentralfelt modellen) for fler-elektron atomer. Her plasseres elektronene i tilstander som har de samme kvantetallene som energi egentilstandene for Hydrogen atomet:

$$1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \dots$$

Et hovedskall karakteriseres ved kvantetallet n . Et spørsmål som melder seg er hvor mange elektroner kan plasseres i et hovedskall som funksjon av kvantetallet n . I sentralfelt modellen sier Pauli prinsippet at to eller flere elektroner ikke kan ha samme sett kvantetall. Det følger av det generelle kravet om at den totale bølgefunksjonen for fermioner skal være antisymmetrisk. Dermed er antall elektroner som vi kan ha for hver verdi av l , som danner et underskall, gitt ved $2(2l + 1)$, hvor to-tallet foran $2l + 1$ kommer fra de to mulige spinn projeksjoner et elektron kan ha. Et skall i sentralfelt modellen er bestemt av kvantetallet n , og for hver n verdi har vi $n - 1$ mulige l verdier. Totalt får vi dermed $2n^2$ tilstander i hvert skall.

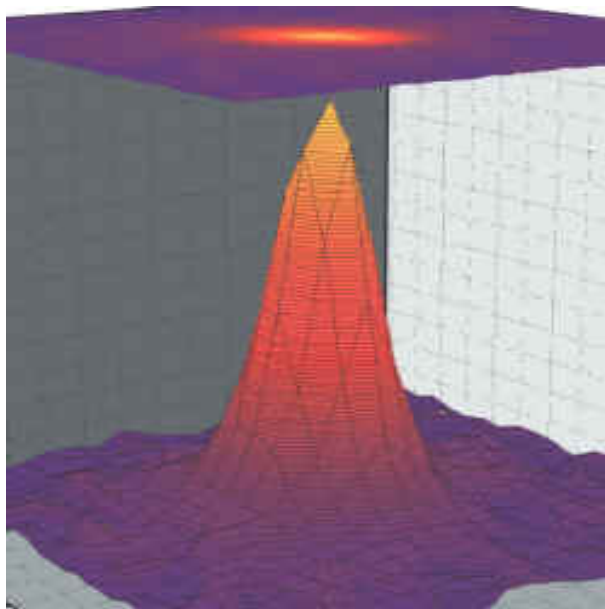
Alkalimetallene er karakterisert ved at det har et såkalt valenselektron utenfor et lukka skall, slik som f.eks. Litium atomet som har to elektroner i $1s$ skallet og ett elektron i $2s$ skallet. For Natriumatomet,

som har elleve elektroner, har vi fylt opp de tre indre skallene, $1s$, $2s$ og $2p$, slik at det siste elektronet plasseres i $3s$ skallet. Innenfor ramma av sentralfelt modellen vil da $2p$ elektronet i Natrium ha mindre bindingsenergi enn $2s$ elektronet. Dette er forskjellig fra det vi har sett i hydrogenatomet. Årsaken til at bindingsenergien til $2p$ orbitalen er litt mindre enn $2s$ orbitalen, er at et elektron fra denne orbitalen føler en frastøting fra elektronene i $1s$ og $2s$ orbitalene, som er fylt. Vi kan dermed si at frastøtingen et elektron i $2p$ orbitalen føler fra de fire elektronene minsker dets energi i forhold til $2s$ orbitalen. I Hydrogenatomet er ikke $1s$ og $2s$ orbitalene fylt og $2s$ og $2p$ tilstandene har samme energi.

Litium og Natrium er eksempler på metaller som kalles alkalimetallene, som kjennetegnes ved at ioniseringsenergien, se tilbake på figur 9.1, er liten i forhold til edelgass atomene som Helium og Neon. Det har som følge at alkalimetallene er svært reaktive.

Alkalimetallene er og har vært ekstremt populære, og var de første som blei brukt til å lage et Bose-Einstein kondensat via laser kjøling og innfangning i magnetiske feller i små områder på størrelse med noen få μm . En viktig årsak bak denne populariteten skyldes at eksitasjonsspektret har frekvenser som er i området for synlig lys, noe som det gjør det enklere å generere ulike overganger. En grunn til for denne omsvermingen av alkaliene er at det er lett å lage atomære stråler. Atomene har et stort gasstrykk ved lave temperaturer, og en oppvarming av alkalimetaller i en ovn med en liten åpning produserer en stråle av atomer som lett kan manipuleres med laserlys.

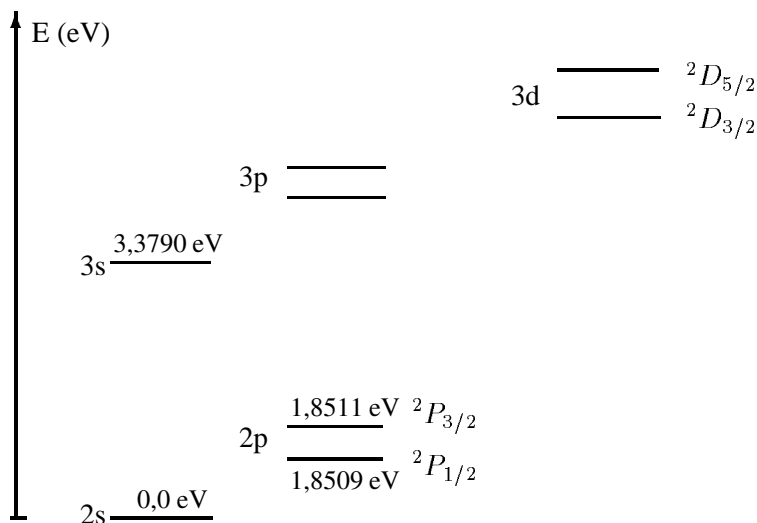
Andre alkalimetaller er Kalium, Rubidium, Cesium og Francium. Prøv å sette opp deres respektive grunn-tilstandsfunksjoner. Her skal vi begrense til å se på Litium og Natrium.



Figur 9.7: Atomær sixpack av Cesium atomer. Fluorescerende lys sendt ut av seks Cesium atomer avslører et tett cluster på ca. $10\ \mu\text{m}$ av slike atomer, avgrensa i et lite område vha. magnetiske felt og lasere. Tyske fysikere demonstrerte nylig hvordan slike atomer kan fanges inn kun vha. lasere, et interessant utgangspunkt for manipulering av kvantemekaniske tilstander. For mer informasjon, se Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 3777.

9.6.1 Litium atomet

Litium atomet har i grunntilstanden konfigurasjonen $1s^2 2s^1$. Her skal vi studere noen tilstander hvor valens elektronet er i en eksitert tilstand. Figur 9.9 viser energi nivåene for noen slike tilstander. Vi angir konfigurasjonen for valens elektronet, og for enkelte nivåer også termsymbolet. For $2p$ og $3s$ nivåene er eksitasjonsenergien over $2s$ nivået oppgitt i eV. Siden $2p$ orbitalen kommer rett over $2s$ orbitalen, vil den første eksiterte tilstanden for Litium være gitt ved konfigurasjonen $1s^2 2p^1$. Vi kan jo selvsagt også eksitere et elektron til høyere liggende orbitaler slik som f.eks. $3s$ eller $3d$ orbitalen. Det er viktig å



Figur 9.9: Energitilstander for Litium atomet.

merke seg er at p og d nivåene er splittet i to, mens s nivåene ikke er splittet. I tillegg har f.eks. nivået $^2P_{1/2}$ lavere energi enn $^2P_{3/2}$.

Denne energisplittingen for p og d nivåene skyldes spinn-bane koblingen, som er proporsjonal med $\vec{L} \cdot \vec{S}$, se tilbake på avsnitt 8.1.4. Bruker vi

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}) = \hat{\mathbf{L}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2,$$

kan vi omskrive spinn-bane vekselvirkningen som

$$a\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} = a \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{2}.$$

Bruker vi deretter at

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \psi = \hbar^2 J(J+1) \psi,$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi = \hbar^2 L(L+1) \psi,$$

og

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \psi = \hbar^2 S(S+1) \psi,$$

og setter vi inn de respektive J , S og L verdiene for de eksiterte tilstandene i dubletten finner vi at differansen pga. spinn-bane vekselvirkningen mellom $J = 3/2$ og $J = 1/2$ blir

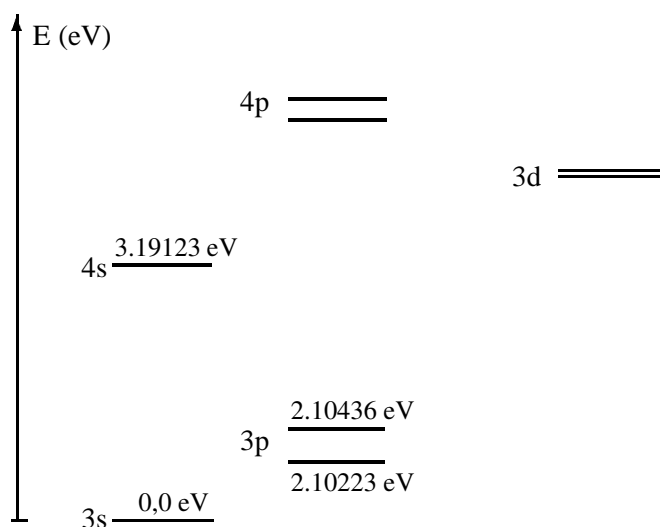
$$\Delta E = \frac{3}{2} a \hbar^2.$$

Spinn-bane vekselvirkningen forklarer også hvorfor $^2P_{1/2}$ nivået har en lavere energi enn $^2P_{3/2}$ nivået.

9.6.2 Na atomet

Natrium (Na) atomet har 11 elektroner. Vi kan igjen bruke den enkle skallmodellen for elektronene til å bestemme elektronenes grunntilstandskonfigurasjon. Grunntilstanden karakteriseres ved kvantetallene L , S , J satt sammen i termsymbolet $^{2S+1}L_J$. De 10 innerste elektronene danner 3 lukkede underskall $1s^2$, $2s^2$ og $2p^6$ hvor kvantetallene $L = S = J = 0$. Spinnkvantetallene for hele systemet bestemmes derfor av det siste elektronet i orbitalen $3s$ til $L = 0$, $S = 1/2$, $J = 1/2$. Det gir en spektroskopisk notasjon gitt ved $^2S_{1/2}$ og en grunntilstandskonfigurasjon gitt ved $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$.

I figur 9.10 viser vi energinivåene for noen slike tilstander. For $3p$ og $4s$ nivåene er eksitasjonsenergien over $3s$ nivået oppgitt i eV. Bruk resultatene fra foregående avsnitt og prøv å klassifisere konfigurasjonene



Figur 9.10: Energitilstander for Na atomet.

for $3p$ og $3d$ orbitalene samt deres respektive spektroskopiske faktorer $^{2S+1}L_J$.

9.7 Jordalkalimetaller

Denne klassen av metaller er kjennetegnet ved at vi har to valenselektroner utenfor lukka skall, se igjen figur 9.6. Eksempler er Beryllium, Magnesium og Kalsium. For Beryllium har vi fylt opp $2s$ skallet også. For Magnesium har vi to elektroner i $3s$ skallet. Disse atomene har dermed en større ionisasjonsenergi enn alkalimetallene, som vist også i figur 9.1.

For disse atomene må vi huske at det totale spinn, banespinn og egenspinn er summene av de enkelte elektronenes ulike spinn.

For egenspinnet betyr det at vi kan ha verdiene 0 og 1, siden vi legger sammen egenspinnene til to elektroner med halvtallig spinn.

For Beryllium vil, siden de to valenselektronene befinner seg i $2s$ orbitalen, det totale banespinn være gitt ved $L = 0$, da $l_1 = 0$ og $l_2 = 0$, banespinnene til henholdsvis elektron 1 og 2. Totalt spinn $J = L + S$ blir dermed enten 0 eller 1. Konfigurasjonen for grunntilstanden er gitt ved $1s^2 2s^2$.

For disse metallene er $2s$ skallet også fylt, det betyr at vi må ha $S = 0$ og $L = 0$ og dermed en spektroskopisk term gitt ved 1S_0 . Den romlige bølgefunksjonen er symmetrisk mens spinnbølgefunksjonen må

være antisymmetrisk for at den totale bølgefunksjonen skal være antisymmetrisk.

9.8 Zeeman effekten for atomer

Vi avslutter dette kapitlet med å se på Zeeman effekten for atomer og det som kalles for den anomale Zeeman effekten.

Målet vårt er å beregne virkningen av det magnetiske momentet når vi tar hensyn til spinn-bane vekselvirkningen $V_{LS} \propto \hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{L}}$. Hvorfor? Går vi tilbake til uttrykket for spinn-bane vekselvirkningen, ser vi fra likning (8.78) at spinn-bane vekselvirkningen er proporsjonal med Z^4 , hvor Z er kjernens ladingstall. Det betyr at for tyngre kjerner kan vi ikke neglisjere denne korreksjonen.

Som dere vil se av gangen nedenfor, skaper dette leddet noen komplikasjoner i forhold til resultatene fra avsnitt 8.1.1.

Tidligere, se tilbake på avsnitt 8.1.1, har vi sett fra vår diskusjon om Zeeman effekten, at banespinnet gir opphav til et magnetisk moment

$$\hat{\mathbf{M}}_L = -\frac{e}{2m}\hat{\mathbf{L}},$$

og dersom vi setter på et magnetisk felt, får vi et kraftmoment som igjen gir et tillegg til potensiell energi gitt ved

$$\Delta E = -\hat{\mathbf{M}}_L \mathbf{B}.$$

Tilsvarende fant vi et magnetisk dipolmoment for egenspinnet gitt ved

$$\hat{\mathbf{M}}_S = -g_S \frac{e}{2m}\hat{\mathbf{S}},$$

med $g_S \approx 2$. Det totale magnetiske momentet $\hat{\mathbf{M}}$ er dermed gitt ved

$$\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{M}}_L + \hat{\mathbf{M}}_S = -\frac{e}{2m}(\hat{\mathbf{L}} + g_S \hat{\mathbf{S}}), \quad (9.56)$$

som resulterer i et energibidrag

$$\Delta E = -\hat{\mathbf{M}}\mathbf{B}. \quad (9.57)$$

Merk at både $\hat{\mathbf{L}}$ og $\hat{\mathbf{S}}$ er gitt ved

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{\mathbf{l}}_i, \quad (9.58)$$

og

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{\mathbf{s}}_i, \quad (9.59)$$

hvor $\hat{\mathbf{l}}_i$ er banespinnet til hvert enkeltelektron og $\hat{\mathbf{s}}_i$ er det tilsvarende egenspinnet. Absoluttverdiene til $\hat{\mathbf{L}}$ og $\hat{\mathbf{S}}$ er gitt ved henholdsvis

$$|\hat{\mathbf{L}}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}, \quad (9.60)$$

og

$$|\hat{\mathbf{S}}| = \hbar\sqrt{S(S+1)}, \quad (9.61)$$

da $\hat{\mathbf{L}}^2\psi = \hbar^2 L(L+1)\psi$ og $\hat{\mathbf{S}}^2\psi = \hbar^2 S(S+1)\psi$. Det betyr også at

$$|\hat{\mathbf{M}}| = -\frac{e\hbar}{2m} \left(\sqrt{L(L+1)} + g_S \sqrt{S(S+1)} \right). \quad (9.62)$$

Men, siden vi har spinn-bane vekselvirkningen til stede har vi gått over til å bruke det totale spinnet J , gitt ved

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}.$$

Vi skal merke oss at $\hat{\mathbf{M}}$ og $\hat{\mathbf{J}}$ ikke er parallelle! Banespinnet og egenspinnet setter opp et kraftmoment, uttrykt ved det magnetiske momentet $\hat{\mathbf{M}}$. Uten et ytre påsatt kraftmoment, er det totale spinnet J bevart og vi kan visualisere effekten av banespinn vekselvirkningen som om L og S dreier om det resulterende spinnet. Siden det magnetiske momentet $\hat{\mathbf{M}}$ heller ikke er parallellt med $\hat{\mathbf{J}}$ kan vi forestille oss at også det magnetiske momentet dreier om $\hat{\mathbf{J}}$. Den gjennomsnittlige verdien av $\hat{\mathbf{M}}$, dvs. $\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle$ er gitt ved komponenten til $\hat{\mathbf{M}}$ parallellt med $\hat{\mathbf{J}}$, dvs.

$$\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = (\hat{\mathbf{M}} \frac{\hat{\mathbf{J}}}{|\hat{\mathbf{J}}|}) \frac{\hat{\mathbf{J}}}{|\hat{\mathbf{J}}|}, \quad (9.63)$$

hvor

$$\frac{\hat{\mathbf{J}}}{|\hat{\mathbf{J}}|},$$

er enhetsvektoren i $\hat{\mathbf{J}}$ retningen. Setter vi inn for $\hat{\mathbf{M}}$ og bruker at $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ kan vi skrive om likning (9.63) som

$$\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = -\frac{e}{2m_e} \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}}}{|\hat{\mathbf{J}}|^2} \hat{\mathbf{J}}, \quad (9.64)$$

eller

$$\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = -\frac{e}{2m_e} \left(1 + \frac{\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}}}{|\hat{\mathbf{J}}|^2} \right) \hat{\mathbf{J}}, \quad (9.65)$$

og med

$$\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}} = (\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}})(\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}}) = \hat{\mathbf{J}}^2 - 2\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2 \quad (9.66)$$

finner vi at

$$\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2) \quad (9.67)$$

som innsatt gir, når vi bruker

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \psi = \hbar^2 J(J+1) \psi, \quad (9.68)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi = \hbar^2 L(L+1) \psi, \quad (9.69)$$

og

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \psi = \hbar^2 S(S+1) \psi, \quad (9.70)$$

at

$$\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = -\frac{e}{2m_e} g \hat{\mathbf{J}}. \quad (9.71)$$

Her har vi introdusert Landes g -faktor gitt ved

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (9.72)$$

som for partikler med halvtallig spinn gir

$$g = 1 \pm \frac{1}{2l+1},$$

da $j = l \pm 1/2$.

Dette uttrykket kan så brukes til å rekne ut oppsplittingen i energispekteret for et atom i et svakt magnetfelt i forhold til spinnbane vekselvirkningen. Dersom magnetfeltet er sterkt, vil resultatene fra avsnitt 8.1.1 gjelde.

Velger vi z -aksen til å sammenfalle med magnetfeltets retningen, finner vi at forandringen i energi kan skrives

$$\Delta E = -\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle \mathbf{B} = \frac{eg}{2m_e} \hat{\mathbf{J}}_z B_z, \quad (9.73)$$

hvis virkning på en egentilstand med kvantetall J, M_J gir

$$\Delta E = \mu_B g M_J B_z. \quad (9.74)$$

hvor vi har brukt at Bohr magnetonen er definert som $\mu_B = e\hbar/2m_e$.

Tabellen her viser oppsplittingen for Hydrogen for tilstandene $^2S_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$ med et ytre magnetfelt $B_z = 0.05$ T. Energibidraget blir dermed

$$\Delta E = g M_J (5.79 \times 10^{-5} \text{ eV/T}) (0.05 \text{ T}).$$

Tabell 9.2: Resultater for den anomale Zeeman effekten for Hydrogenatomet.

	L	S	J	g	M_J	$\Delta E \times 10^{-5} \text{ eV}$
$^2S_{1/2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	2	$\pm \frac{1}{2}$	± 0.290
$^2P_{3/2}$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{4}{3}$	$\pm \frac{3}{2}$	± 0.579
$^2P_{1/2}$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$\pm \frac{1}{2}$	± 0.193

Vi avslutter med å studere spekteret til Kaliumatomet (med spinn-bane vekselvirkningen) som plasseres i et svakt og homogent ytre magnetfelt \vec{B} (fra eksamensoppgaven i FYS 113 vår 2000). Da vil vekselvirkningen mellom atomets magnetiske dipolmoment $\hat{\mathbf{M}}$ og magnetfeltet \vec{B} gi opphav til et ekstra ledd $\hat{\mathbf{H}}'$ i Hamiltonoperatoren

$$\hat{\mathbf{H}}' = -\hat{\mathbf{M}} \cdot \vec{B}. \quad (9.75)$$

$\hat{\mathbf{H}}'$ vil gi opphav til en splitting av energinivåene.

Vi skal beregne, uttrykt ved $\mu_B = e\hbar/2m$ og feltstyrken B , energi oppsplittingen av grunntilstanden og de to første eksiterte tilstandene og deres degenerasjonsgrad. Utvalgsreglene for elektromagnetiske dipoloverganger er $\Delta j = 0, \pm 1$; $\Delta m_j = 0, \pm 1$; $\Delta l = \pm 1$.

Kaliumatomet har 19 elektroner, noe som betyr at grunntilstanden er gitt ved konfigurasjon $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ og med $J = 1/2$, $L = 0$ og $S = 1/2$. Den første eksiterte tilstanden har konfigurasjonen $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4p^1$ med $J = 1/2$ eller $J = 3/2$, $L = 1$ og $S = 1/2$. Energidifferansen mellom grunntilstanden og den første eksiterte tilstanden er gitt ved 1.617 eV.

Tilstanden med $J = 3/2$ har en eksitasjonsenergi, når vi tar med spinn-bane koplingen gitt ved

$$E_{J=3/2} = 1.617 + \frac{1}{2}a\hbar^2 = 1.621 \text{ eV},$$

mens tilstanden med $J = 1/2$ har

$$E_{J=1/2} = 1.617 - a\hbar^2 = 1.610 \text{ eV}.$$

Bølgelengden for overgangen til grunntilstanden er gitt for tilstanden med $J = 1/2$ ved

$$\lambda_{J=1/2} = \frac{hc}{1.610 \text{ eV}} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{1.610 \text{ eV}} = 770.2 \text{ nm},$$

mens bølgelengden for overgangen til grunntilstanden er gitt for tilstanden med $J = 3/2$ ved

$$\lambda_{J=3/2} = \frac{hc}{1.621 \text{ eV}} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{1.621 \text{ eV}} = 765.0 \text{ nm}.$$

Et eventuelt spektrometer som skal måle disse energidifferansene må derfor minst ha en oppløsning på 5.2 nm.

De ulike tilstandene gir også ulike Lande faktorer g . For tilstanden $^2S_{1/2}$ er $L = 0$, $S = 1/2$, $J = 1/2$ som gir $g = 2$. For tilstanden $^2P_{1/2}$ er $L = 1$, $S = 1/2$, $J = 1/2$ som gir $g = \frac{2}{3}$. For tilstanden $^2P_{3/2}$ er $L = 1$, $S = 1/2$, $J = 3/2$ som gir $g = \frac{4}{3}$. Den generelle formelen for energisplittingen blir $\Delta E(^{2S+1}L_J) = \mu_B g B M_J$. Dette gir

$$\Delta E(^{2S+1}L_J) = \begin{cases} 2\mu_B B M_J & \text{for } ^2S_{1/2} \\ \frac{2}{3}\mu_B B M_J & \text{for } ^2P_{1/2} \\ \frac{4}{3}\mu_B B M_J & \text{for } ^2P_{3/2} \end{cases}$$

Ingen tilstander har nå samme energi slik at degenerasjonsgraden blir lik 1. Uten magnetfelt får vi 2 spektrallinjer: $^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ og $^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$. Med magnetfelt: $^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ splittes opp i 4 linjer. Energy forskyvningen på grunn av magnetfeltet blir $\{+4/3, +2/3, -2/3, -4/3\} \times \mu_B B$. Og $^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ gir 6 linjer med en energiforskyvning $\{+5/3, +1, +1/3, -1/3, -1, -5/3\} \times \mu_B B$.

9.9 Oppgaver

9.9.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 9.1, Eksamen V-2001

Vi skal studere grunntilstanden i helium atomet. Følgende opplysninger kan være til nytte: Energien til et atom (eller ion) som består av ett elektron og en kjerne med ladning Ze , er i grunntilstanden

$$E_1 = -Z^2 e^2 / (8\pi \epsilon_0 a_0), \quad \text{hvor } a_0 = 4\pi \epsilon_0 \hbar^2 / (m_e e^2).$$

Bølgefunksjonen er da

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r}) = \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-Zr/a_0).$$

Energien av hydrog  atomet i grunntilstanden = $-13,6 \text{ eV}$.

- a) Anta (i dette ene spørsmålet) at det overhodet ikke er noen vekselvirkning mellom elektronene. Hvilken energi har i så fall helium atomet i grunntilstanden?

Helium atomet har i grunntilstanden konfigurasjonen $1s^2$. For $1s$ -orbitalen bruker vi en bølgefunksjon av typen

$$g(r) = \frac{\beta^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta r); \quad \beta = \text{konstant}.$$

Vi oppgir rom-integralene

$$\int \{g(r)\}^2 d\vec{r} = 1; \quad \int \{g(r)\}^2 \frac{1}{r} d\vec{r} = \beta; \quad \int g(r) \nabla^2 g(r) d\vec{r} = -\beta^2,$$

og det dobbelte rom-integralet

$$\int \int \{g(r_1)\}^2 \{g(r_2)\}^2 \frac{1}{r_{12}} dV_1 dV_2 = \frac{5}{8} \beta \quad \text{hvor} \quad r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|.$$

- b) Skriv opp Hamilton operatoren \hat{H} for helium atomet. (Vi regner at kjernen er i ro).
c) Vis at forventningsverdien (middelverdien) $\langle \hat{H} \rangle$ av energien i den gitte konfigurasjonen er

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\hbar^2}{m_e} \beta^2 - \frac{27}{32} \frac{e^2}{\pi \epsilon_0} \beta.$$

Vi kan nå finne energien i grunntilstanden ganske nøyaktig ved et variasjonsprinsipp. Det sier at bølgefunksjoner som ikke er lik den eksakte energi egenfunksjonen for grunntilstanden, alltid gir en forventningsverdi for energien som er større enn den virkelige egenverdien. Metoden går ut på å finne den bølgefunksjonen (av typen $g(r)$), som gir den minste forventningsverdien for energien.

- d) Hvilken (tilnærmet) verdi for energien i grunntilstanden finner vi etter den skisserte metoden?
Til kontroll: Eksperimentelt er energien $-78,98$ eV.

Den modellen som vi etter dette har av helium atomet i grunntilstanden, er karakterisert ved at virkningen av det ene elektronet på det andre skjer ved en avskjerming av kjerneladningen, slik at hvert elektron er i en stasjonær tilstand i feltet fra en viss effektiv kjerneladning.

- e) Hvor stor er den effektive kjerneladningen?

Oppgave 9.2

I den enkle skallmodellen for fler-elektron atomer plasseres elektronene i tilstander som har de samme kvantetallene som energi egentilstandene for H-atomet:

$$1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \dots; nl = n0, nl = n1, \dots, nl = n, n - 1.$$

- a) Hvor mange elektroner kan det plasseres i hver av tilstandene $1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \dots; nl = n0, \dots, nl = n, n - 1$? Formulér det prinsippet som bestemmer hvor mange elektroner det kan være i hver tilstand.

I H-atomet har tilstandene $nl = n0, nl = n1, \dots, nl = n, n - 1$ alle samme energi. De er degenererte. I et fler-elektron atom, er dette ikke lenger tilfelle.

b) Diskutér årsaken til dette.

Atomene He, Be og Ne har henholdsvis 2, 4 og 10 elektroner. Grunntilstanden for disse tre atomer betegnes med symbolet 1S_0 ($^{2S+1}L_J$).

c) Skriv ned verdien av kvantetallet S for det totale egenspinn, L for det totale banespinn og J for det totale spinn for He, Be og Ne i grunntilstanden.

Na-atomet har 11 elektroner. Grunntilstanden er gitt ved symbolet $^2S_{1/2}$.

d) Begrunn at verdiene av grunntilstandens spinn kvantetall er bestemt av valenselektronets kvantetall.

De to laveste eksiterte tilstandene i Na-atomet er $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$.

e) Angi hvordan spinn kvantetallene for disse tilstandene bestemmes av valenselektronets kvantetall.

Tilstandene $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$ ligger henholdsvis 2,1022 eV og 2,1044 eV over grunntilstanden.

f) Diskutér kort og kvalitativt årsaken til energiforskjellen mellom tilstandene $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$. Hvor stor er degenerasjonsgraden for hvert av nivåene og hva er årsakene til denne degenerasjonen?

Dersom Na atomet er i en av tilstandene $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$ vil det gå over til grunntilstanden og emitte et foton.

g) Hvor stor bølgelengdeoppløsning må en minst ha for å skille spektrallinjene fra overgangene $^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ og $^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ i et spektrometer?

Når vi tar hensyn til egenspinn–banespinn kobling (spin–banekobling) er operatoren $\hat{\vec{M}}$ for det magnetiske dipol momentet gitt ved

$$\hat{\vec{M}} = -\frac{e}{2m}g\hat{\vec{J}},$$

der m er elektronets hvilemasse, $\hat{\vec{J}}$ er operatoren for det totale spinnet og

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}.$$

h) Vis at $g = 2$ for tilstanden $^2S_{1/2}$, $g = \frac{4}{3}$ for tilstanden $^2P_{3/2}$ og $g = \frac{2}{3}$ for tilstanden $^2P_{1/2}$.

Dersom Na atomet plasseres i et svakt og homogent ytre magnetfelt \vec{B} vil vekselvirkningen mellom atomets magnetiske dipolmoment \vec{M} og magnetfeltet \vec{B} gi opphav til et ekstra ledd $\hat{\vec{H}}'$ i Hamiltonoperatoren

$$\hat{\vec{H}}' = -\hat{\vec{M}} \cdot \vec{B}.$$

$\hat{\vec{H}}'$ vil gi opphav til en splitting av energinivåene.

i) Beregn, uttrykt ved $\mu_B = e\hbar/2m$ og feltstyrken B , oppsplittingen av nivåene $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$ og angi de nye energinivåenes kvantetall og deres degenerasjonsgrad.

Utvalgsreglene for elektromagnetiske dipoloverganger er $\Delta j = 0, \pm 1$; $\Delta m_j = 0, \pm 1$; $\Delta l = \pm 1$.

j) Tegn figurer som viser hvordan overgangene $^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ og $^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ og de tilsvarende spektrallinjene blir modifisert av magnetfeltet \vec{B} .

Løsning

- a) I sentralfeltmodellen er kvantetallene bestemt etter følgende regler

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (9.76)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (9.77)$$

$$m_l = -l, -l+1, -l+2, \dots, +l \quad (9.78)$$

$$m_s = -1/2, +1/2 \quad (9.79)$$

Pauliprinsippet krever at bølgefunksjonen for elektroner må være antisymmetrisk. I sentralfeltmodellen betyr det at ingen elektroner i et mange-elektronsystem kan ha samme sett kvantetall.

I en tilstand (nl) kan vi derfor ha $2 \cdot (2l+1)$ elektroner, alle med forskjellige verdier av kvantetallene m_l, m_s .

- b) I et fler-elektron system inneholder den potensielle energien bidrag fra Columbfrastøtning mellom elektronene som ikke forekommer i et Hydrogēn atom. Dette har som konsekvens at tilstander (nl) med samme n , men forskjellig l , ikke har samme energi.

- c) Atomene He, Be og Ne har følgende elektron konfigurasjon med tilhørende kvantetall L, S, J

$$\text{He} : 1s^2 \quad L = 0, \quad S = 0 \quad J = 0 \quad \text{Spektroskopisk kvantetall} : {}^1S_0 \quad (9.80)$$

$$\text{Be} : 1s^2 2s^2 \quad L = 0, \quad S = 0 \quad J = 0 \quad \text{Spektroskopisk kvantetall} : {}^1S_0 \quad (9.81)$$

$$\text{Ne} : 1s^2 2s^2 2p^6 \quad L = 0, \quad S = 0 \quad J = 0 \quad \text{Spektroskopisk kvantetall} : {}^1S_0 \quad (9.82)$$

Alle elektronkonfigurasjonene danner lukkede skall og har følgelig $L = S = J = 0$.

- d) Na har elektronkonfigurasjonen $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. De første 10 elektronene danner lukkede skall med $L = S = J = 0$, Kvantetallene L, S, J for Na er derfor bestemt av det siste elektronet til $L = 0, S = 1/2, J = 1/2$.

- e) De to første eksiterte tilstandene i Na har elektronkonfigurasjon $1s^2 2s^2 2p^6 3p$ og kvantetallene L, S, J bestemmes igjen av kvantetallene for det siste elektronet, nå i en $3p$ tilstand. Dette gir $L = 1, S = 1/2$ og med to muligheter $J = 1/2, 3/2$.

- f) Energiforskjellen mellom tilstandene ${}^2P_{1/2}$ og ${}^2P_{3/2}$ skyldes spinn-bane leddet i Hamiltonfunksjonene

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + A \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

Med de kvantetallene som er angitt ovenfor gir dette energier

$$E_{3/2} = E(3p) + \frac{1}{2}A(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) = E(3p) + \frac{1}{2}A\hbar^2 \quad (9.83)$$

$$E_{1/2} = E(3p) + \frac{1}{2}A(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) = E(3p) - A\hbar^2 \quad (9.84)$$

$$(9.85)$$

I tillegg til kvantetallene L, S, J har tilstandene kvantetallet M_J med mulige verdier $M_J = -J, -J+1, \dots, +J$. Dette gir fire muligheter (degenerasjon) for $J = 3/2$ og to muligheter (degenerasjon) for $J = 1/2$. Alle disse tilstandene har samme energi så lenge systemet ikke er påvirket av et ytre magnetfelt.

g) Dipoloverganger i Na

$$^2P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2} \quad \lambda_1 = \frac{hc}{2,1044\text{eV}} \approx 5.9081 \cdot 10^{-7}\text{m} \quad (9.86)$$

$$^2P_{1/2} \rightarrow ^2S_{1/2} \quad \lambda_2 = \frac{hc}{2,1022\text{eV}} \approx 5.9019 \cdot 10^{-7}\text{m} \quad (9.87)$$

som gir et krav til en bølgelengde oppløsning på $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 \approx 0,6\text{nm}$

h)

$$^2S_{1/2} \quad L = 0 \quad S = 1/2 \quad J = 1/2 \quad \text{gir } g = 2 \quad (9.88)$$

$$^2P_{3/2} \quad L = 1 \quad S = 1/2 \quad J = 3/2 \quad \text{gir } g = 4/3 \quad (9.89)$$

$$^2P_{1/2} \quad L = 1 \quad S = 1/2 \quad J = 1/2 \quad \text{gir } g = 2/3 \quad (9.90)$$

i) Ved bruk av Landé's g-faktor for atomer i et ytre magnetfelt får vi et ekstra bidrag til energien (Hamiltonfunksjonen) på formen

$$\hat{H}_B = -\hat{\vec{M}} \cdot \vec{B} = \mu_B g \frac{1}{\hbar} \hat{\vec{J}} \cdot \vec{B} = \mu_B g B \frac{1}{\hbar} \hat{J}_z$$

Energibidraget for de tre tilstandene blir da

$$\langle \hat{H}_B \rangle = \mu_B B \begin{cases} 2M_j & ^2S_{1/2} \\ 2/3 M_j & ^2P_{1/2} \\ 4/3 M_j & ^2P_{3/2} \end{cases}$$

Oppgave 9.3

Det nøytrale karbon atomet har 6 elektroner i skall rundt kjernen.

- Angi elektronkonfigurasjonen for atomet når det er i grunntilstanden.
- Hvilke mulige verdier finnes for den totale orbitale dreieimpulsen L og det totale spinnet S ?
- Bruk Hunds regel til å bestemme S . Hvilke mulige verdier kan vi ha for L i grunntilstanden og hva gir dette i spektroskopisk notasjon.

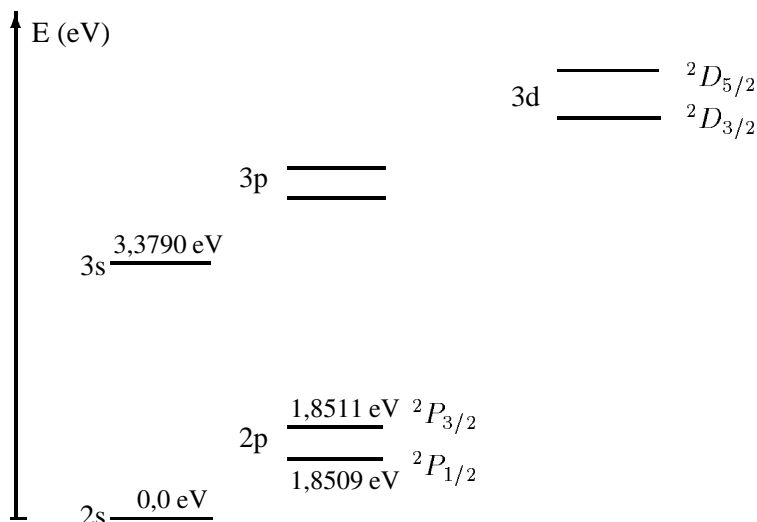
Oppgave 9.4

I det opprinnelige Stern-Gerlach eksperimentet ble en stråle av Ag-atomer sendt gjennom et inhomogent magnetfelt B som splittet den i to. Elektronkonfigurasjonen for sølv i grunntilstanden er $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s$.

- Hva er spinnkvantetallene L og S for dette atomet når det er i grunntilstanden?
- Hvis et elektron fra $4d$ -skallet eksiteres opp til $5p$ -skallet, hvilke muligheter kan nå kvantetallene L og S ta?
- Beregn det magnetiske momentet til et sølvatom i grunntilstanden uttrykt i enheten J/T .
- Hva blir energiforskjellen målt i eV mellom to atomer i hver sin splittede stråle hvis magnetfeltets størrelse er $B = 0,1\text{ T}$?
- Hvilke verdier kan z-komponenten av det magnetiske momentet for sølv atomet ta hvis $5s$ -elektronet eksiteres opp til $5p$ -orbitalen? Se her bort fra LS -koblingen.

Oppgave 9.5, Eksamen V-1992

Litium atomet har i grunntilstanden konfigurasjonen $1s^2 2s$. I denne oppgaven skal vi studere noen tilstander hvor valens elektronet er i en eksitert tilstand. Figur 9.11 viser energi nivåene for noen slike tilstander. Vi angir konfigurasjonen for valens elektronet, og for enkelte nivåer også termsymbolet. For $2p$ og $3s$ nivåene er eksitasjonsenergien over $2s$ nivået oppgitt i eV .



Figur 9.11: Energitilstander for Litium atomet.

- Forklar hva et termsymbol som $2D_{5/2}$ forteller om tilstandens kvantetall. Hvilken degenerasjonsgrad har energi nivået $2D_{5/2}$ (dvs. antall forskjellige tilstander med samme energi)? Angi også degenerasjonsgraden for $3s$ nivået.
- Gi en kort forklaring på hvorfor p og d nivåene er splittet i to, mens s nivåene ikke er splittet. Hvorfor har nivået $2P_{1/2}$ lavere energi enn $2P_{3/2}$?

Vi tenker oss nå at litium atomet er i en $3s$ tilstand, og at det deretter ikke er påvirket av omgivelsene.

- Gjør rede for de forskjellige elektriske dipol overganger som kan foregå før atomet er blitt stabilt. Hvilke utvalgsregler gjelder for slike prosesser.
- Beregn bølgelengdene til de utsendte fotonene i de elektriske dipol overgangene.

Kort fasit

- Termsymbolet er definert ved $2S+1L_J$ hvor L er kvantetallet for banespinnet, S kvantetallet for egenspinnet og J kvantetallet for totalspinnet – $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. For en gitt J har vi $2J + 1$ tilstander svarende til forskjellige verdier av kvantetallet M_J som alle har samme energi. For $2s$ nivået er $J = 1/2$. Dette gir en degenerasjonsgrad på 2.
- p nivåene har $S = 1/2$ og $L = 1$. Dette gir $J = 1/2, 3/2$. Spinn-bane koblingen gir $+a/2$ for $J = 3/2$ og $-a$ for $J = 1/2$. På tilsvarende måte får vi for d nivåene to tilstander med h.h.v. $J = 5/2, 3/2$. For s nivåene har vi $L = 0$ og vi får bare en tilstand med $J = S = 1/2$.

- c) og d) Utvalgsregler for elektriske dipol overganger er $\Delta L = \pm 1$, $\Delta M_l = 0, \pm 1$ og $\Delta S = 0$. Dette gir følgende overganger

1. $3s \longrightarrow {}^2P_{3/2}$ $\Delta E = 1,5279 \text{ eV}$ $\lambda_1 = 8,1147 \times 10^{-7} \text{ m}$
2. ${}^2P_{3/2} \longrightarrow 2s$ $\Delta E = 1,8511 \text{ eV}$ $\lambda_2 = 6,6979 \times 10^{-7} \text{ m}$
3. $3s \longrightarrow {}^2P_{1/2}$ $\Delta E = 1,5281 \text{ eV}$ $\lambda_3 = 8,1136 \times 10^{-7} \text{ m}$
4. ${}^2P_{1/2} \longrightarrow 2s$ $\Delta E = \frac{hc}{\lambda_4} = 1,8509 \text{ eV}$ $\lambda_4 = 6,6986 \times 10^{-7} \text{ m}$

Oppgave 9.6

I denne oppgaven skal vi se bort fra elektronets egenspinn. Energi egenverdligningen for et elektron i et hydrogenatom er da gitt ved

$$\hat{H}_0 \psi_{nlm_l} = -E_0 \frac{1}{n^2} \psi_{nlm_l},$$

hvor E_0 er en konstant.

- a) Sett opp Hamilton-operatoren \hat{H}_0 og skriv ned hvilke betingelser kvantetallene n , l og m_l må oppfylle.

Kvantetallet m_l tilfredsstiller egenverdi-ligningen

$$\left(\frac{d^2}{d\phi^2} + m_l^2 \right) \Phi(\phi) = 0.$$

- b) Finn $\Phi(\phi)$ (normering er unødvendig) og vis hvilke betingelser randkravene for Φ gir på m_l .

Bølgefunksjonen for s -tilstanden med $n = 2$ er gitt ved

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{\rho}{2} \right) \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right), \quad \rho = \frac{r}{a_0}$$

- c) Vis at bølgefunksjonen er normert. (Forslag: Bruk $\int_0^\infty \rho^k e^{-\rho} d\rho = k!$, hvor k er et heltall.) Finn middelveiden (forventningsverdien) for radien $\langle r_{2,0,0} \rangle$ og den radius som elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i. Forklar kort hvorfor det er forskjell i disse to radiene.

Anta at Hamilton-operatoren har et ekstra ledd gitt ved

$$\hat{H}_1 = \frac{E_0}{16\hbar^2} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2).$$

- d) Finn egenverdiene for $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$. Tegn alle energinivåene med $n = 1$ og 2 før og etter \hat{H}_1 leddet er innført. Hvilken degenerasjon har nivåene i de to tilfellene?

Løsning

- a) Det klassiske uttrykk for energien til et elektron i hydrogenatomet er gitt ved

$$\begin{aligned} H_{kl} &= \frac{1}{2} m v^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{r} \end{aligned}$$

hvor $k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$.

Overgang til kvantemekanikk gir

$$\begin{aligned}\vec{r} &\longrightarrow \hat{\vec{r}} = \vec{r} \\ \vec{p} &\longrightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}\end{aligned}$$

og den kvantemekaniske Hamilton operatoren (uten egenspinn) blir

$$\hat{\mathbf{H}}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \frac{k}{r} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} \right)^2 - \frac{k}{r}$$

Betingelsene for de tre kvantetallene n, l, m_l er

$$\begin{aligned}n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ m_l &= -l, -l+1, \dots, +l\end{aligned}$$

b) Løsningen av egenverdiligningen for $\Phi(\phi)$ blir

$$\Phi(\phi) = Ae^{im_l\phi}$$

Funksjonen må være étydig. Det krever at $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + \mu \cdot 2\pi)$. Dette betyr at m_l må være heltallig, $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$.

Normering bestemmer A til

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\phi)\Phi(\phi)d\phi = A^*A \int_0^{2\pi} d\phi = 1$$

som gir $A = \sqrt{1/2\pi}$.

c) Bølgefunksjonen er normert. Vi får

$$\begin{aligned}\frac{1}{8\pi a_0^3} \int_0^\infty \int_\Omega \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)^2 e^{-\rho} a_0^3 \rho^2 d\rho \sin\theta d\theta d\phi &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)^2 e^{-\rho} \rho^2 d\rho \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \left(\rho^2 - \rho^3 + \frac{1}{4}\rho^4\right) e^{-\rho} d\rho \\ &= \frac{1}{2} \left(2! - 3! + \frac{1}{4}4!\right) = 1\end{aligned}$$

Middelverdien

$$\begin{aligned}\langle r \rangle &= \int \psi_{200}^* r \psi_{200} d\vec{r} = \frac{1}{2a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)^2 e^{-\rho} a_0^4 \rho^3 d\rho \\ &= \frac{1}{2} a_0 \left(3! - 4! + \frac{1}{4}5!\right) = 6a_0\end{aligned}$$

Den radielle sannsynlighetstetthet er gitt ved

$$P(r) = \psi_{200}^* \psi_{200} \cdot 4\pi \rho^2 = \frac{1}{2a_0} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)^2 r^2 e^{-\rho} = \frac{1}{2a_0} \left(\rho^2 - \rho^3 + \frac{1}{4}\rho^4\right) e^{-\rho} \quad (9.91)$$

Maksimum/minimum's punktene er gitt ved

$$\begin{aligned}\frac{dP(\rho)}{d\rho} &= \frac{1}{2a_0^2} \left[(2\rho - 3\rho^2 + \rho^3) - \left(\rho^2 - \rho^3 + \frac{1}{4}\rho^4 \right) \right] e^{-\rho} \\ &= \rho \left(2 - 4\rho + 2\rho^2 - \frac{1}{4}\rho^3 \right) e^{-\rho} = 0\end{aligned}\quad (9.92)$$

Fra $P(\rho)$ i lign.(1) ser vi at $P(\rho) \geq 0$ for alle ρ . Den har to minimumspunkter $P(\rho = 0) = 0$ og $P(\rho = 2) = 0$. Betingelsen i lign.(2) kan da skrives på formen

$$\rho(\rho - 2)(a\rho^2 + b\rho + c) = 0$$

med verdiene $a = -1/4$, $b = 3/2$ og $c = -1$. Løsningene av 2.grads ligningen

$$\rho^2 - 6\rho + 4 = 0 \rightarrow \rho = 3 \pm \sqrt{5} = \begin{cases} 5.24 \\ 0.76 \end{cases}$$

og de fire løsningene gir

$$P(\rho = 0) = 0, \quad P(\rho = 0.76) = 0.052, \quad P(\rho = 2) = 0 \quad \text{og} \quad P(\rho = 5.24) = 0.19$$

De to maksimumspunktene svarer to de to Bohr radien $r_{1s} = 1 \cdot a_0$ og $r_{2s} = 4 \cdot a_0$.

d) Hamilton operatorene har nå formen

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \frac{E_0}{16\hbar^2} \left\{ \hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2 \right\} \\ &= \hat{H}_0 + \frac{E_0}{16\hbar^2} \left\{ \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_z^2 \right\}\end{aligned}$$

Funksjonene ψ_{nlm_l} er også egenfunksjoner for operatorene $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{\mathbf{L}}_z^2$.

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{nlm_l} &= l(l+1)\hbar^2 \psi_{nlm_l} \\ \hat{\mathbf{L}}_z \psi_{nlm_l} &= m_l \hbar \psi_{nlm_l}\end{aligned}$$

Dette gir

$$\left[\hat{H}_0 + \frac{E_0}{16\hbar^2} \left\{ \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_z^2 \right\} \right] \psi_{nlm_l} = -E_0 \left[\frac{1}{n^2} - \frac{l(l+1) - m_l^2}{16} \right] \psi_{nlm_l}$$

Oppgave 9.7

Vi skal i denne oppgave studere helium atomet.

a) Gi en kort formulering av Pauliprinsippet.

I den laveste energi egentilstanden (grunntilstanden) for He-atomet har begge elektronene kvantetallene $n = 1$, $l = 0$.

- b) Bruk Pauliprinsippet og forklar hvilke verdier vi har på L , S og J for grunntilstanden i He-atomet. Sett opp den spektroskopiske betegnelsen for grunntilstanden.

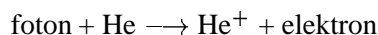
Grunntilstandsenergien for He-atomet er $E_g(\text{He}) = -78,98 \text{ eV}$ og for He^+ -ionet er energi egenverdiene gitt ved

$$E_n(\text{He}^+) = -\frac{54,44 \text{ eV}}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

Vi forutsetter at ved ionisering (ett elektron fjernes) av et He-atom etterlates He^+ -ionet i en egentilstand hvor kvantetallene n og l har de samme verdiene som er tilskrevet ett av elektronene i He-atomet.

En samling (gass) av He-atomer i grunntilstanden utsettes for elektromagnetisk stråling med frekvens ν . He-atomene forutsettes å være i ro. Ved bestrålingen vil et He-atom kunne absorbere et energikvant $h\nu$ og spaltes til et He^+ -ion og ett fritt elektron.

- c) Sett opp de ikke-relativistiske uttrykkene som følger av at energi og bevegelsesmengde bevares ved prosessen



I det følgende ser vi bort fra He^+ -ionets rekylbevegelsen.

- d) Hvilken verdi må ν minst ha om en skal få ionisasjon av He-atomet?

Den kinetiske energien E_k av de frigjorte elektronene kan måles og viser $E_k = 25,0 \text{ eV}$ når den elektromagnetiske stråling har en frekvens ν gitt ved $h\nu = 49,50 \text{ eV}$.

- e) Bestem ut fra dette grunntilstandsenergien for He-atomet.

He-atomene plasseres nå i et homogent og konstant magnetfelt \vec{B} .

- f) Vil magnetfeltet ha noen innflytelse på He-atomets energi i grunntilstanden? Begrunn svaret.

He-atomene utsettes så for elektromagnetisk stråling med frekvens ν gitt ved $h\nu = 49,50 \text{ eV}$. Den kinetiske energien av de frigjorte elektronene måles.

- g) Hva vil en forvente som resultat av en slik måling med hensyn til den kinetiske energi av de frigjorte elektronene? Begrunn svaret.

- h) Beregn elektronenes energi når magnetfeltet har verdi $|\vec{B}| = 0,1 \text{ T}$

Oppgave 9.8

Vi skal i denne oppgave først se på et 1-dimensjonalt kvantemekanisk problem. Bølgefunksjonen for grunntilstanden for en partikkel med masse m er gitt ved

$$\psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{1}{2}a^2x^2\right).$$

hvor A er en normaliseringskonstant.

- a) Sett opp energi egenverdiligningen for partikkelen og bestem den potensielle energien $V(x)$ som gir $\psi_0(x)$ som løsning for grunntilstanden. Finn grunntilstandsenergien E_0 .

b) Finn normaliseringskonstanten A .

c) Vis at

$$\psi_1(x) = \sqrt{2}ax\psi_0(x)$$

også er løsning av egenverdiligningen under a). Finn den tilsvarende energien E_1 .

d) Beregn $\langle \hat{x} \rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$, $\langle \hat{x}^2 \rangle$ og $\langle \hat{p}^2 \rangle$ for grunntilstanden $\psi_0(x)$.

e) Uskarpheten for en operator i kvantemekanikken er definert ved

$$\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}.$$

Bruk dette til å finne $\Delta x \cdot \Delta p$ for grunntilstanden $\psi_0(x)$. Kommentér resultatet.

Vi skal gå over til å studere problemet ovenfor i tre dimensjoner. Den potensielle energien $V(x)$ overføres til $V(r)$, i.e. samme funksjon, men nå avhengig av den radielle avstanden r .

f) Sett opp egenverdiligningen i det tre-dimensjonale tilfelle og vis at funksjonen

$$\Phi_{n,p,q}(x, y, z) = \psi_n(x)\psi_p(y)\psi_q(z),$$

er en løsning hvor $n, p, q = 0, 1, 2, \dots$. Angi degenerasjonen for grunntilstanden og den første eksiterte tilstanden.

g) Egenfunksjonene i det tre-dimensjonale tilfellet vil samtidig være egenfunksjoner for banespinn operatorene $\hat{\mathbf{L}}^2$ og \hat{L}_z . Finn verdier for kvantetallene l og m_l for operatorene $\hat{\mathbf{L}}^2$ og \hat{L}_z i grunntilstanden $\Phi_{0,0,0}$.

Løsning

a) Schrödingers egenverdiligning er

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi_0(x) = E\psi_0(x) \quad (9.93)$$

For $\psi_0(x)$ får vi

$$\frac{d}{dx}\psi_0(x) = (-a^2x)\psi_0(x), \quad \text{og} \quad \frac{d^2}{dx^2}\psi_0(x) = (-a^2 + a^4x^2)\psi_0(x)$$

Innsatt i lign (1) gir dette

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(-a^2 + a^4x^2) + V(x) \right) \psi_0(x) = E\psi_0(x)$$

For at venstre side skal være lik høyre side for alle x får vi betingelsene

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad \text{og} \quad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad \text{hvor} \quad \omega = \frac{\hbar a^2}{m}$$

b) Normaliseringen gir

$$|A|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2 x^2} dx = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \rightarrow A = \left(\frac{\pi}{a^2}\right)^{1/4}$$

c) For $\psi_1(x)$ får vi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi_1(x) &= \sqrt{2}a(1 - a^2 x^2) \psi_0(x) \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) &= (a^4 x^2 - 3a^2) \psi_1(x) \end{aligned}$$

Dette gir samme potensial som under a) og en energi egenverdi

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega = 3E_0$$

i overensstemmelse energiformelen $E_n = (n + 1) \hbar \omega$ for den harmoniske oscillator

d) Vi har følgende uttrykk

$$\langle x \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) x \psi_0(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 x dx = 0$$

som er null på grunn av minus paritet for integranden

Uttrykket for $\langle p \rangle_n$ blir

$$\langle p \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_0(x) dx = 0$$

igjen på grunn av minus paritet for integranden.

e) For å finne $\Delta x \cdot \Delta p$ må vi først beregne $\langle x^2 \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$.

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) x^2 \psi_0(x) dx = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-a^2 x^2) dx \\ &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} 2 \frac{1}{2a^3} \Gamma(3/2) = \frac{1}{2a^2} \\ \langle p^2 \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \psi_0(x) dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) (-a^2 + a^4 x^2) \psi_0(x) dx \\ &= \hbar^2 a^2 - \hbar^2 a^4 \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-a^2 x^2) dx \\ &= \hbar^2 a^2 - \hbar^2 a^4 \frac{1}{2a^2} = \frac{1}{2} \hbar^2 a^2 \end{aligned}$$

som gir

$$\Delta x_0 \Delta p_0 = \sqrt{\langle x^2 \rangle_0 \langle p^2 \rangle_0} = \sqrt{\frac{1}{2a^2} \frac{1}{2} \hbar^2 a^2} = \frac{1}{2} \hbar$$

Dette er i overensstemmelse med Heisenbergs uskarphets relasjon.

f) I det tre–dimensjonale tilfelle blir Schrödingers egenverdiligning for den harmoniske oscillator

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega (x^2 + y^2 + z^2) \right\} \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (9.94)$$

For $\psi(x, y, z) = \Phi_{n,p,q}(x, y, z)$ får vi løsningen med egenverdi

$$E_{n,p,q} = \left(\frac{3}{2} + n + p + q \right) \hbar \omega$$

For grunntilstanden og den første eksiterte tilstand får vi

$$\begin{array}{ll} \text{Grunntilstand :} & n = 0, p = 0, q = 0 \quad E_{npq} = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad \text{degenerasjon} = 1 \\ \text{1. eksiterte tilstand :} & \begin{cases} n = 1, p = 0, q = 0 \\ n = 0, p = 1, q = 0 \\ n = 0, p = 0, q = 1 \end{cases} \quad E_{npq} = \frac{5}{2} \hbar \omega \quad \text{degenerasjon} = 3 \end{array}$$

g) Egenverdiligningene for operatorene $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{\mathbf{L}}_z$ blir i dette tilfelle

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 \Phi(x, y, z) &= \hat{\mathbf{L}}^2 \Phi(r) = 0 \\ \hat{\mathbf{L}}_z \Phi(x, y, z) &= \hat{\mathbf{L}}_z \Phi(r) = 0 \end{aligned}$$

og kvantetallene blir $l = 0$, $m_l = 0$ siden funksjonen kun avhenger av koordinaten r , mens begge operatorene bare inneholder derivasjon med hensyn på koordinatene θ , ϕ .

Oppgave 9.9

En partikkel med masse m beveger seg i et tre–dimensjonalt harmonisk oscillator potensial med potensiell energi $V(r) = (1/2)kr^2$, hvor k er en konstant. Dette systemet skal vi først studere ved bruk av Bohrs atomteori

- a) Sett opp Bohrs kvantiserings betingelse og bruk den til å beregne energien og r^2 for alle tillatte sirkulære baner for partikkelen.

Vi skal deretter studere det samme problem ved bruk av Schrödingers kvantemekanikk.

- b) Sett opp systemets Hamilton operator og vis at

$$\psi(\vec{r}) = N \exp(-\alpha r^2)$$

er en egentilstand for systemet for en bestemt verdi av α og finn energi egenverdien.

- c) Beregn $\langle \hat{\mathbf{r}}^2 \rangle$ for systemet i tilstanden $\psi(\vec{r})$ og sammenlign resultatet med punkt a).

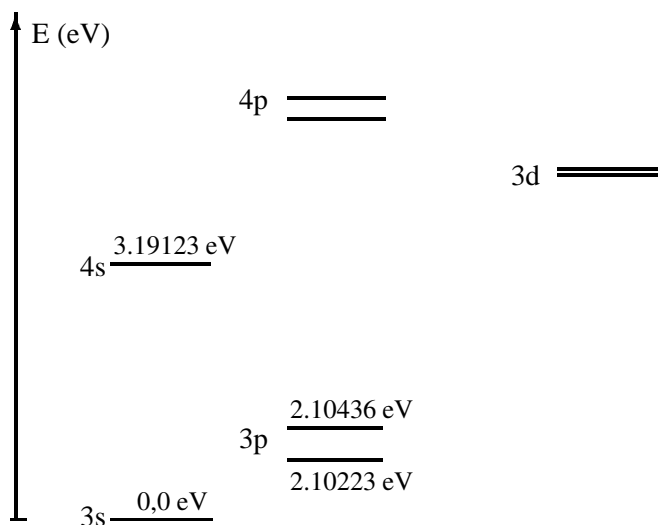
Oppgave 9.10, Eksamen H-1996

I den enkle skallmodellen (sentralfelt modellen) for fler-elektron atomer plasseres elektronene i tilstander som har de samme kvantetallene som energi egentilstandene for Hydrogen atomet:

$$1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \dots$$

- Hvor mange elektroner kan det plasseres i hver av tilstandene $nl = 1s; 2s, 2p; 3s, 3p$ og $3d$? Et hovedskall karakteriseres ved kvantetallet n . Finn hvor mange elektroner kan plasseres i et hovedskall som funksjon av kvantetallet n . Formulér det prinsipp som bestemmer hvor mange elektroner det kan være i hver tilstand.
- Natrium (Na) atomet har 11 elektroner. Bruk den enkle skallmodellen for elektronene ti å bestemme elektronenes grunntilstandskonfigurasjon. Grunntilstanden karakteriseres også ved kvantetallene L, S, J satt sammen i termsymbolet $^{2S+1}L_J$. Forklar hva kvantetallene betyr og finn termsymbolet for grunntilstanden.

I resten av denne oppgaven skal vi studere noen tilstander hvor det siste (valens) elektronet i Na er i en eksitert tilstand. I figur 9.12 er det vist energi nivåene for noen slike tilstander. For $3p$ og $4s$ nivåene er eksitasjonsenergien over $3s$ nivået oppgitt i eV.



Figur 9.12: Energitilstander for Na atomet.

- Gi en kort forklaring på hvorfor p og d nivåene er splittet i to, mens s nivåene ikke er splittet.
- Finn termsymbolet og beregn degenerasjonsgraden for hver av de eksiterte tilstandene.

Vi tenker oss nå at Na atomet har valens elektronet i en $4s$ tilstand, og at det deretter ikke er påvirket av omgivelsene.

- Gjør rede for de forskjellige elektriske dipol overganger som kan foregå før atomet er blitt stabilt. Hvilke utvalsregler gjelder for slike prosesser?
- Beregn bølglengdene til de utsendte fotonene i de elektriske dipol overgangene.

Kort fasit

- a) Den generelle formel for antall tilstander er $N(n, l) = 2n^2$
 Pauliprinsippet: Bølgefunksjonen for N elektroner må være antisymmetrisk ved ombytning av to vilkårlige elektroner.
 Pauliprinsippet i den enkle skallmodell: Ingen elektroner kan ha samme sett kvantetall.
- b) Grunntilstanden for Na er: $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. Kvantetallet L er det totale banespinn, S det totale egenspinnt og J det totale spinn for systemet. For Na er $L = 0$, $S = J = 1/2$ som gir termsymbolet $^2S_{1/2}$.
- c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 8.9, Oppsplittingen skyldes spinn–bane kobling.
- d) Tilstanden $3s$ har termsymbol $^2S_{1/2}$ med degenerasjonsgrad = 2.
 Tilstanden $3p(2.10223 \text{ eV})$ har termsymbol $^2P_{1/2}$ med degenerasjonsgrad = 2.
 Tilstanden $3p(2.10436 \text{ eV})$ har termsymbol $^2P_{3/2}$ med degenerasjonsgrad = 4.
 Tilstanden $4s$ har termsymbol $^2S_{1/2}$ med degenerasjonsgrad = 2.
 Tilstanden $3d(\text{laveste tilstand})$ har termsymbol $^2D_{3/2}$ med degenerasjonsgrad = 4.
 Tilstanden $3d(\text{høyeste tilstand})$ har termsymbol $^2D_{5/2}$ med degenerasjonsgrad = 6.
 Tilstanden $4p(\text{laveste tilstand})$ har termsymbol $^2P_{1/2}$ med degenerasjonsgrad = 2.
 Tilstanden $4p(\text{høyeste tilstand})$ har termsymbol $^2P_{3/2}$ med degenerasjonsgrad = 4.
- e) Utvalgsregler for dipoloverganger: Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 7.5 Dette gir

$$4s_{1/2} \rightarrow 3p_{3/2} \rightarrow 3s_{1/2} \quad \text{og} \quad 4s_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$$

- f) $4s_{1/2} \rightarrow 3p_{3/2}(2.10436 \text{ eV})$ gir $\lambda = 1140.9 \text{ nm}$
 $4s_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2}(2.10223 \text{ eV})$ gir $\lambda = 1138,7 \text{ nm}$
 $3p_{3/2}(2.10436 \text{ eV}) \rightarrow 3s_{1/2}$ gir $\lambda = 589,2 \text{ nm}$
 $3p_{1/2}(2.10223 \text{ eV}) \rightarrow 3s_{1/2}$ gir $\lambda = 589,8 \text{ nm}$

Oppgave 9.11, Eksamen H-1994

Vi skal i denne oppgaven studere en partikkel med masse m i tre–dimensjonal bevegelse. Oppgaven vil kreve bruk av ∇^2 som i polarkoordinater kan skrives på formen

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

Vi antar først at partikkelen er fri, ingen potensiell energi.

- a) Vis at $\psi = (N/r) \sin(kr)$ er en energi egenfunksjon, og finn energien E . N og k er konstanter.
- b) Forklar hvorfor ψ er en s–tilstand, det vil si at banespinn $L = 0$ (om origo).

- c) Vis at det ikke finnes andre akseptable energi egenfunksjoner med $L = 0$ enn de som er definert i punkt a) med vilkårlig, reelle verdier på konstanten k .

Vi antar nå at partikkelens potensielle energi $V(r)$ er en ren funksjon av r definert ved

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0, \\ \infty & r > r_0. \end{cases}$$

- d) Finn nå partikkelens energi egentilstander med $L = 0$. Beregn normaliseringskonstanten.

I det følgende skal vi begrense oss til $L = 0$ tilstander. Systemet vi skal studere består nå av to nøytroner i tre-dimensjonal bevegelse og med potensiell energi $V(r)$ som angitt ovenfor. Vi antar ingen ekstra vekselvirkning mellom nøytronene.

- e) Finn de to laveste to-partikkel energi egentilstandene og beregn energi egenverdien. Finn det totale egenspinn S for de to tilstandene.

Vi innfører nå en ekstra vekselvirkning mellom de to nøytronene gitt ved $V_S = a\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$, hvor \hat{S}_1 og \hat{S}_2 er operatorene for nøytronenes egenspinn og a en positiv konstant.

- f) Finn endringen i energi egenverdiene som denne vekselvirkningen gir for de to laveste energi egentilstandene funnet under punkt e).

9.9.2 Numeriske oppgaver

Prosjektoppgave FY102 V-2003

I denne oppgaven skal vi studere en enkel modell for litium-atomet. Vi får bruk for den radielle Schrödingerlikningen, og kjennskap til den analytiske løsningen for hydrogen-atomet er også en fordel. Dere vil også trenge resultater fra oblig 9, oppgave 2 (spesielt den frivillige delen). Løsningen til den oppgaven finner dere på kursets nettsted.

Oppgaven er mer en modifisert hydrogenatom-problemstilling enn et mangepartikkelproblem slik en uavhengig partikkel-modell for litium ville være. Vi skal basere oss på sentralfeltmodellen (uavhengig partikkel modell) for atomer.

Oppgave 1, En enkel modell for litium-atomet

I den enkle skallmodellen for fler-elektron atomer plasseres elektronene i tilstander som har de samme kvantetallene som energi egentilstandene for H-atomet:

$$1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \dots; nl = n0, nl = n1, \dots, nl = n, n - 1.$$

- 1a) Hvor mange elektroner kan det plasseres i hver av tilstandene $1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \dots; nl = n0, \dots, nl = n, n - 1$? Formulér det prinsippet som bestemmer hvor mange elektroner det kan være i hver tilstand. Forklar kort bakgrunnen for sentralfeltmodellen i atomfysikk.

I H-atomet har tilstandene $nl = n0, nl = n1 \dots, nl = n, n - 1$ alle samme energi. De er degenererte. I et fler-elektron atom, er dette ikke lenger tilfelle.

- 1b) Diskutér årsaken til dette.

Li-atomet har 3 elektroner. Grunntilstanden er gitt ved symbolet ${}^2S_{1/2}$.

1c) Begrunn at verdiene av grunntilstandens spinn kvantetall er bestemt av valenselektronets kvantetall.

De to laveste eksiterte tilstandene i Li-atomet er $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$. Tilstandene $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$ ligger henholdsvis 1.8509 eV og 1,8511 eV over grunntilstanden.

1d) Angi hvordan spinn kvantetallene for disse tilstandene bestemmes av valenselektronets kvantetall. Diskut  kort og kvalitativt  rsaken til energiforskjellen mellom tilstandene $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$. Hvor stor er degenerasjonsgraden for hvert av niv ene og hva er  rsakene til denne degenerasjonen?

Litium-atomet har tre elektroner i bane rundt en kjerne med ladning tre. Vi skal i resten av oppgaven fors ke   bestemme de to laveste energiniv ene til valenselektronet, og vi skal se at vi har brutt degenerasjon mhp. spinn l . Vi antar derfor at de to innerste elektronene befinner seg i hydrogenliknende orbitaler i $1s$ -tilstanden. Dette vil gi opphav til en ladningstetthet $\rho(r)$ i en avstand r fra kjernen gitt ved

$$\rho(r) = -\frac{e}{4\pi} \alpha^3 \exp(-\alpha r), \quad (9.95)$$

der $\alpha \approx 5.38 a_0^{-1}$ og a_0 er Bohrradien.

1e) Vis at ladningstettheten representerer en total ladning p  to elektroner, det vil si at

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho(r) d\tau = -2e.$$

1f) Fra elektromagnetismen har vi Gauss' lov som kan skrives p  differensialform, og med relasjonen $\vec{E} = -\nabla\phi$, der ϕ er det elektriske potensialet, f r vi:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (9.96)$$

Denne relasjonen kalles ogs  Poissons likning.

Vis at det elektriske potensialet

$$\phi(r) = -\frac{2ke}{r} \left[1 - \left(1 + \frac{\alpha r}{2} \right) \exp(-\alpha r) \right] \quad (9.97)$$

tilfredsstiller Poissons likning for ladningstettheten (9.95) for $1s$ -elektronene. Merk at $k = 1/4\pi\epsilon_0$.

Finn den totale potensielle energien for litium-atomet, der posisjonen r til valenselektronet er den eneste frihetsgraden. Fremstill denne grafisk sammen med den asymptotiske oppf rselen for sm  r og for store r . Tolk dette i lys av sentralfelt-modellen for atomer.

Oppgave 2, Schr dingers likning p  dimensjonsl s form

Vi vil ogs  i denne oppgaven skrive om Schr dingers likning p  dimensjonsl s form slik at den egner seg bedre for numerisk analyse. Vi starter med   sette $s = r/a$, der a er en konstant med dimensjon lengde, slik at s blir uten dimensjon.

2a) Skriv ned hamiltonoperatoren \hat{H} for valenselektronet og den tidsuavhengige radielle Schr dingerlikningen med hensyn p  $u(r) = rR(r)$.

2b) Vis at vi nå kan skrive den tidsuavhengige Schrödingerlikningen på denne måten:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s^2} u(s) - \frac{3mke^2a}{\hbar^2 s} u(s) - \frac{mea^2}{\hbar^2} \phi(s) u(s) + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{s^2} u(s) = \frac{ma^2}{\hbar^2} E u(s) \quad (9.98)$$

Vi vet nå at alle leddene i likningen må ha samme dimensjon for at uttrykket skal gi mening, nemlig dimensjonen til $u(s)$. (Denne kan du prøve å finne på egenhånd.) Da må spesielt koeffisienten foran det andre leddet være dimensjonsløs. Vi kan nå bestemme en gunstig verdi for a ved hjelp av:

$$\frac{mke^2a}{\hbar^2} = 1. \quad (9.99)$$

2c) Hva kjenner du igjen konstanten a som? Sett inn uttrykket for $\phi(s)$ og skriv ut hele likningen. Bruk også at konstanten $\alpha = 5.38$ bohrdier $^{-1}$. Definér også $E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \tilde{E}$. Hva kjenner du faktoren foran \tilde{E} som?

Oppgave 3, Numerisk løsning av den radielle Schrödingers likning

Det som er nytt i den numeriske løsningen av SL i forhold til tidligere oppgaver, er at vi ikke har noen energi-egenverdier gitt. Vi vil bruke en variant av *todelings-metoden* (eller intervallhalveringsmetoden) for løsning av likninger numerisk. Hvis vi kan finne et intervall $[a, b]$ der vi vet egenverdien vil ligge, kan vi teste med $\tilde{E} = c = (a + b)/2$ og oppnå et nytt intervall, enten $[a, c]$ eller $[c, b]$, der den løsningen vil ligge. Ved å gjenta prosessen N ganger, vil vi ha et intervall med lengde $(b-a)/2^N$ der vi vet egenverdien ligger, og det er klart at det skal ikke mange todelinger til før vi har ganske god presisjon på egenverdien. Vi nevner også her muligheten for å konstruere Maple-funksjoner som returnerer for eksempel et `dsolve`-funksjonskall. Dette kan være svært nyttig å forenkle prosessen med å repetere den numeriske løsningen betraktelig. Her er et vilkårlig eksempel:

```
NumeriskLøsning := (a, b) -> dsolve({diff(f(x), x$2) = a*f(x), f(0)=1,
                                     D(f)(0)=b}, f(x), numeric );
```

Her får vi en ny numerisk løsning som vi kan sende til `odeplot` for hver a og b vi setter inn:

```
odeplot(NumeriskLøsning(2.0, -0.5), [x, f(x)], -5..5);
```

3a) Løs den radielle SL for $2s$ - og $2p$ -tilstandene for valenselektronet, og finn de tilhørende energi-egenverdiene \tilde{E} ved hjelp av *todelings-metoden*. her bør du lage en egen funksjon som gjør dette. Velg integrasjonsvariabel $s \in [0 : 20a_0]$ når du integrer opp difflikningene. Beregn de tilsvarende verdiene E_{2s} og E_{2p} . Hvordan stemmer dine verdier med de eksperimentelle verdiene $E_{2s} = -5,392$ eV og $E_{2p} = -3,552$ eV? Den siste verdien er uten spinn-bane vekselvirkningen.

Husk at for små s er $u(s) \sim s^{l+1}$. Den modifiserte bølgefunksjonen for $2s$ -orbitalen $u(r)$ må ha n node i tillegg til $u(0) = 0$; hvorfor det?

3b) Finn eksitasjonsenergien mellom de to tilstandene til valenselektronet. Sammenlikn med verdiene oppgitt i oppgave 1, og kommentér resultatet.

Prosjektoppgave FYS2140 V-2004

I denne prosjektoppgaven skal vi studere energi egentilstandene i Helium atomet. I motsetning til Hydrogen kan Schrödingers egenverdiligning for Helium ikke løses eksakt, og vi må finne approksimative metoder.

Vi vil begrense oss til å studere de tre laveste energi egentilstandene. De eksperimentelle energiene til de tre laveste tilstandene er funnet til å være

$$E(0) = -78,98 \text{ eV}, \quad E(1) = -59,09 \text{ eV}, \quad E(2) = -58,37 \text{ eV},$$

I modellberegningen vår antar vi ren Coulomb vekselvirkning mellom atomets kjerne, de to elektronene og elektronene imellom. Vi ser også bort fra rekylenergien til kjernen som vi antar ligger i ro. Bølgefunksjonene skal omfatte både rom- og spinn-del og tilfredsstille Pauliprinsippet.

- Vi starter med det enklere atomet He^+ med ett elektron i tillegg til en He-kjerne. Sett opp Schrödingers egenverdiligning for dette systemet. Omform ligningen slik at den kan løses numerisk. Bruk Matlab. Lag en m-funksjon og beregn og plot funksjonene $\Psi_{1s}(\vec{r})$ og $\Psi_{2s}(\vec{r})$.
- Modellen i a) utvides til å beskrive det nøytrale He atomet ved å inkludere elektron nr.2. Vi ser fremdeles bort fra Coulombfrastøtningen elektronene imellom. På dette grunnlag konstruér de formelle uttrykkene til de totale egenfunksjonene for systemets tre laveste tilstander. Bruk symbolene $\Psi_{1s}(\vec{r})$ og $\Psi_{2s}(\vec{r})$. Bestem energien i denne forenklede modellen og kvantetallene L , S og J . Hva blir de spektroskopiske faktorene for disse tre tilstandene? Husk at både rom- og spinn-funksjonene skal være med, og de skal tilfredsstille Pauliprinsippet.
- Vi skal nå forbedre modellen i b). Som et første skritt beregner vi energikorreksjonen

$$\Delta E = \int (\Psi_{1s}(1, 2))^* \frac{ke^2}{r_{12}} \Psi_{1s}(1, 2) d\tau \quad (9.100)$$

hvor $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$ og $r_{12} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}$. Det nye bidraget gir et 6-dimensjonalt integral, angitt ved volumelementet $d\tau$. Det kan løses. Nedenfor i avsnittet Hjelpemidler angir vi en formel, lign (6) for å hjelpe dere på vei. Vi har her integrert over koordinaten \vec{r}_2 . Da gjenstår integrasjon over \vec{r}_1 . For å tilpasse lign (6) til problemet, må dere sette parametrene $s = 0$, $Z = 2$

Finn den nye energien for grunntilstanden og sammenlign med resultatet i b).

Resultatet i c) er fremdeles langt fra den eksperimentelle energien for grunntilstanden. Et neste skritt kan da være følgende: Vi modifiserer vekselvirkningen mellom elektronene og atomkjernen ved å innføre en effektiv elektronladning (*screening*) i vekselvirkningen mellom elektronene og kjernen. $e_{eff} = (2 - s)e$ hvor s er en parameter. Den totale potensielle energien kan da skrives på formen

$$V = V_1 + V_2 \quad (9.101)$$

hvor

$$\begin{aligned} V_1 &= -\frac{(2-s)e^2k}{r_1} - \frac{(2-s)e^2k}{r_2} \\ V_2 &= \frac{ke^2}{r_{12}} - \frac{ske^2}{r_1} - \frac{ske^2}{r_2} \end{aligned} \quad (9.102)$$

hvor igjen $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$ og $r_{12} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}$

- Vi ser i første omgang bort fra vekselvirkningen V_2 . Da kan energien for de tre tilstandene uttrykkes som en funksjon av s , dvs. $E_\nu^0(s)$. Finn $E_\nu^0(s)$ og den tilsvarende funksjonen på analytisk form. $\Psi_{1s}(\vec{r})$ og $\Psi_{2s}(\vec{r})$, som nå er avhengige av parameteren s . Tips: Se Hjelpemidler og tenk gjennom hvilken verdi ladningsparameteren skal ha i dette tilfelle.

e) Så inkluderes vekselvirkningen V_2 , og vi beregner bidraget fra formelen

$$E_\nu^1(s) = E_\nu^0(s) + \int \left(\Psi_\nu^{(c)}(1, 2) \right)^* V_2 \Psi_\nu^{(c)}(1, 2) d\tau \quad (9.103)$$

hvor $E_\nu^0(s)$ er energien funnet i d) og $\Psi_\nu^{(c)}(1, 2)$ de tilsvarende egenfunksjonene. Det nye bidraget gir igjen et 6-dimensjonalt integral, angitt ved volumelementet $d\tau$. Det kan løses. Nedenfor i avsnittet Hjelpemidler angir vi formlene, lign (6 -8) hvor vi har integrert over koordinaten \vec{r}_2 . og integrasjon over \vec{r}_1 gjenstår. I dette tilfelle må vi beholde parameteren s og sette $Z = 2 - s$

Beregn formelen for energiene $E_\nu^1(s)$ for alle tre tilstandene som en funksjon av s . Plot (Matlab) grunntilstandsenergien $E_0^1(s)$ og finn den verdien av s som gir lavest verdi på $E_0^1(s)$.

Bruk denne verdien av s og finn energiene til de to eksiterte tilstandene. Kommentér resultatet i lys av de tidligere beregningene.

f) Én-partikkel bølgefunksjonene $\Psi_{1s}(\vec{r})$ og $\Psi_{2s}(\vec{r})$ er avhengige av den effektive ladningsparameteren s . Lag et plot som viser forskjellen mellom funksjonene og de tilsvarende sannsynlighetsfordelingene for resultatet i a) og med det tilsvarende resultat fra e) hvor verdien av s som ble funnet. Kan forskjellen forklares fysisk?

Hjelpemidler til FYS2140 prosjekt V-2004

Oppgaven ovenfor omfatter to Hydrogen type μ partikkel bølgefunksjoner

$$\begin{aligned} \Psi_{1s}(\vec{r}) &= \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-(Z/a_0)r) \\ \Psi_{2s}(\vec{r}) &= \frac{(Z/a_0)^{3/2}}{4\sqrt{2\pi}} (2 - Zr/a_0) \exp(-Zr/(2a_0)) \end{aligned} \quad (9.104)$$

hvor Z er en ladnings parameter og a_0 er Bohr-radien. Følgende integraler vil hjelpe på beregningen.

$$\begin{aligned} \int \Psi_{1s}(r_1) \Psi_{1s}(r_2) \frac{V_2}{ke^2} \Psi_{1s}(r_1) \Psi_{1s}(r_2) d^3 r_2 &= \int \Psi_{1s}(r_1)^2 \frac{V_2}{ke^2} (\Psi_{1s}(r_2))^2 d^3 r_2 \\ &= (\Psi_{1s}(r_1))^2 \frac{1}{r_1} \left(1 - s - s \frac{Z}{a_0} r_1 - \exp(-\frac{2Z}{a_0} r_1) - \frac{Z}{a_0} r_1 \exp(-\frac{2Z}{a_0} r_1) \right) \end{aligned} \quad (9.105)$$

$$\begin{aligned} \int \Psi_{1s}(r_1) \Psi_{2s}(r_2) \frac{V_2}{ke^2} \Psi_{1s}(r_1) \Psi_{2s}(r_2) d^3 r_2 &= \int (\Psi_{1s}(r_1))^2 \frac{V_2}{ke^2} (\Psi_{2s}(r_2))^2 d^3 r_2 \\ &= \frac{(\Psi_{1s}(r_1))^2}{32} \frac{1}{r_1} \left(1 - s - \frac{3}{2} s \frac{Z}{a_0} r_1 - \exp(-\frac{2Zr_1}{a_0}) - \frac{1}{2} \frac{Z}{a_0} r_1 \exp(-\frac{2Zr_1}{a_0}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{Z^2}{a_0^2} r_1^2 \exp(-\frac{2Zr_1}{a_0}) - \frac{Z^3}{a_0^3} r_1^3 \exp(-\frac{2Zr_1}{a_0}) \right) \end{aligned} \quad (9.106)$$

$$\begin{aligned} \int \Psi_{1s}(r_1) \Psi_{2s}(r_2) \frac{V_2}{ke^2} \Psi_{1s}(r_2) \Psi_{2s}(r_1) d^3 r_2 &= \int \Psi_{1s}(r_1) \Psi_{2s}(r_1) \frac{V_2}{ke^2} \Psi_{1s}(r_2) \Psi_{2s}(r_2) d^3 r_2 \\ &= \frac{1}{64\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \frac{1}{r_1} \left[\left(-3s \frac{Z}{a_0} r_1 + 2s \frac{Z^2}{a_0^2} r_1^2 - 2s - \frac{Z}{a_0} r_1 + 2 \right) \exp(-\frac{2Zr_1}{a_0}) \right. \\ &\quad \left. + \left(-2 + \frac{Z}{a_0} r_1 + 4 \frac{Z^2}{a_0^2} r_1^2 - 2 \frac{Z^3}{a_0^3} r_1^3 \right) \exp(-\frac{4Zr_1}{a_0}) \right] \end{aligned} \quad (9.107)$$

Til slutt et nyttig integral

$$\int_0^\infty x^n \exp(-x\alpha) dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \quad (9.108)$$

Kapittel 10

MOLEKYLER

10.1 Introduksjon

I vår diskusjon av molekyler skal vi i all hovedsak se på to atomer som danner et molekyl, som f.eks. koksalt, NaCl. Bindings mekanismen mellom atomer i dannelsen av et molekyl skyldes i all hovedsak elektrostatiske krefter mellom atomene (eller ionene).

Når to atomer er langt borte fra hverandre er kreftene som virker mellom dem tilnærma lik null. Bringes atomene nærmere kan en ha enten tiltrekkende krefter eller frastøtende krefter, slik at den potensielle energien mellom atomene kan være positiv eller negativ, helt avhengig av avstanden R mellom atomene. Den potensielle energien mellom atomene kan approksimeres med

$$V(R) = -\frac{A}{R^m} - \frac{B}{R^n}, \quad (10.1)$$

hvor m, n er heltall og A, B konstanter med dimensjon energi-lengde, dvs. med enhet eVnm. Konstantene A, B og heltallene m, n må bestemmes for hvert molekyl utifra kravet om at vi ønsker å reprodusere f.eks. bindingsenergi, spektra osv. Det er altså et eksempel på en parametrisert vekselvirkning, og ikke en fundamental vekselvirkning slik som Coulomb vekselvirkninger er.

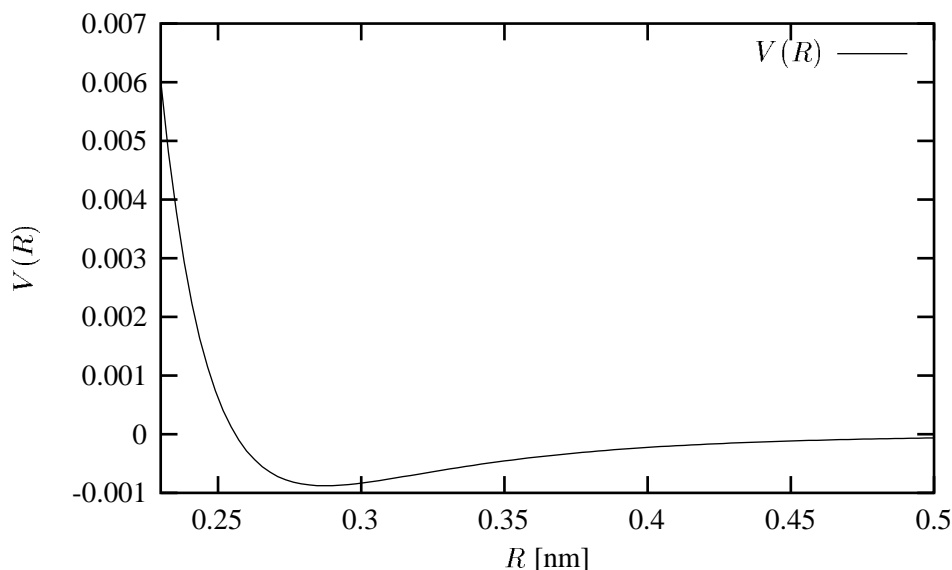
Et velkjent potensial fra litteraturen er det såkalla Lennard-Jones potensialet gitt ved

$$V_{LJ}(R) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right\}, \quad (10.2)$$

hvor ϵ og σ er parametre som bestemmes ved å tilpasse egenskaper til ulike molekyler. For vekselvirkningen mellom He-atomer er $\epsilon = 8.79 \times 10^{-4}$ eV og $\sigma = 0.256$ nm. Figur 10.1 viser en skisse av dette potensialet for disse parametrene. De kvalitative egenskapene i denne figuren gjelder for alle molekyler. Potensialet er både frastøtende og tiltrekkende og vi merker oss at det utviser et minimum for en bestemt verdi R , som vi skal kalle r_0 . Dette minimum definerer grunntilstanden (størst bindingsenergi) for molekylet og avstanden r_0 er da likevektsavstanden mellom atomene når molekylet er i sin grunntilstand. Grunnen til at vi har frastøting ved små verdier av R skyldes like ladninger som frastøter hverandre samt Pauli prinsippet, partikler med halvtallig spinn kan ikke ha samme sett kvantetall.

Typisk for molekyler er at dissosiasjonsenergien¹, energien som trengs for å separere et molekyl i dets enkeltatomer, er mindre enn bindingsenergien for atomene som inngår. For å ta eksemplet som vi skal

¹Vi kommer til å veksle mellom å bruke ordet bindingsenergi og dissosiasjonsenergi. Men når vi bruker bindingsenergi i molekylsammenheng så tenker vi altå på den energien som er nødvendig for å binde to atomer sammen. Denne energien er selvsagt forskjellig fra bindingsenergien til det enkelte atom.



Figur 10.1: Plot av potensialet i likning (10.2) for Van der Waals vekselvirkning mellom He-atomer. Likevektsposisjonen $r_0 = 0.287$ nm.

diskutere i avsnitt 10.3, så er dissosiasjonsenergien for H_2^+ molekylet som består av to protoner og et elektron gitt ved $E_B = -2.8$ eV. Ser vi tilbake på hydrogenatomet, så er bindingsenergien gitt ved $E_B = E_0 = -13.6$ eV.

Likevektsavstanden er også større enn den typiske størrelsen til hydrogenatomet. Vi husker tilbake fra kapittel 7 at midlere radius for hydrogenatomet er ca. en Bohrradius, dvs. 0.0529 nm. Avstanden mellom de to protonene i H_2^+ molekylet er $r_0 = 0.106$ nm.

I vår diskusjon om binding, skal vi i all hovedsak se på ionisk og kovalent binding. Ionebinding er en av de mest vanlige bindingsformer, med koksalt som det klassiske eksemplet. For NaCl er dissosiasjonsenergien 4.2 eV. Likevektsavstanden $r_0 = 0.24$ nm. Andre typer binding er såkalla kovalent binding² med H_2^+ , H_2 , CO, H_2O , CO_2 og CH_4 molekylene som velkjente eksempler. Hydrogen-binding og Van der Waals binding³ er andre eksempler.

I dette kapittelet skal vi se på egenskaper ved molekyler som er ulike fra det vi har sett ved atomer. I tillegg til et eksitasjonsspekter som skyldes elektrostatiske krefter, har vi en tilleggsfinstruktur som har opphav i rotasjons og vibrasjons bidrag til energien. Det skal vi se på i neste avsnitt.

Vi avslutter med en diskusjon av H_2^+ og H_2 molekylene og kovalent binding.

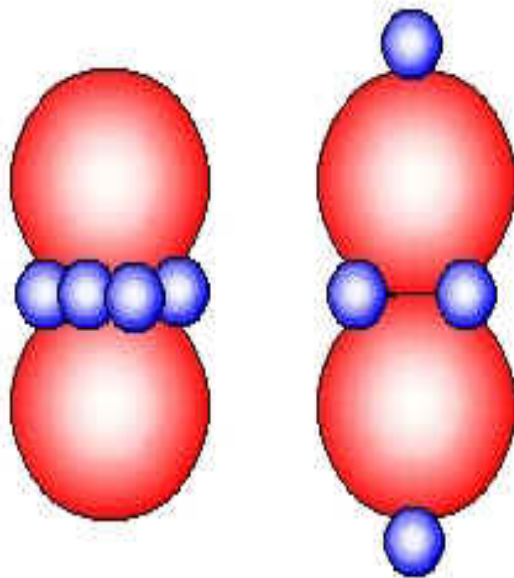
10.2 Rotasjon og vibrasjon

Vi skal begrense oss til to-atomige molekyler. Energien til et slikt system kan beskrives ved

$$E = E_{\text{atom}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}} = \text{konstant} + E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}}, \quad (10.3)$$

²Avsnitt 10.2 i boka.

³Avsnitt 10.4 i boka.



Figur 10.2: Et mer eksotisk eksempel utgjør disse to mulige tilstandene for en berylliumkjerne, som i dette tilfelle består av 12 partikler, 4 protoner og 8 nøytroner. Vi kan anta den settes sammen av to α -partikler (2 protoner og to nøytroner) samt fire ekstra nøytroner. For mer informasjon, se Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 1383.

siden vi er interessert i bidragene fra rotasjon og vibrasjon⁴. Disse er mye mindre enn den atomære delen E_{atom} , som igjen har sitt opphav i Coulomb vekselvirkningen mellom elektroner og mellom elektroner og kjernen.

Dersom dere tenker tilbake til hydrogenatomet eller andre atomer i det periodiske systemet, så har vi at det er flere elektronvolt i forskjell mellom f.eks. grunntilstanden til hydrogenatomet og dets første eksiterte tilstand. Bidraget fra rotasjonsdelen er typisk på størrelsesorden med 10^{-4} eV, mens vibrasjonsbidraget er på størrelse med 0.1 – 1 eV. Vi kan da tenke oss at i tillegg til det vanlige eksitasjonsspekteret som skyldes Coulombvekselvirkningen mellom molekylets ulike bestandeler, så har vi også en finstruktur i energien som skyldes rotasjon og vibrasjon. Det er disse to frihetsgradene som bla. skiller et atom fra et molekyl.

I dette avsnittet skal vi se bort ifra det atomære bidraget til energien og kun se på finstrukturen som skyldes rotasjon og vibrasjon. Til slutt skal vi diskutere molekylspekteret en får pga. rotasjon og vibrasjon.

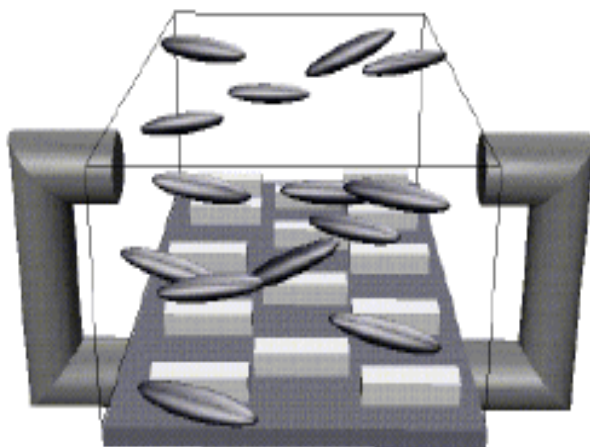
10.2.1 Rotasjon i molekyler

Anta nå at vi har to atomer med masse m_1 og m_2 som danner et molekyl. Schrödingers likning i dette tilfelle blir

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m_1} - \frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m_2} + V(r_1, r_2) \right\} \Psi(r_1, r_2) = E\Psi(r_1, r_2), \quad (10.4)$$

hvor $V(r_1, r_2)$ er vekselvirkningen mellom de to molekylene. Radiene r_1 og r_2 er avstanden fra et valgt origo til de to atomene.

⁴Lesehenvisning er avsnittene 10-6, 10-7 og 10-8.



Figur 10.3: En Molekylær gjeterhund: flytende krystallmolekyler (ellipser) innrettes i et magnetfelt og tvinger organiske molekyler til å rettes opp langs ei linje. For mer informasjon, se Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 2742.

Vi foretar så en transformasjon til tyngdepunktssystemet og definerer relativ avstand mellom atomene som

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (10.5)$$

redusert masse

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (10.6)$$

og massesenter koordinaten \mathbf{R}

$$\mathbf{R} = \frac{1}{m_1 + m_2} (m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2). \quad (10.7)$$

Vi skal som vanlig forsøke å gjøre livet så enkelt som mulig for oss selv (uten å tape viktig fysikk) og velger derfor å se på rotasjon om tyngdepunktet med origo i tyngdepunktet, dvs. at vi setter $\mathbf{R} = 0$. Dermed faller den delen av Schrödingers likning som avhenger av \mathbf{R} bort og vi sitter igjen med en likning for den relative avstanden r

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2\mu} + V(r) \right\} \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (10.8)$$

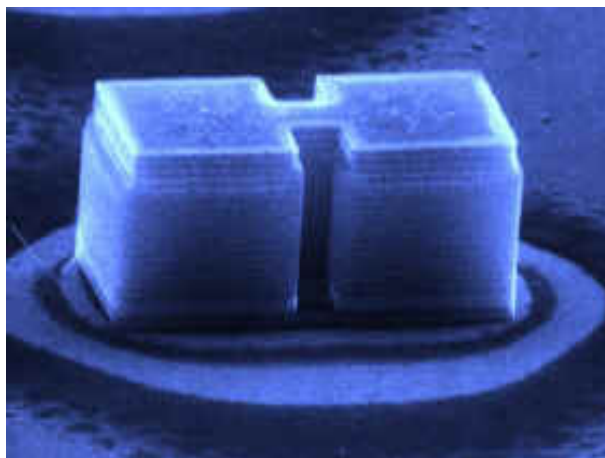
Siden potensialet avhenger kun av absoluttverdien av \mathbf{r} kan vi prøve oss på tilsvarende ansats for bølgefunksjonen Ψ som vi gjorde for hydrogenatomet; vi skiller ut en vinkeldel og en radiell del

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(r) Y_{LM_L}(\theta, \phi), \quad (10.9)$$

slik at den radielle delen av Schrödingers likning blir nå

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right\} R(r) = E R(r), \quad (10.10)$$

hvor L er banespinnet til systemet med verdi $L = 0, 1, 2, \dots$. Vi ser kun på rotasjonsbevegelse om massesenteret samtidig som vi antar at avstanden mellom atomene er konstant. Vi setter derfor $r = r_0$.



Figur 10.4: Et lysmolekyl: Fotoner kan fanges inn i halvledere på et vis som minner om elektroner i et atom. I Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 2582 klarte en å kople slike fotoniske atomer sammen, med mange av de samme egenskapene som elektroner utviser i et molekyl.

Den potensielle energien er $V(r = r_0)$ som er en konstant. Schrödingers likning reduserer seg i dette tilfellet til

$$\left(\frac{\hbar^2 L(L+1)}{2\mu r_0^2} + V(r_0) \right) R(r_0) = E R(r_0), \quad (10.11)$$

siden r_0 er en konstant. Det betyr at energien er gitt ved

$$\frac{\hbar^2 L(L+1)}{2\mu r_0^2} + V(r_0) = E = E_{\text{rot}} + V(r_0), \quad (10.12)$$

med rotasjonsleddet gitt ved

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2\mu r_0^2}. \quad (10.13)$$

Hvordan skal vi tolke nevneren $1/\mu r_0^2$ i uttrykket for rotasjonsenergien? Her følger en klassisk betraktning. For klassisk rotasjon med konstant vinkelfrekvens ω og med to gjenstander hvis hastigheter er henholdsvis

$$v_1 = \omega r_1, \quad (10.14)$$

og

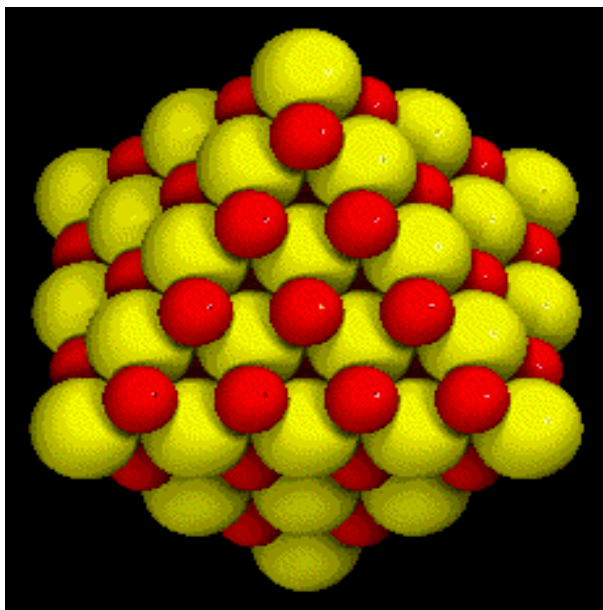
$$v_2 = \omega r_2, \quad (10.15)$$

har vi at det totale banespinnet er gitt ved

$$L = m_1 v_1 r_1 + m_2 v_2 r_2 = (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega = I \omega, \quad (10.16)$$

hvor $I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$ er treghetsmomentet. Den kinetiske energien kan derved uttrykkes vha. treghetsmomentet og banespinnet via

$$E = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}, \quad (10.17)$$



Figur 10.5: Krystallinsk sprettert: H_2 molekyler (i rødt) med ulike kjernespinns påvirkes ulikt av overflata til en litium-fluorid krystall. Resultatene av en slik påvirkning kan fortelle om elektriske krefter ved overflata til en krystall. For mer informasjon, se Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 5608.

og siden vi har valgt å se på rotasjon om tyngdepunktet med origo i tyngdepunktet, dvs. $\mathbf{R} = 0$, har vi at

$$\mathbf{R} = \mathbf{0} = m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2,$$

som igjen betyr at $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$ slik at vi kan uttrykke \mathbf{r}_1 og \mathbf{r}_2 vha. \mathbf{r} som

$$\mathbf{r}_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r},$$

og

$$\mathbf{r}_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r}.$$

Tregghetsmomentet i tyngdepunktssystemet blir dermed

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = I = m_1 \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r} \right)^2 + m_2 \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r} \right)^2 = \mu \mathbf{r}^2 = I_{\text{cm}}. \quad (10.18)$$

Vi kan da omskrive uttrykket for rotasjonsenergien vha. tregghetsmomentet som

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2I_{\text{cm}}} = \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2\mu r_0^2} \quad (10.19)$$

Vi skal diskutere spekteret som framkommer pga. rotasjonsfrihetsgrader i slutten av dette avsnittet. Vi merker oss her at vi vil få en herskare av rotasjonsnivåer pga. alle ulike verdier som L kan anta.

10.2.2 Vibrasjon i molekyler

Vi setter $L = 0$, slik at den radielle delen av Schrödingers likning reduserer seg til

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + V(r) \right\} R(r) = E R(r), \quad (10.20)$$

og velger vi

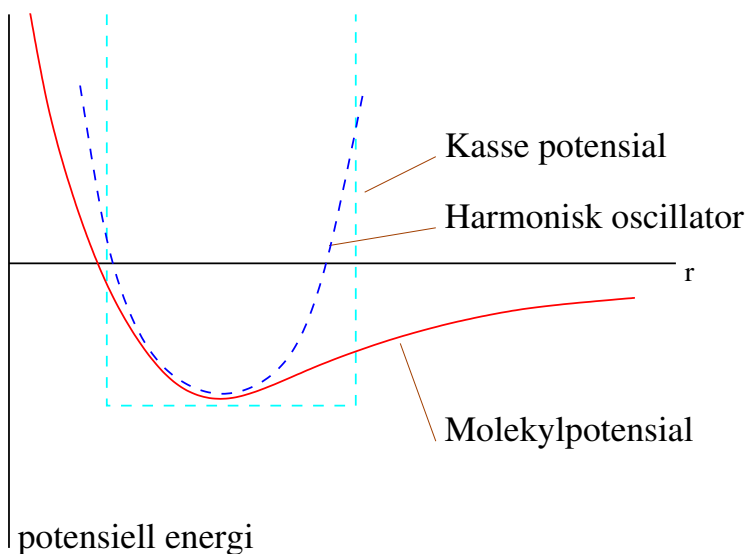
$$R(r) = \frac{1}{r} u(r),$$

kan vi omskrive, slik vi gjorde for hydrogenatomet, likning (10.20) som

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \right\} u(r) = E u(r). \quad (10.21)$$

Generelt så har den potensielle energien for et molekyl en komplisert form som vist i Figur 10.1.

Vi skal anta at vi ser på små forstyrrelser rundt likevektavstanden r_0 mellom molekylene. Rundt likevektavstanden approksimerer vi deretter potensialet med et harmonisk oscillator potensial som vist i Figur 10.6.



Figur 10.6: En illustrasjon av et molekylært potensial og ulike approksimasjoner som harmonisk oscillator og en uendelig potensialbrønn.

Vi velger dermed

$$V(r) \approx \frac{1}{2} k (r - r_0)^2, \quad (10.22)$$

og med et variabel bytte $\eta = r - r_0$ får vi tilbake Schrödingers likning for den harmoniske oscillator, dvs.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{d\eta^2} + \frac{1}{2} k \eta^2 \right\} u(\eta) = E u(\eta). \quad (10.23)$$

Bildet vi lager er av atomer som vibrerer rundt en likevektsstilling, derav benevnningen vibrasjonsenergi. Vi kan tenke oss atomene som holdt sammen av ei 'fjær' med lengde r_0 og at vi har en kraftkonstant k . Vi tilnærmer disse vibrasjoner som om de skulle foregå i en dimensjon, og kan derfor redusere Schrödingers likning til en en-dimensjonal likning, i dette tilfelle approksimert ved et harmonisk oscillator potensial. Til denne likningen kjenner vi uttrykket for energien, nemlig

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, \dots, \quad (10.24)$$

med

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}. \quad (10.25)$$

Energien skal svare til vibrasjonsenergien

$$E_{\text{vib}} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, \dots \quad (10.26)$$

Legg merke til at tenkningen vår både i forhold til rotasjon og vibrasjon er basert på antagelser med basis i klassisk mekanikk. Forskjellen fra klassisk fysikk er at både vibrasjons og rotasjons energiene er kvantiserte.

I tillegg skal vi merke oss at approksimasjonen vi har valgt for vibrasjonsenergien kun gjelder for små forskyvninger utifra likevektsposisjonen r_0 . Dersom $\eta = r - r_0$ blir stor gjelder ikke lenger harmonisk oscillator approksimasjonen til den potensielle energien $V(r)$.

10.2.3 Molekylspektra

Den totale energien er nå gitt ved

$$E = E_{\text{atom}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}} = \text{konstant} + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2I_{\text{cm}}} + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (10.27)$$

med $L = 0, 1, 2, \dots$ og $n = 0, 1, 2, \dots$.

Ser vi på elektrisk dipoloverganger har vi følgende utvalgsregler

1. $\Delta L = \pm 1$ mellom rotasjonsnivåer.
2. $\Delta n = 0, \pm 1$ mellom vibrasjonsnivåer.

Det betyr at energiforskjellen pga. overganger mellom rotasjonsnivåer avhenger av hvorvidt vi har $\Delta L = \pm 1$. For $\Delta L = 1$ finner vi når vi går fra L til $L+1$

$$\Delta E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2(L+1)}{I_{\text{cm}}}, \quad (10.28)$$

mens for overgangen $L \rightarrow L-1$ finner vi

$$\Delta E_{\text{rot}} = -\frac{\hbar^2 L}{I_{\text{cm}}}. \quad (10.29)$$

Legger vi sammen rotasjons og vibrasjonsforandringene kan vi oppsummere energidifferansene for elektriske dipoloverganger ved

1. $L \rightarrow L + 1$ og $\Delta n = 1$

$$\Delta E_{\text{rot}} + \Delta E_{\text{vib}} = \hbar\omega + \frac{\hbar^2(L+1)}{I_{\text{cm}}}, \quad (10.30)$$

mens for

2. $L \rightarrow L - 1$ og $\Delta n = 1$ har vi

$$\Delta E_{\text{rot}} + \Delta E_{\text{vib}} = \hbar\omega - \frac{\hbar^2 L}{I_{\text{cm}}}. \quad (10.31)$$

La oss avslutte dette avsnittet med å se på et utvalgt eksempel, nemlig CO molekylet. Den første tabellen gir oss eksperimentelle verdier for ulike absorpsjonsoverganger (absorpsjon av e.m. stråling) for CO molekylet.

Tabell 10.1: Absorpsjons linjer for rotasjonsoverganger i CO molekylet.

Rotasjons overganger	Bølgelengde	Frekvens
$L = 0 \rightarrow L = 1$	$2.60 \times 10^{-3} \text{ m}$	$1.15 \times 10^{11} \text{ Hz}$
$L = 1 \rightarrow L = 2$	$1.30 \times 10^{-3} \text{ m}$	$2.30 \times 10^{11} \text{ Hz}$
$L = 2 \rightarrow L = 3$	$8.77 \times 10^{-4} \text{ m}$	$3.46 \times 10^{11} \text{ Hz}$
$L = 3 \rightarrow L = 4$	$6.50 \times 10^{-5} \text{ m}$	$4.61 \times 10^{11} \text{ Hz}$

Ser vi på $L = 0 \rightarrow L = 1$ overgangen kan vi bruke denne til å rekne ut treghetsmomentet. Det absorberte fotonet har overført en energi $h\nu = \hbar\omega$ slik at

$$\Delta E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2(L+1)}{2I_{\text{cm}}} = \frac{\hbar^2}{I_{\text{cm}}} = \hbar\omega, \quad (10.32)$$

som gir at

$$I_{\text{cm}} = \frac{\hbar}{\omega}. \quad (10.33)$$

Legg også merke til at energien $\Delta E_{\text{rot}} = \hbar\omega$ er på $7.57 \times 10^{-5} \text{ eV}$, mye mindre enn bindingsenergien som er på noen få elektronvolt. Henter vi den observerte frekvensen fra tabellen vår har vi

$$\omega = 2\pi\nu = 7.23 \times 10^{11} \text{ rad/s}, \quad (10.34)$$

som innsatt i uttrykket for treghetsmomentet gir oss at $I_{\text{cm}} = 1.46 \times 10^{-46} \text{ kgm}^2$.

Vi kan så bruke treghetsmomentet til å rekne ut likevektsposisjonen r_0 . Men da trenger vi verdien for den reduserte massen μ , siden

$$\mu r_0^2 = I_{\text{cm}}. \quad (10.35)$$

Karbonatomet har atomær masse 12 u mens oksygenatomet har masse 16 u. Da finner vi

$$\mu = \frac{(12u)(16u)}{12u + 16u} = 1.14 \times 10^{-26} \text{ kg}, \quad (10.36)$$

som gir

$$r_0 = \sqrt{\frac{I_{\text{cm}}}{\mu}} = 1.13 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad (10.37)$$

eller 0.113 nm. Dette eksemplet viser hvordan spektroskopiske data kan brukes til å bestemme egenskaper ved molekyler.

Hva vibrasjon angår, så er frekvensen for en overgang fra $n = 0$ til $n = 1$ for CO molekylet gitt ved 6.42×10^{13} Hz. Denne frekvensen er to størrelsesordener større enn den for rotasjonsovergangen. Det vil si at energien for vibrasjonsovergangen er mye større enn den for en rein rotasjonsovergang.

Vi kan bruke denne eksperimentelle verdien til å rekne fjærkonstanten k da

$$\omega^2 \mu = k. \quad (10.38)$$

Vinkelfrekvensen er $\omega = 2\pi\nu = 4.03 \times 10^{11}$ rad/s og bruker vi verdien vi fant for den reduserte masse μ har vi

$$k = 1.86 \times 10^3 \text{ N/m}. \quad (10.39)$$

10.3 Ionisk og kovalent binding

I dette avsnittet skal vi se på forskjellene mellom ionisk og kovalent binding vha. noen utvalgte eksempler.

10.3.1 Ionisk binding

Hva ionisk binding angår, kan vi i all hovedsak si at bindingen skyldes tiltrekningen mellom ioner av ulik ladning, selv om vi også har et visst innslag av kovalent binding, dvs. at ett eller flere elektroner deles mellom de involverte atomene. Vi skal til slutt i dette avsnittet vise et enkelt mål for graden av ionisk og kovalent binding.

Som eksempel skal vi bruke kaliumklorid, KCl. For at dette molekylet skal være stabilt, må dets bindingsenergi være større (i absoluttverdi) enn bindingsenergien til de adskilte kalium og klor atomene, dvs.

$$E(KCl) < E(K) + E(Cl). \quad (10.40)$$

Kalium har i grunntilstanden den elektroniske konfigurasjonen $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ mens klor har konfigurasjonen $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$.

For at vi skal få et kalium ion, må vi tilføre atomet energi for å løsrive det svakest bundne elektronet. Denne energien svarer til ionisasjonsenergien for kalium, som er 4.34 eV. Vi får da et kalium ion K^+ , med elektron konfigurasjon $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$, dvs. at vi har fylt alle skall opp til og med $3p$. Et kloratom kan tiltrekke seg dette løselevne elektronet. I denne prosessen frigjøres det energi pga. elektronaffiniteten til kloratomet. Energien som frigjøres er 3.62 eV, slik at vi sitter igjen med et energioverskudd på 0.72 eV, og klorionets konfigurasjon er den samme som kaliumionet. Denne energien er positiv i en skala hvor vi har satt energien til kalium og klor atomene til null når de er langt fra hverandre. Vi kaller dette energioverskuddet for E_{ion} . For at vi skal få binding må vi legge til tiltrekningen som ionene føler gitt ved

$$-\frac{ke^2}{r},$$

hvor r er avstanden mellom ionene. Men dersom vi bare har et tiltrekkende ledd, vil ikke være i stand til å finne et energiminimum og en tilsvarende avstand r_0 mellom atomene. Når avstanden mellom ionene minsker, vil de svakest bundne elektronene i $3p$ skallene i klor og kalium begynne å overlappe hverandre. Siden to elektroner ikke kan ha samme kvantetall pga. Paulis eksklusjonsprinsipp får vi et frastøtende ledd til bindingsenergien for molekylet.

Vi kan dermed modellere den totale bindingsenergien for et molekyl som består av to ioner som

$$E(r) = -\frac{ke^2}{r} + E_{\text{ion}} + E_{\text{Pauli}}, \quad (10.41)$$

hvor det siste leddet kan skrives som

$$E_{\text{Pauli}} = \frac{A}{r^n}, \quad (10.42)$$

hvor A er en konstant og n et heltall som kan bestemmes utifra eksperimentelle data, se eksemplet nedenfor.

KCl molekylet har en bindingsenergi på 4.4 eV og $r_0 = 0.27$ nm, mens koksalt har en bindingsenergi på 4.26 eV og $r_0 = 0.24$ nm. Kan du, utifra elektronkonfigurasjonene til kalium, natrium og klor ionene forklare hvorfor r_0 og bindingsenergien til KCl er større enn de tilsvarende for NaCl?

Parametrisering av bindingsenergien til NaF

Ved hjelp av eksperimentelle data som ionisasjonsenergien til Na, elektronaffiniteten til fluor, r_0 og bindingsenergien til molekylet, kan vi lage oss en enkel parametrisering av bindingsenergien $E(r)$.

Ionisasjonsenergien for Na er 5.14 eV mens elektronaffiniteten til fluor er 3.40 eV. Det gir oss $E_{\text{ion}} = 1.74$ eV. Bindingsenergien er 4.99 eV mens $r_0 = 0.193$ nm.

Der energien har sitt minimum finner vi at

$$-\frac{ke^2}{r_0} = -\frac{1.44 \text{ eVnm}}{0.193 \text{ nm}} = -7.46 \text{ eV},$$

som gir

$$E_{\text{Pauli}} = E(r_0) + \frac{ke^2}{r_0} - E_{\text{ion}} = 0.72 \text{ eV}, \quad (10.43)$$

eller

$$E_{\text{Pauli}} = \frac{A}{r^n} = 0.72 \text{ eV}. \quad (10.44)$$

Vi kan deretter bestemme konstantene n og A . Ved $r = r_0$ må den deriverte av energien være null. Det betyr at kreftene satt opp av Coulombvekselvirkningen mellom ionene og Pauliprinsippet balanserer hverandre. Vi får dermed

$$\frac{dE(r)}{dr} \Big|_{r=r_0} = 0, \quad (10.45)$$

eller

$$\frac{d(-\frac{ke^2}{r})}{dr} \Big|_{r=r_0} = \frac{d(-\frac{A}{r^n})}{dr} \Big|_{r=r_0}, \quad (10.46)$$

eller

$$\frac{ke^2}{r_0^2} = \frac{nA}{r_0^{n+1}}. \quad (10.47)$$

Setter vi inn $A/r_0^n = 0.72 \text{ eV}$ og $r_0 = 0.193 \text{ nm}$, finner vi at $n = 10.4 \approx 10$ og $A = 9 \times 10^{-8} \text{ eVnm}^{10}$, dvs.

$$E_{\text{Pauli}} = \frac{9 \times 10^{-8} \text{ eVnm}^{10}}{r^{10}}.$$

10.3.2 H_2^+ molekylet, kovalent binding og tunneling

I dette avsnittet skal vi i all hovedsak konsentrere oss om H_2^+ molekylet. Framstillinga her går utover det som er diskutert i tekstboka, avsnitt 10-1, men er tatt med for å vise at man faktisk kan lage brukbare estimer om bindingsenergien vha. enkle approksimasjoner.

H_2^+ molekylet består av to protoner og et elektron med bindingsenergi $E_B = -2.8$ eV og likevektsposisjon $r_0 = 0.106$ nm.

Vi definerer systemet vårt, to protoner og et elektron vha. følgende variable, se Figur 10-1 i boka. Elektronet plasseres i en avstand r fra et valgt origo, det ene protonet i avstanden $-\mathbf{R}/2$ og det andre i avstanden $\mathbf{R}/2$, slik at avstanden til elektronet blir henholdsvis $r - \mathbf{R}/2$ og $r + \mathbf{R}/2$ slik som vist i Figur 10-1 i boka.

Når vi skal sette opp Schrödingers likning for dette systemet skal vi se bort ifra bidraget fra protonene til den kinetiske energien, da massen til protonene er ca. 2000 ganger større enn elektronets masse. Vi kan dermed anta at hastigheten til protonene er veldig liten i forhold til elektronets og betrakter protonene, slik vi også gjorde med hydrogenatomet, som om de er i ro i forhold til elektronet.

Det betyr at vi kan skrive Schrödingers likning på følgende form

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m_e} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{ke^2}{R} \right\} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (10.48)$$

hvor det første leddet er den kinetiske energien til elektronet, det andre leddet er den potensielle energien elektronet føler i forhold til protonet i $-\mathbf{R}/2$ mens det tredje leddet er den tilsvarende potensielle energien fra protonet i $\mathbf{R}/2$. Det fjerde og siste leddet på venstre side skyldes frastøtingen mellom de to protonene. Vi har altså neglisjert protonenes kinetiske energi. I figur 10.7 har vi plotta den potensielle energien

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -\frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{ke^2}{R}. \quad (10.49)$$

I denne figuren har vi fiksert verdien av $|\mathbf{R}| = 2a_0$ og $|\mathbf{R}| = 8a_0$, som er henholdsvis 2 og 8 Bohrradier. Legg merke til at i området mellom $|\mathbf{r}| = -|\mathbf{R}|/2$ (i figuren er enhetene gitt ved r/a_0 , med $a_0 = 0.0529$) og $|\mathbf{r}| = |\mathbf{R}|/2$ kan elektronet tunnelere gjennom potensialbarrieren. Husk at $-\mathbf{R}/2$ og $\mathbf{R}/2$ svarer til posisjonene til de to protonene i molekylet. Vi legger også merke til at ettersom R øker så blir potensialet svakere. Dette får konsekvenser for bindingsenergien til molekylet, da den blir mindre når avstanden mellom atomene øker. Potensialbarrieren som oppstår betyr at elektronet ikke vil være ved det ene protonet hele tida. Siden potensialet vårt er symmetrisk med tanke på ombytte av $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$ og $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ betyr det at sannsynligheten for å bevege seg fra et proton til et annet må være lik i begge retninger. Vi kan da tenke oss at elektronet deler sin tid mellom de to protonene.

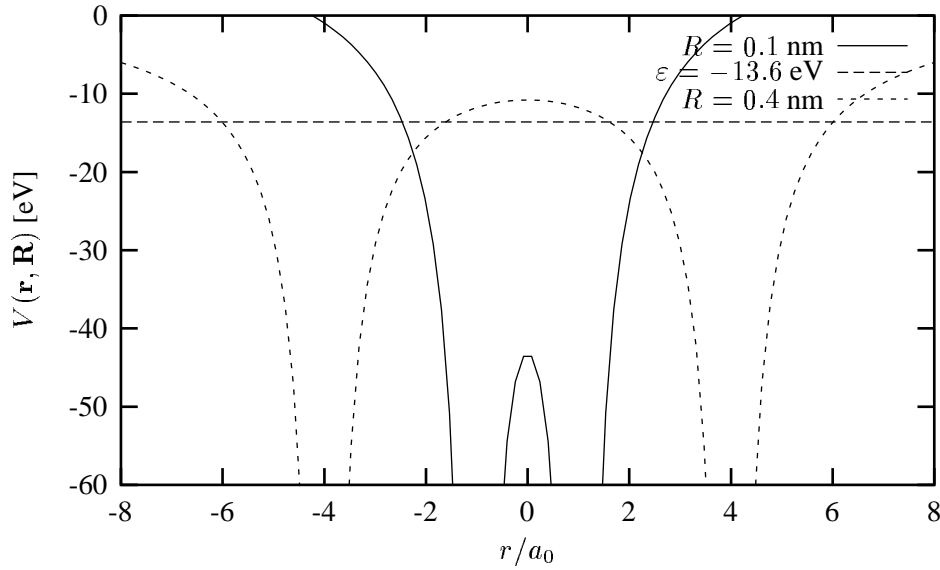
Med dette i baktanke skal vi lage oss en modell for beskrivelse av molekylet. Siden vi har kun et elektron kan vi forestille oss at i grensa $R \rightarrow \infty$, dvs. stor avstand mellom atomene (som i vårt tilfelle bare er to protoner) så er elektronet bare bundet til et av protonene, og vi har et hydrogenatom. Som ansats for elektronets bølgefunksjon skal vi derfor ta utgangspunkt i bølgefunksjonen for elektronet i grunntilstanden for hydrogenatomet, nemlig

$$\psi_{100}(r) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0}, \quad (10.50)$$

som vi har diskutert i kapittel 6.

Vi tenker oss deretter at elektronet kan koples enten til det ene protonet eller det andre. Vi definerer derfor to hydrogenbølgefunksjoner

$$\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|/a_0}, \quad (10.51)$$



Figur 10.7: Plot av $V(r, R)$ for $|\mathbf{R}|=0.1$ og 0.4 nm. Enhet langs x -aksen er r/a_0 . Legg merke til at vi også har plottet energien (den rette linja) som svarer til bindingsenergien for hydrogenatomet, dvs. $\varepsilon = -13.6$ eV.

og

$$\psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|/a_0}. \quad (10.52)$$

Basert på disse to bølgefunksjonene, som representerer hvor elektronet kan være, **lager vi oss en ansats for bølgefunksjonen for molekylet ved å prøve med følgende form**

$$\psi_+(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = C_+ (\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})). \quad (10.53)$$

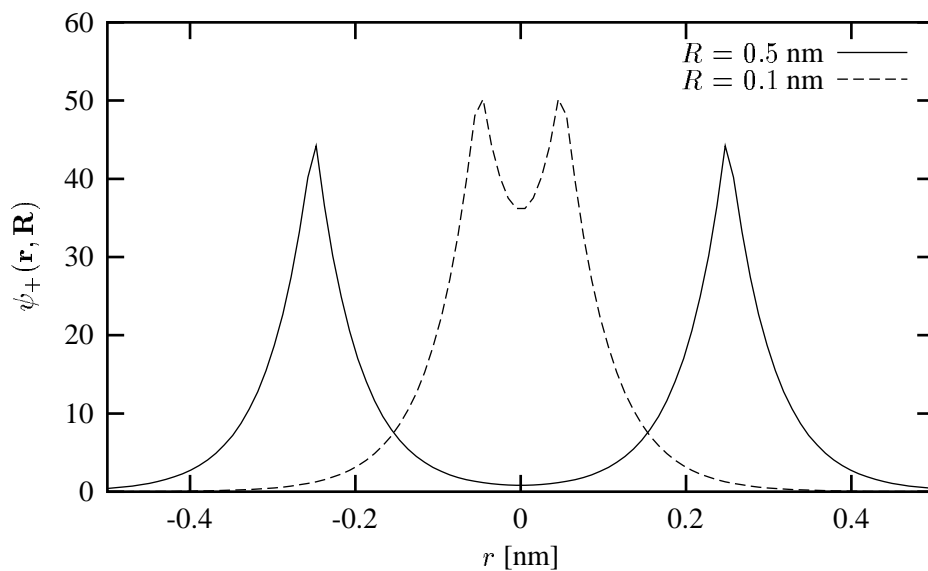
Konstanten C_+ er en normeringskonstant. Denne ansatsen baseres seg på diskusjonen vår ovenfor om potensialets form og at elektronet har like stor sannsynlighet for å være nær det ene eller andre protonet. I siste likning valgte vi en symmetrisk form for bølgefunksjonen, men det er ikke noe som forbyr oss å velge en antisymmetrisk bølgefunksjon

$$\psi_-(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = C_- (\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})). \quad (10.54)$$

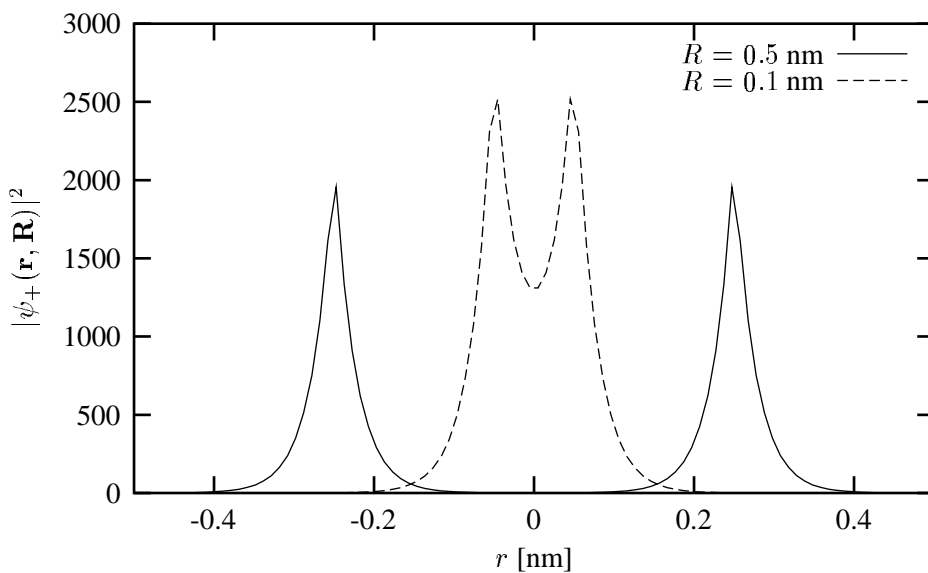
Det vi har gjort er å bruke hydrogenatomet som modell og korrigere for tilstedeværelsen av et tilleggsproton. Som vi skal se nedenfor gir denne ansatsen et kvalitativt riktig bilde av molekylet. Det vi også skal vise er at den symmetriske ansatsen gir en bundet tilstand, mens den antisymmetriske gir en ubunden tilstand.

Men før vi går videre kan det være nyttig å studere disse to bølgefunksjonene for ulike verdier av $R = |\mathbf{R}|$. Figur 10.8 viser $\psi_+(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ for ulike verdier av $|\mathbf{R}|$. Vi legger merke til at når R øker, dvs. at protonene er lengre fra hverandre, så begynner de to hydrogen bølgefunksjonene å skille lag. I diskusjonen vår er det svært nyttig å se på sannsynlighetstettheten gitt ved

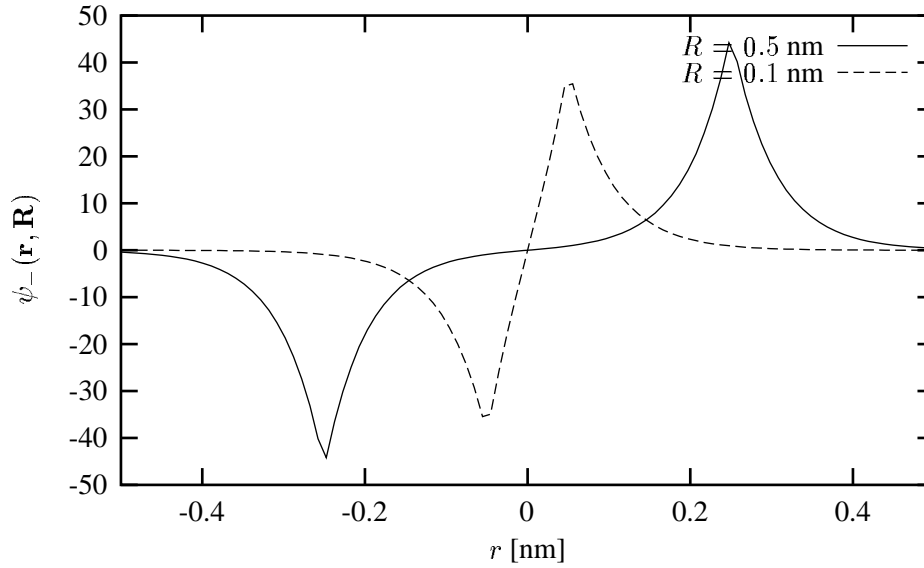
$$\psi_{\pm}^* \psi_{\pm} = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 \pm 2\psi_2^* \psi_1. \quad (10.55)$$



Figur 10.8: Plott av $\psi_+(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ for ulike verdier av $|\mathbf{R}|$. Merk at funksjonene ikke er normaliserte. Enheten på y -aksen er vilkårlig.



Figur 10.9: Plott av $|\psi_+(\mathbf{r}, \mathbf{R})|^2$ for ulike verdier av $|\mathbf{R}|$. Merk at funksjonene ikke er normaliserte. Enheten på y -aksen er vilkårlig.



Figur 10.10: Plott av $\psi_{-}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ for ulike verdier av $|\mathbf{R}|$. Merk at funksjonene ikke er normaliserte. Enheten på y -aksen er vilkårlig.

I Figur 10.9 har vi plotta sannsynlighetstettheten for ψ_{+} . Vi ser at vi har et område mellom de to protonene hvor sannsynlighetstettheten er forskjellig fra null når $R = 0.1$ nm, mens sannsynlighetstettheten minsker når R øker. Det betyr at elektronet kan være mellom de to protonene.

Fysisk betyr det at vi har en negativ ladningsfordeling mellom protonene. Denne negative ladningsfordelingen tiltrekker protonene og binder systemet! Det skal vi vise nedenfor i vår beregning av energien. At et elektrons (eller flere) ladningsfordeling deles mellom to atomer, er et eksempel på det som kalles **kovalent binding**.

Hva så med den andre ansatsen for bølgefunksjonen gitt ved den antisymmetriske formen?

I Figur 10.10 viser vi et plott av $\psi_{-}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ for $R = 0.1$ og $R = 0.5$. For denne bølgefunksjonen har vi et område hvor de to bidragene kansellerer hverandre. For $R = 0.1$ nm, som er nær likevektsavstanden for molekylet, er funksjonen null ved $r = 0$. Ser vi deretter på sannsynlighetstettheten for denne ansatsen, ser vi at for $R = 0.1$ har vi null sannsynlighet for å finne elektronet. Det er vist i Figur 10.11.

Det betyr at vi har et område mellom protonene hvor det ikke er noen sannsynlighet for å finne elektronet. Fysisk vil det si at protonene ser kun deres egne ladninger i dette området, noe som igjen forklarer hvorfor den antisymmetriske ansatsen ikke gir binding.

La oss nå bruke disse to bølgefunksjonene og vise at vi faktisk kan rekne ut bindingsenergien.

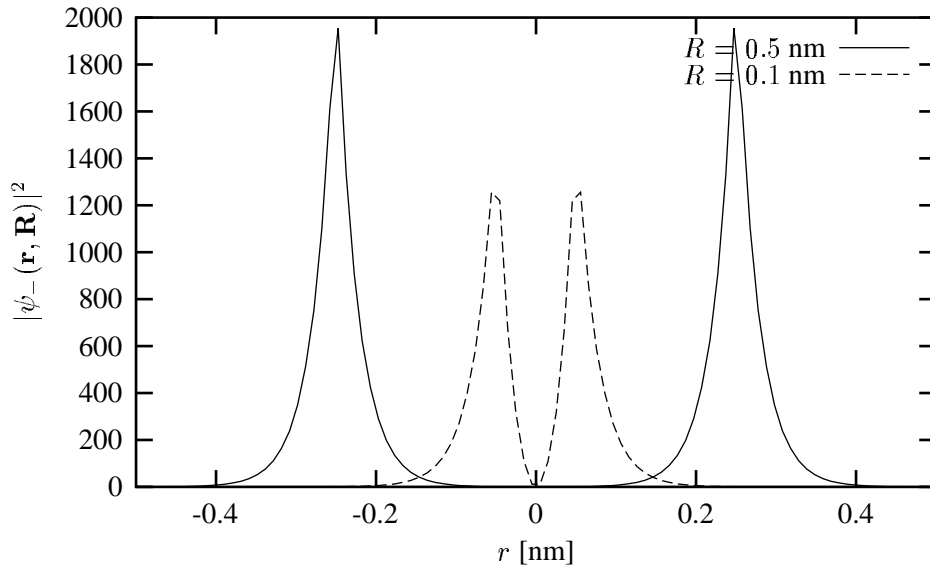
Først trenger vi å finne normeringsfaktorene C_{\pm} ved å rekne ut

$$\int C_{\pm}^2 (\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \pm \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}))^* (\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \pm \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})) d^3r = 1. \quad (10.56)$$

Det går an å vise at⁵ at

$$C_{\pm}^2 = \frac{1}{2(1 \pm \Delta(R))}, \quad (10.57)$$

⁵Her gir vi kun resultatet!



Figur 10.11: Plott av $|\psi_{-}(\mathbf{r}, \mathbf{R})|^2$ for ulike verdier av $|\mathbf{R}|$. Merk at funksjonene ikke er normaliserte. Enheten på y -aksen er vilkårlig.

med

$$\Delta(R) = \int \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R})^* \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r = \left(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{R^2}{3a_0^2}\right) e^{-R/a_0}. \quad (10.58)$$

Vi kan dermed rekne ut forventningsverdien av energien gitt ved

$$\langle \hat{\mathbf{H}} \rangle_{\pm} = \frac{\int \psi_{\pm}^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r}{2(1 \pm \Delta(R))}, \quad (10.59)$$

med

$$\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m_e} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{ke^2}{R}. \quad (10.60)$$

Skriver vi ut alle bidragene får vi fire ledd, nemlig

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{H}} \rangle_{\pm} &= \frac{1}{2(1 \pm \Delta(R))} \left\{ \int \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r + \int \psi_2^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r \right. \\ &\quad \left. \pm \int \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r \pm \int \psi_2^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r \right\}, \end{aligned} \quad (10.61)$$

som igjen kan forenkles dersom vi bruker at $\hat{\mathbf{H}}$ og bølgenfunksjonene ψ_{\pm} forandres ikke ved ombyttene $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$ og $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, til

$$\langle \hat{\mathbf{H}} \rangle_{\pm} = \frac{1}{(1 \pm \Delta(R))} \left\{ \int \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r \pm \int \psi_2^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r \right\}. \quad (10.62)$$

La oss droppe normeringsfaktoren i første omgang og se først på

$$\begin{aligned} &\int \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r = \\ &\int \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m_e} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} + \frac{ke^2}{R} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \right\} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r. \end{aligned} \quad (10.63)$$

De to første leddene gir oss bindingsenergien til hydrogenatomet. Det tredje leddet er uavhengig av integrasjonsvariabelen r og gir kun ke^2/R . Det siste leddet skyldes tiltrekningen fra det andre protonet slik at dette bidraget til energien gir oss

$$\int \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r = E_0 + \frac{ke^2}{R} - \int \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r. \quad (10.64)$$

Det siste leddet kan også reknes ut slik at vi får

$$\int \psi_1^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r = E_0 + \frac{ke^2}{R} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right) e^{-2R/a_0}. \quad (10.65)$$

Helt tilsvarende kan vi rekne ut

$$\begin{aligned} \int \psi_2^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \hat{\mathbf{H}} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r &= S(R) = \\ \int \psi_2^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m_e} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} + \frac{ke^2}{R} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \right\} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r, \end{aligned} \quad (10.66)$$

som gir

$$S(R) = \left(E_0 + \frac{ke^2}{R}\right) \Delta(R) - \int \psi_2^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r. \quad (10.67)$$

Det siste leddet kan også reknes ut. Utrekning gir

$$\int \psi_2^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3r = \frac{ke^2}{a_0} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right) e^{-R/a_0}, \quad (10.68)$$

slik at funksjonen $S(R)$ er gitt ved

$$S(R) = \left(E_0 + \frac{ke^2}{R}\right) \Delta(R) - \frac{ke^2}{a_0} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right) e^{-R/a_0}. \quad (10.69)$$

Merk at $S(R)$ er tiltrekkende, negativt fortegn.

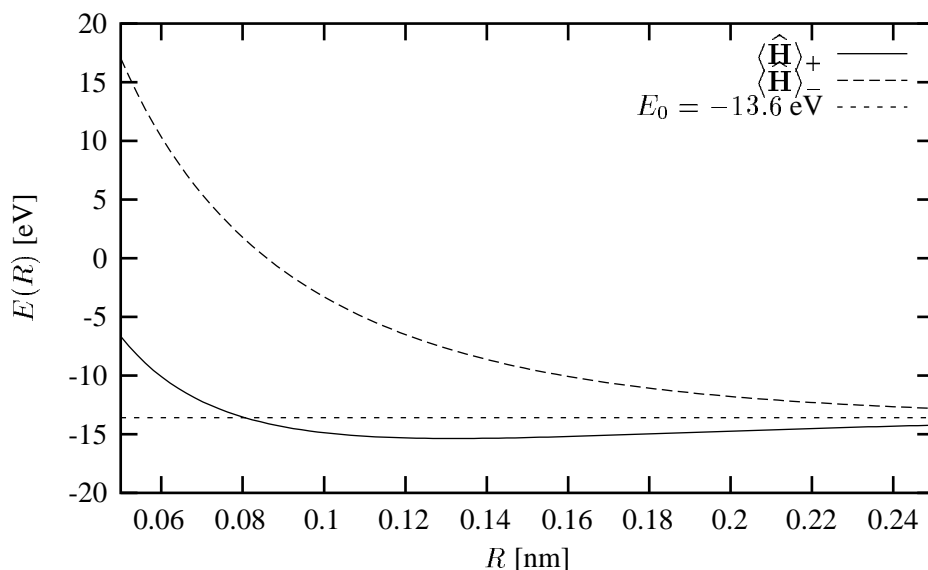
Legger vi alle bitene sammen finner vi at energien er gitt ved

$$\langle \hat{\mathbf{H}} \rangle_+ = \frac{1}{(1 + \Delta(R))} \left\{ E_0 + \frac{ke^2}{R} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right) e^{-2R/a_0} + S(R) \right\}, \quad (10.70)$$

og

$$\langle \hat{\mathbf{H}} \rangle_- = \frac{1}{(1 - \Delta(R))} \left\{ E_0 + \frac{ke^2}{R} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right) e^{-2R/a_0} - S(R) \right\}. \quad (10.71)$$

Hvordan tolker vi leddet $S(R)$? Dette leddet er et kryssledd da det inneholder både $\psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ og $\psi_1(\mathbf{r}, \mathbf{R})$, og uttrykker muligheten for at elektronet kan være både ved det ene og det andre protonet. Det er dette leddet som gir opphav til binding eller ikke. Siden $S(R)$ er tiltrekkende (negativt fortegn), får vi mer binding for den symmetriske bølgefunksjonen. For den antisymmetriske bølgefunksjonen blir bidraget fra $S(R)$ repulsivt, og gir ikke binding. Når vi tenker oss at elektronet kan være begge steder, er det bølgebildet vi bruker. Dette kan vi igjen forstå ved å gå tilbake til Figurene 10.9 og 10.11 for sannsynlighetstetthetene. For den positive bølgefunksjonen har vi en negativ ladningsfordeling mellom protonene. Denne ladningsfordelingen binder protonene til elektronet. For den antisymmetriske bølgefunksjonen har vi ingen negativ ladningsfordeling mellom protonene, og protonene følger dermed ei frastøting med det



Figur 10.12: Plott av $\langle \hat{H} \rangle_{\pm}$ for ulike verdier av $|R|$.

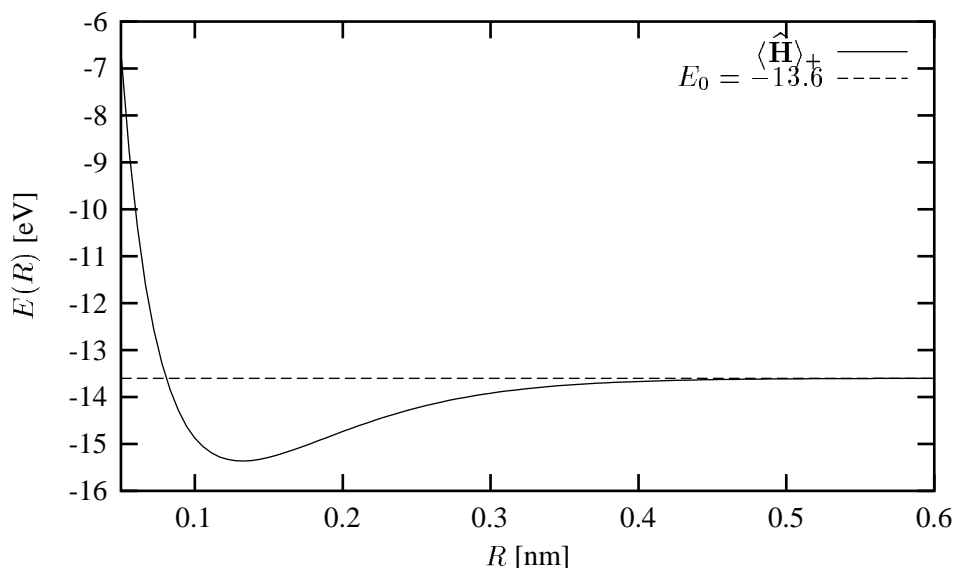
resultat at molekylet ikke er bundet. Matematisk gjenspeiles dette i energien via størrelsen $S(R)$. De to forventningsverdiene er plotta i Figur 10.12, og vi ser at den symmetriske bølgefunksjonen gir binding, mens den antisymmetriske ikke gir noen binding. Grunnen til at vi sier at den antisymmetriske energien ikke gir binding, skyldes at kurven for $\langle \hat{H} \rangle_-$ ikke utviser noe minimum som funksjon av R .

I Figur 10.12 har vi også plotta bindingsenergien til hydrogenatomet, $E_0 = -13.6 \text{ eV}$. I grensa $R \rightarrow \infty$ vil elektronet bare være bundet til et proton. Vi ser at begge forventningsverdiene $\langle \hat{H} \rangle_{\pm}$ nærmer seg denne grensa når R blir stor.

For den symmetriske løsningen har vi et minimumspunkt ved $R = 0.13 \text{ nm}$, og en energi på -15.37 eV . Det svarer til et tillegg på 1.77 eV i forhold til -13.6 , som er resultatet ved $R \rightarrow \infty$. Dette tillegget er dissosiasjonsenergien, eller bindingsenergien for molekylet. Den eksperimentelle verdien er 2.8 eV , og likevektsavstanden er $r_0 = 0.106 \text{ nm}$. Vår enkle approksimasjon gir altså resultater som ikke er så langt vekk fra virkeligheten.

Vi får et tillegg i binding fordi elektronet nå føler tiltrekningen til to protoner. Men det er elektronet som binder atomene sammen, det er dette som kalles for kovalent binding. Dersom vi istedet for H_2^+ molekylet hadde sett på Heliumionet He^+ , som også har to protoner og et elektron, er bindingsenergien $E_B = -54.4 \text{ eV}$.

I vårt tilfelle er de to atomene (to protoner) bundet sammen pga. en elektronladningsfordeling mellom seg. For heliumionet, er det derimot to protoner som binder et elektron til seg. Til slutt, legg også merke til at den totale energien er på -15.37 eV ved minimumspunktet, større i absoluttverdi enn $E_0 = -13.6 \text{ eV}$. Først ved store verdier av R begynner bindingsenergien å nærme seg -13.6 eV . Figur 10.13 viser bindingsenergien for den symmetriske bølgefunksjonen for store R . For en verdi av $R = 0.4 \text{ nm}$, betyr det energien er større i absolutt verdi en hydrogenatoms bindingsenergi. Dersom vi ser tilbake på Figur 10.7 hvor vi har tegna inn ei rett linje for $E_0 = -13.6 \text{ eV}$, ser vi at elektronet må tunnelere gjennom potensialbarrieren. Altså kovalent binding ved tunneling. I tekstboka, se avsnitt 10-1, blir H_2^+ molekylet framstilt som binding pga. tunneling. Det er ikke korrekt dersom dere ser på plottet av den potensielle energien for $R = 0.1 \text{ nm}$, som svarer til omtrent likevektsavstanden. I det tilfelle er den potensielle



Figur 10.13: Plott av $\langle \hat{H} \rangle_+$ for ulike verdier av $|R|$.

energien på nesten -50 eV, mens den totale eksperimentelle er på ca. -16.4 eV. Da er det ikke noen tunneling. Derimot, dersom vi ser på verdier for $R \sim 0.4$ nm, kan vi ha tunneling. Men da har ikke systemet lavest energi.

For å repetere, H_2^+ molekylet er et eksempel på kovalent binding, hvor et elektron (eller flere) setter opp en ladningsfordeling som binder atomene.

10.3.3 H_2 molekylet

Vi avslutter denne diskusjonen med å nevne at også H_2 molekylet er et eksempel på kovalent binding. Systemet⁶ er litt mer komplisert enn H_2^+ molekylet da vi nå har to elektroner. Men igjen er det ladningsfordelingen som elektronene setter opp som binder atomene, i dette tilfelle to protoner. Mekanismen er den samme som for H_2^+ molekylet. Men tilleggselektronet bidrar med mer binding, slik at dissosiasjonsenergein for dette molekylet er 4.5 eV, mot 2.8 eV for H_2^+ . mer binding betyr også at likevektsavstanden minsker, her er den 0.074 nm, kontra 0.106 i H_2^+ .

Siden vi nå har to elektroner, må vi også huske, se tilbake på Helium i forrige kapittel, at vi har en frastøting mellom elektronene som kommer i tillegg.

Det vi også skal legge merke til er at siden elektronene er fermioner, kan de ikke ha samme sett kvantetall. Det betyr at dersom begge elektroner er i $1s$ orbitalen, så er den romlige delen av bølgefunksjonen symmetrisk. Det betyr at spinndelen må være antisymmetrisk. Lager vi en ansats for bølgefunksjonen basert på en symmetrisk romdel og en antisymmetrisk spinndel, så går det an å vise at vi får binding når vi plasserer begge elektronene i $1s$ orbitalen. Velger vi symmetrisk spinndel får vi ikke binding, men da må vi også plassere elektronene i ulike orbitaler.

Klarer du å forklare hvorfor H_3 ikke er et stabilt molekyl? Eller hva med et molekyl av heliumatomer? Sistnevnte utviser dog molekyllær binding ved svært høye trykk eller lave temperaturer via van der Waals krefter pga. ei induisert dipol-dipol kraft.

⁶Diskutert i avsnitt 10-2 i boka.

10.3.4 Ionisk eller kovalent binding?

Vi har tidligere sett at f.eks. koksalt, NaCl, utviser en form for kovalent binding også hvor det ene elektronet som avgis av natriumatomet til kloratomet, kan på et vis tolkes som om det deles mellom de to atomene.

Et mål for graden av ionisk binding kan være å sammenlikne det eksperimentelle dipolmomentet et molekyl har og dipolmomentet som framkommer dersom vi forestiller oss at molekylet er satt sammen av to ioner, som punktladninger, med midlere avstand r_0 i grunntilstanden. Dipolmomentet \hat{D}_{ion} for koksalt blir da

$$\hat{D}_{\text{ion}} = er_0 = (1.6 \times 10^{-19} \text{ C})(2.4 \times 10^{-10} \text{ m}) = 3.8 \times 10^{-29} \text{ Cm}. \quad (10.72)$$

Den eksperimentelle verdien er

$$\hat{D}_{\text{eksp}} = 3.0 \times 10^{-29} \text{ Cm}. \quad (10.73)$$

Forholdet mellom disse to størrelsene blir dermed

$$\hat{D}_{\text{eksp}}/\hat{D}_{\text{ion}} = 0.8. \quad (10.74)$$

Det betyr at vi har ca. 80% ionisk binding og 20% kovalent binding i vanlig koksalt.

10.4 Oppgaver

10.4.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 10.1

Energien til grunntilstanden av molekyl ionet H_2^+ er 2,65 eV mindre enn energien til et system med et nøytralt hydrogēn atom i sin grunntilstand og et proton H^+ i stor avstand fra hydrogēn atomet.

- Hvor stor er forskjellen mellom energien til H_2^+ -ionet og energien til et system bestående av to protoner og et elektron med stor gjensidig separasjon?
- Hva blir forskjellen i energi mellom et system av et H_2^+ -ion pluss et fritt elektron og et system med to hydrogēn atomer i sine grunntilstander?
- Finn ionisasjons energien for hydrogēn molekylet H_2 når det trengs 4,48 eV for å spalte dette molekylet til to hydrogēn atomer som begge er i grunntilstanden?

Oppgave 10.2

To-atomige molekyler som holdes sammen av en kovalent binding har en potensiell energi som funksjon av den interatomære avstanden R beskrevet ved Morse potensialet

$$V(R) = D (\exp[-2a(R - R_0)] - 2 \exp[-a(R - R_0)]) ,$$

der D , a og R_0 er konstanter. For oksygēn molekylet O_2 finner man eksperimentelt verdiene $D = 5,2 \text{ eV}$, $R_0 = 0,12 \text{ nm}$ og $a = 27 \text{ nm}^{-1}$.

- Plott potensialet og vis at det har et minimum for $R = R_0$.

- b) Hvor stor energi trengs for å spalte et molekyl beskrevet ved dette potensialet?
- c) Vis at små vibrasjoner av molekylet rundt likevektsavstanden R_0 kan beskrives ved et harmonisk potensial på formen $V = \frac{1}{2}k(R - R_0)^2$, og bestem konstanten k .
- d) Beregn frekvensen og de kvantiserte energi nivåene for denne vibrasjonen. Massen til et oksygenatom er 16 u hvor den atomære masseenheden u er gitt som $1u = 1,66 \cdot 10^{-27}$ kg.
- e) Hva blir nå spaltningsenergien for molekylet når det befinner seg i grunntilstanden?

Oppgave 10.3

- a) Vis at hamiltonoperatoren for bevegelsen omkring massesenteret til et system av to partikler med masse m_1 og m_2 som har en relativ avstand r og gjensidig potensiell energi $V(r)$ er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r),$$

der μ er systemets reduserte masse.

I sfæriske koordinater (romlige polarkoordinater) er

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2,$$

der $\hat{\mathbf{L}}$ er operatoren for banespinnet. Vi antar foreløpig at systemet utvikler seg slik at den relativ avstanden er konstant lik r_0 .

- b) Begrunn at hamiltonoperatoren for systemet når vi ser bort fra massesenterbevegelsen på en konstant energi nær er gitt ved

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r_0^2}.$$

- c) Hvilken type bevegelse utfører systemet?
- d) Skriv ned systemets energi egenverdier E og angi de tilhørende energi egenfunksjonene ψ_E (Det kreves dog ikke eksplisitte uttrykk for disse). Hvilke andre fysiske størrelser kan samtidig ha skarpe verdier?
- e) Hva forteller uttrykket $|\psi_E|^2 \sin\theta d\theta d\phi$ om systemet?

Hvis systemet ovenfor er et toatomig molekyl, vil den kovalente bindingen ikke være så sterk at antagelsen om en konstant interatomær avstand kan opprettholdes. Sentrifugalkreftene som skyldes systemets rotasjon vil føre til at bindingen strekkes, og dette vil gi opphav til en korreksjon til hamilton operatoren. Den nye hamilton operatoren er gitt ved

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r_0^2} - D\hat{\mathbf{L}}^4,$$

der D er en konstant og $D\hbar^2 \ll 1/2\mu r_0^2$.

- f) Finn energi egenverdiene for slike molekyler.
- g) Finn frekvensene for de fotonene som kan emitteres (eller absorberes) via elektrisk dipolstråling.

Oppgave 10.4, Eksamen V-1992

Et diatomisk molekyl roterer med vinkelfart ω_r om en akse gjennom massemidtpunktet og vinkelrett på forbindelseslinjen mellom atomkjernene. Atomene har masse m_1 og m_2 , og avstanden mellom dem er R_0 .

- a) Finn treghetsmomentet I_{cm} for molekylet om rotasjonsaksen, uttrykt ved R_0 , m_1 , og m_2 . Beregn det klassiske uttrykk for banespinnet L om samme akse og vis at rotasjons energien til molekylet blir

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2I_{cm}}$$

Vi skal nå behandle molekylet kvantemekanisk.

- b) Sett opp Hamilton operatoren for systemet og finn energi egenverdiene. Finn også et uttrykk for energi forskjellen mellom to nabo nivåer.
- c) Et CO molekyl er observert til å absorbere et foton med frekvens $1,15 \times 10^{11}$ Hz. Dette svarer til en overgang fra grunntilstanden i CO molekylet til den første eksiterte rotasjons tilstand. Finn av dette molekylets treghetsmoment.

Et diatomisk molekyl kan også vibrere om likevektstilstanden R_0 langs forbindelseslinjen mellom atomkjernene. Avviket fra likevekt for hver atomkjerne kaller vi ξ_1 og ξ_2 .

- d) Skissé den potensielle energien til molekylet som funksjon av avstanden mellom atomkjernene. Vis at dette for små avvik fra likevekt tilnærmet fører til Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) + \frac{1}{2} K \xi^2 \psi(\xi) = E_{vib} \psi(\xi),$$

Forklar størrelsene som inngår.

- e) Skriv opp energi egenverdiene E_{vib} i vibrasjonsbevegelsen uttrykt ved størrelsene i ligningen ovenfor. Sett også opp uttrykket for vinkelfrekvensen ω_v for vibrasjonen. Hva blir energi forskjellen mellom to nabo nivåer? Hvorfor er laveste vibrasjonsenergi større enn null?
- f) Still opp et uttrykk for molekylets totale energi egenverdier for en samtidig rotasjon og vibrasjons bevegelse.

Eksperimentelt er vinkelfrekvensen for et CO molekyl målt til $\omega_v = 4,03 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$. En gass med CO molekyler blir utsatt for elektromagnetisk stråling med frekvenser i området $\nu = (1,0 \times 10^{12} - 1,0 \times 10^{14}) \text{ s}^{-1}$.

- g) Hvilke utvalgsregler må være oppfylt når molekylerne ved en elektrisk dipol overgang forandrer rotasjons/vibrasjons tilstand?
- h) Gi eksempler på tillatte absorpsjons overganger og beregn den tilhørende absorpsjons energien.

Løsning

- a) Vi velger origo i systemets tyngdepunkt. Tyngdepunkt- og relativ- koordinatene er da bestemt av ligningene

$$-m_1 r_1 + m_2 r_2 = 0, \quad r_1 + r_2 = R_0$$

som gir

$$r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} R_0, \quad r_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} R_0$$

og systemets treghetsmoment blir

$$I_T = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} R_0^2 = \mu R_0^2$$

hvor μ er den reduserte masse for de to partiklene.

Det klassiske uttrykket for banespinnet er gitt ved $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. I rotasjon om tyngdepunktet blir

$$L = r_1 m_1 v_1 + r_2 m_2 v_2 = r_1 m_1 r_1 \omega + r_2 m_2 r_2 \omega \quad (10.75)$$

$$= (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} R_0^2 \omega \quad (10.76)$$

$$= \mu R_0^2 \omega = I_T \omega \quad (10.77)$$

Det klassiske uttrykket for systemets rotasjonsenergi blir

$$H_{kl} = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} \mu R_0^2 \omega^2 \quad (10.78)$$

$$= \frac{1}{2\mu R_0^2} L^2 = \frac{1}{2I_T} L^2 \quad (10.79)$$

- b) Kvantemekanisk får vi

$$\hat{H} = \frac{1}{2I_T} (\hat{\mathbf{L}})^2$$

med egenverdiligning

$$\frac{1}{2I_T} (\hat{\mathbf{L}})^2 \psi = E_l \psi = \frac{1}{2I_T} l(l+1) \hbar^2 \psi$$

med kvantetallet $l = 0, 1, 2, \dots$. Energiavstanden mellom to nabo nivåer blir

$$\Delta E_l = E_l - E_{l-1} = \frac{\hbar^2}{2I} [l(l+1) - (l-1)l] = \frac{\hbar^2}{I} l$$

- c) Overgangen fra grunntilstanden til det første eksiterte $l = 1$ tilstanden gir

$$E_f = hf = E_1 - E_0 = \frac{\hbar^2}{I_T}$$

sombestemmer systemets treghetsmoment til

$$I_T = \frac{\hbar}{4\pi^2 f} = 1,46 \times 10^{-46} \text{ kg m}^2$$

d) Det klassiske likevektspunktet for molekylet bestemmes av

$$\left(\frac{dV(R)}{dR} \right)_{R=R_0} = -\alpha\beta e^{-\beta R_0} + \frac{k}{R_0^2} = 0$$

Vi velger $V(R_0) = 0$ og rekkeutvikler omkring $R = R_0$ (det svarer til $\xi = 0$)

$$V(\xi) \approx \frac{1}{2}\xi^2 \left(\frac{d^2V}{d\xi^2} \right)_{\xi=0} = \frac{1}{2}k\xi^2$$

og Schrödinger ligningen får formen

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} \psi(r) + \frac{1}{2}k\xi^2 \psi(r) = E_{vib} \psi(r),$$

hvor μ er den reduserte masse og E_{vib} energi egenverdien.

e) Løsningen følger fremgangsmåten for en harmonisk oscillator

$$E_{vib}(n) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

med $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$. Energi avstanden mellom to nabo nivå er

$$E_{vib}(n) - E_{vib}(n-1) = \hbar\omega$$

Systemet får en nullpunkts energi

$$E_{vib}(\text{grunntilstand}) = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0.$$

f) Det totale energien blir

$$E = E_{rot} + E_{vib} = \frac{\hbar^2}{2I_T} l(l+1) + (n + 1/2)\hbar\omega$$

g) Utvalgsreglene for elektrisk dipol overganger er $\Delta n = \pm 1$, $\Delta l = \pm 1$ og $\Delta m_l = 0, \pm 1$.

h) Eksempel på overgang

$$(n=0, l=0) \longrightarrow (n=1, l=1): \quad \Delta E = 0,2657 \text{ eV}$$

Oppgave 10.5, Eksamen H-1993

Vi skal i denne oppgaven studere rotasjonstilstander i et to-atomig molekyl.

a) Gi en fysikalsk beskrivelse av et slikt roterende system og sett opp uttrykket for energi egenverdiene. Forklar de forskjellige størrelsene som inngår. Skissé energispektret for rotasjonstilstandene med tilhørende kvantetall.

Hvis et slikt to-atomig molekyl er i en eksitert tilstand gitt ved kvantetallet L for det totale banespinn, vil systemet deeksitere og gå over til en lavere tilstand med totalt banespinn $L-1$ ved utsendelse av et foton.

- b) Vis at frekvensspektret som oppstår når et slikt roterende to-atomig molekyl de-eksiterer ned til grunntilstanden, er ekvidistant, dvs. at spektral linjene har konstant avstand.
- c) For molekylet HCl tilsvarer denne frekvensdifferansen en energi 2.62×10^{-3} eV. Hva er treghetsmomentet I for dette molekylet?
- d) Anta at masse for et H-atom er $1 u$ og massen for Cl er $35 u$ og beregn avstanden mellom disse to atomene i molekylet.

Kort fasit

- a,b) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 10.6 og 10.8 fig 10.16
- c) For overganger mellom den første eksiterte tilstand med $L = 1$ og grunntilstanden kan vi bestemme treghetsmoment parameteren ved

$$\Delta E = \frac{2\hbar^2}{2I} \longrightarrow I = \frac{\hbar^2}{\Delta E} = \underline{2,65 \times 10^{-47} \text{ kg m}^2}.$$

- d) Avstanden mellom H og CL atomene bestemmes ved

$$I = \mu r_0^2 = \frac{M_H M_{Cl}}{M_H + M_{Cl}} r_0^2 = \frac{1u35u}{36u} r_0^2 \longrightarrow r_0 = \underline{1,26 \times 10^{-10} \text{ m}}.$$

Oppgave 10.6, Eksamen H-1994

Vi har et system av to protoner og et elektron. Dette svarer til partiklene i molekyl-ionet H_2^+ . Protonene regner vi som klassiske partikler som er i ro, avstanden mellom dem kaller vi R . Elektronets avstand fra protonene kaller vi r_a og r_b . I oppgaven får vi bruk for å vite at ionisasjonsenergien for et hydrogēn atom i grunntilstanden er 13.6 eV.

- a) Lag en skisse som beskriver systemet og hvor R , r_a og r_b inngår. Skriv opp den kvantemekaniske Hamilton operatoren \hat{H} for systemet. Vi ser her bort fra den kinetiske energien for protonene.

Vi antar nå at protonene er i ro i en innbyrdes avstand R og lar E betegne den laveste energi egenverdien av \hat{H} for denne avstanden. E blir da en funksjon av R , $E = E(R)$.

- b) Skissér kurven $E(R)$ som funksjon av R . Hvilken verdi har E når $R \rightarrow \infty$? Når R velges meget liten (i forhold til elektronets bohr-radius) er E tilnærmet gitt ved

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} - 54,4 \text{ eV}$$

Forklar dette.

- c) Elektronets bølgefunksjon i H_2^+ ionet vil enten ha like eller odde paritet. Forklar hva dette betyr. Tilnærmet kan vi beskrive elektronets bølgefunksjon ved å bruke hydrogēn atomets elektron bølgefunksjoner $\psi_{nlm}(\vec{r})$. Vis hvordan dette gjøres for de to tilfellene med henholdsvis like og odde paritet.
- d) Diskutér hvilken av de to mulighetene som svarer til grunntilstanden og tegn en skisse som viser sannsynlighetstettheten for elektronet langs molekylaksen for hver av de to tilfellene.

Kort fasit

- a) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 10.1 og fig 10.2
- b) $E(R) < 0$ og vokser eksponentielt mot grensen -13.6 eV for $R \rightarrow \infty$. Dette svarer til at elektronet er bundet til et av protonene som et hydrog natom. $E(R) \rightarrow -\infty$ for $R \rightarrow 0$ p a coulomb frast tning mellom protonene.
- For R liten og endelig f r vi coulomb frast tning ($e^2/4\pi\epsilon_0 R$), mens elektronets bindingsenergi til protonene svarer til 4 ganger energien i et hydrog natom $4 \cdot (-13,6) \text{ eV}$.
- c)d) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 10.1

Oppgave 10.7

En model for Natriumklorid (NaCl) er at molekylet best r av to deler – et positivt Na^+ og et negativt Cl^- ion. Anta at det tiltrekkende potensialet mellom ionene er elektrostatiske: $-e^2/r$, hvor r er avstanden mellom ionene. Anta videre at det er et repulsivt ledd i den potensielle energien $V(r)$ som  ker sterk n r elektronstrukturene kommer i kontakt med hverandre og er av formen: $+A/r^n$. Den totale potensielle energien blir da $V(r) = -e^2/r + A/r^n$. Konstantene A og n skal bestemmes.

- a) Finn likevektsavstanden r_0 mellom de to ionene i NaCl molekylet (minimum potensiell energi). Finn V_{min} for $r = r_0$.
- b) Beregn den annenderiverte av $V(r)$ for $r = r_0$. Dette kan betraktes som fj rkonstanten i en harmonisk oscillator approksimasjon for den potensielle energien i n rheten av likevektspunktet.
- c) Bruk de reduserte masser for isotopene Na^{23} og Cl^{35} og beregn energiavstandene av vibrasjonsniv ene i den harmoniske approksimasjonen. Finn ogs  nullpunktsenergien for vibrasjonsbevegelsen.
- d) Likevektsavstanden i $\text{Na}^{23}\text{Cl}^{35}$ er m lt til $2,5 \text{  }$, og frekvensen av str lingen fra en overgang mellom to nabo vibrasjonsniv er er $1,14 \times 10^{13} \text{ Hz}$. Bruk disse verdiene til   bestemme konstantene A og n .
- e) Bruk resultatet ovenfor til   beregne frigj ringsenergien (i eV) for NaCl molekylet i grunntilstanden og til et fritt Na^+ ion og Cl^- ion.

Kapittel 11

KVANTESTATISTIKK

11.1 Uskilbarhet og kvantestatistikk

Dersom vi ønsker å beskrive systemer som består av mange partikler, f.eks. en gass av atomer med 10^{23} partikler, er det klart at vi ikke kan løse Schrödingers likning for et slikt system. Bare det å skrive ned begynnelsesposisjonene til hver partikkel utifra et tre-dimensjonalt koordinat system vil være en tilnærmet håpløs oppgave. Heldigvis er det ikke nødvendig med en detaljert kunnskap om systemet for å kunne bestemme størrelser som midlere energi og posisjon. Grunnen er at det er sammenheng mellom observerbare størrelser og den mest sannsynlige oppførselen til et system slik at en statistisk beskrivelse gir en meget bra approksimasjon. Betingelsen er at systemet har nok partikler og frihetsgrader til at en statistisk beskrivelse er gyldig. Mange av disse begrepene gjennomgås i mer detalj i kurset FYS 114. Her skal vi nøye oss med å betrakte først et system av klassiske partikler i termisk likevekt med omgivelsene ved en gitt temperatur T . Det rekker langt på vei når vi skal prøve å forstå mekanismene bak stimulert emisjon og eksemplet vårt med Helium-Neon laseren.

Et slikt system kan beskrives med teorier fra statistisk fysikk. For en gass av klassiske partikler, er gitte tilstander med energi E beskrevet av en sannsynlighetsfordelingsfunksjon som kalles Boltzmannfordelingen. Vi har et eksempel tidligere i dette kurset, nemlig Maxwells hastighetsfordeling. Kjenner vi sannsynligheten partiklene har for en bestemt energi kan vi beregne størrelser som f.eks. systemets midlere energi.

Vi ser først på et system av klassiske partikler, som i praksis betyr at vi ikke skiller mellom bosoner og fermioner og betrakter partiklene som skilbare. Vi avgrenser oss til to energier, E_1 og E_2 og antar at overgangssannsynligheten for at partiklene kan gå fra tilstand 1 til tilstand 2 er gitt ved $T_{1 \rightarrow 2}$. Tilsvarende har vi en overgangssannsynlighet fra tilstand 2 til tilstand 1 gitt ved $T_{2 \rightarrow 1}$. Dersom det er n_1 partikler i tilstand 1 og n_2 i tilstand 2 er de totale overgangssannsynlighetene gitt ved $n_1 T_{1 \rightarrow 2}$ og $n_2 T_{2 \rightarrow 1}$. Dersom vi antar at det er en balanse ved en gitt temperatur mellom de to overgangssannsynlighetene, det såkalte prinsippet om detaljert balanse, kan vi sette

$$n_1 T_{1 \rightarrow 2} = n_2 T_{2 \rightarrow 1}, \quad (11.1)$$

eller

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{T_{2 \rightarrow 1}}{T_{1 \rightarrow 2}}. \quad (11.2)$$

Boltzmannfordelingen er gitt ved

$$n_{1,2} = A e^{-E_{1,2}/k_B T}, \quad (11.3)$$

hvor $A = e^{-\alpha(T)}$ er en normeringskonstant som avhenger av temperaturen og k_B er Boltzmanns konstant. Innsatt i forholdet mellom sannsynlighetene finner vi

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{e^{-E_1/k_B T}}{e^{-E_2/k_B T}} = \frac{T_{2 \rightarrow 1}}{T_{1 \rightarrow 2}}. \quad (11.4)$$

Dette uttrykket gjelder for klassiske partikler. Dersom partiklene antas å ikke vekselvirke (uavhengige partikler) kan vi anta at sannsynligheten P for å finne et system av n partikler med energi E er gitt ved produktet av alle en-partikkel sannsynlighetene P_1 slik at vi finner

$$P_n = (P_1)^n. \quad (11.5)$$

Dersom systemet vårt består av n identiske bosoner i samme tilstand må vi passe på at bølgefunksjonen skal være symmetrisk. Det gir en faktor $n!$ i tillegg dersom alle n partiklene er i samme tilstand slik at

$$P_n^{\text{boson}} = n! P_n = n! (P_1)^n. \quad (11.6)$$

Legger vi til et boson har vi

$$P_{n+1}^{\text{boson}} = (n+1)! P_{n+1} = (n+1)n! (P_1)^n P_1, \quad (11.7)$$

eller

$$P_{n+1}^{\text{boson}} = (n+1)! P_{n+1} = (n+1) P_1 P_n^{\text{boson}}. \quad (11.8)$$

For å se dette, kan det lønne seg å gå tilbake til definisjonen av en symmetrisk bølgefunksjon for identiske men uskilbare partikler. For to bosoner har vi følgende bølgefunksjon

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2) + \psi_\beta(1)\psi_\beta(2)), \quad (11.9)$$

som gir dersom $\alpha = \beta$

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2), \quad (11.10)$$

slik at sannsynligheten for å finne dette to-partikkelsystemet i en slik tilstand er

$$\Psi_S^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2 \psi_\alpha^*(1) \psi_\alpha^*(2) \psi_\alpha(1) \psi_\alpha(2), \quad (11.11)$$

eller to ganger det klassiske resultatet. For tre partikler har vi seks ledd

$$\begin{aligned} \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= \frac{1}{\sqrt{3!}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3) + \psi_\beta(1)\psi_\gamma(2)\psi_\alpha(3) + \psi_\gamma(1)\psi_\alpha(2)\psi_\beta(3) + \\ &\quad \psi_\gamma(1)\psi_\beta(2)\psi_\alpha(3) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)\psi_\gamma(3) + \psi_\alpha(1)\psi_\gamma(2)\psi_\beta(3)], \end{aligned} \quad (11.12)$$

og settes $\alpha = \beta = \gamma$ har vi

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{6}{\sqrt{3!}} \psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)\psi_\alpha(3), \quad (11.13)$$

og den tilsvarende sannsynligheten blir dermed

$$\Psi_S^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = 3! \psi_\alpha^*(1) \psi_\alpha^*(2) \psi_\alpha^*(3) \psi_\alpha(1) \psi_\alpha(2) \psi_\alpha(3), \quad (11.14)$$

eller $3! = 6$ ganger det klassiske resultatet. Tilstedeværelsen av et boson i en gitt kvantetilstand forsterker dermed sannsynligheten for at flere bosoner vil finnes i samme tilstand. Formen på bølgefunksjonen,

dvs. vårt krav om at den skal være symmetrisk, får dermed fundamentale konsekvenser for materiens oppførsel. Denne føringen gir bla. opphav til en av naturens mest spektakulære faseoverganger, Bose-Einstein kondensasjon (BEC), se f.eks. <http://www.Colorado.EDU/physics/2000/bec/> for mer detaljer vedrørende BEC med atomer.

Vi kan bruke disse resultatene når vi skal studere forholdet

$$n_1 T_{1 \rightarrow 2}^{\text{boson}} = n_2 T_{2 \rightarrow 1}^{\text{boson}}. \quad (11.15)$$

Her er n_1 og n_2 midlere antall bosoner i tilstandene 1 og 2 og $T_{1 \rightarrow 2}^{\text{boson}}$ og $T_{2 \rightarrow 1}^{\text{boson}}$ deres respektive overgangsrater. Disse overgangsratene kan vi uttrykke vha. de klassiske ratene ved simpelthen å multiplisere det klassiske resultatet med en faktor $(1 + n)$. Dvs. at siden det i snitt er n_2 bosoner i tilstand 2 gitt overgangen $1 \rightarrow 2$ så er $T_{1 \rightarrow 2}^{\text{boson}}$ en faktor $(1 + n_2)$ større enn $T_{1 \rightarrow 2}$. Vi har dermed

$$T_{1 \rightarrow 2}^{\text{boson}} = (1 + n_2) T_{1 \rightarrow 2}, \quad (11.16)$$

og

$$T_{2 \rightarrow 1}^{\text{boson}} = (1 + n_1) T_{2 \rightarrow 1}. \quad (11.17)$$

Bruker vi prinsippet om detaljert balanse finner vi

$$n_1 (1 + n_2) T_{1 \rightarrow 2} = n_2 (1 + n_1) T_{2 \rightarrow 1}, \quad (11.18)$$

som kan omskrives

$$\frac{n_1 (1 + n_2)}{n_2 (1 + n_1)} = \frac{e^{-E_1/k_B T}}{e^{-E_2/k_B T}}. \quad (11.19)$$

Siste uttrykk kan skrives som

$$\frac{n_1}{1 + n_1} e^{E_1/k_B T} = \frac{n_2}{1 + n_2} e^{E_2/k_B T}, \quad (11.20)$$

og vi ser at venstre side er uavhengig av tilstand 2 og høyre side er uavhengig av tilstand 1. Den felles verdien for begge sider kan derfor ikke involvere egenskaper som er spesielle for enten den eller den andre tilstanden. Det er kun en størrelse som er felles, og det er temperaturen T . Vi setter derfor begge uttrykk lik en felles normeringskonstant $e^{-\alpha(T)} = e^{-\alpha}$ slik at

$$\frac{n_1}{1 + n_1} e^{E_1/k_B T} = e^{-\alpha}, \quad (11.21)$$

som gir

$$\frac{n_1}{1 + n_1} = e^{-(\alpha + E_1/k_B T)}, \quad (11.22)$$

eller

$$n_1 \left[1 - e^{-(\alpha + E_1/k_B T)} \right] = e^{-(\alpha + E_1/k_B T)}, \quad (11.23)$$

som resulteter i

$$n_1 = \frac{e^{-(\alpha + E_1/k_B T)}}{1 - e^{-(\alpha + E_1/k_B T)}}. \quad (11.24)$$

Det siste uttrykket kan omskrives til

$$n_{\text{boson}}(E, T) = \frac{1}{e^{(\alpha + E/k_B T)} - 1}, \quad (11.25)$$

som er fordelingsfunksjone for bosoner som gir det gjennomsnittlige antall bosoner i en gitt tilstand med energi E ved temperatur T .

Dersom vi ser på fermioner, må vi passe på at den totale bølgefunksjonen skal være antisymmetrisk med tanke på ombytte av to partikler. Det medfører at

$$T_{1 \rightarrow 2}^{\text{fermion}} = (1 - n_2)T_{1 \rightarrow 2}, \quad (11.26)$$

og

$$T_{2 \rightarrow 1}^{\text{fermion}} = (1 - n_1)T_{2 \rightarrow 1}. \quad (11.27)$$

Gjentar vi samme beregning som vi foretok for bosoner finner vi fordelingsfunksjonen for fermioner gitt ved

$$n_{\text{fermion}}(E, T) = \frac{1}{e^{(\alpha + E/k_B T)} + 1}, \quad (11.28)$$

som gir midlere antall fermioner i en tilstand E i likevekt ved en temperatur T .

Det er en egenskap ved disse tre fordelingsfunksjonene som er verdt å huske. Dersom energien for f.eks. en eksitert tilstand er mye større enn $k_B T$, dvs. $E \gg k_B T$ ser vi at

$$n_{\text{fermion}}(E, T) \approx n_{\text{boson}}(E, T) \approx n_{\text{boltzmann}}(E, T) \ll 1, \quad (11.29)$$

som betyr også antall partikler per kvantetilstand E mer mye mindre enn 1.

Som eksempel kan vi tenke oss en gass hydrogenatomer ved romtemperatur, $T = 300$ K. Setter vi inn Boltzmanns konstant $k_B = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eVK}^{-1}$ finner vi at $k_B T = 0.026 \text{ eV}$. Dersom hydrogenatomene er i sin første eksiterte tilstand med energi $E_2 = -3.4 \text{ eV}$, finner vi at forholdet mellom grunntilstanden med $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ og den første eksiterte tilstanden E_2 er gitt ved når vi bruker Boltzmanns fordeling

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{e^{3.4/0.026}}{e^{13.6/0.026}} \approx 0! \quad (11.30)$$

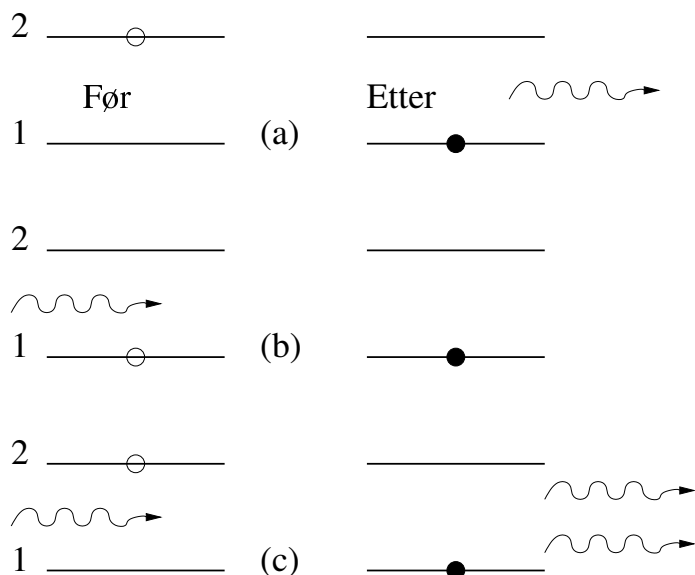
Skal vi ha et tall som er lite men forskjellig fra null bør vi finne overgangen med mindre energiforskjeller dersom vi ønsker å studere overganger ved romtemperatur. Vi skal se nærmere på det i siste avsnitt i eksemplet med Helium-Neon laseren.

11.2 Emisjon, absorpsjon og stimulert emisjon

Vi så i forrige avsnitt at det relative antallet partikler per kvantetilstand ved to forskjellige temperaturer for et system i termisk likevekt kan approksimeres ved Boltzmann fordelingen dersom vi se på en fortynnet gass av enten bosoner eller fermioner. Vi skal benytte oss av dette i vår forståelse av laseren, som er en forkortelse for **light amplification by stimulated emission of radiation**, lysforsterkning ved stimulert emisjon av stråling. En maser er det tilsvarende systemet, men da med stråling i mikrobølgeområdet til det elektromagnetiske spektrum.

For å forstå laseren trenger vi å skille mellom tre typer prosesser, spontan emisjon, stimulert absorpsjon og stimulert emisjon av elektromagnetisk stråling. Vi har sett på den første prosessen tidligere. Figur 11.1 viser disse prosessene. Ved spontan emisjon er atomet i den øvre tilstanden E_2 og henfaller til tilstanden med energi E_1 med utsending av et foton med frekvens $\nu = (E_2 - E_1)/h$. Den typiske levetid for en eksitert tilstand er ganske liten, typisk mindre enn 10^{-8} s. Dersom vi skal lage en laser er vi avhengig av en tilstand med lengre levetid, såkalte metastabile tilstander, her kan levetida være opp til 10^{-3} s.

I stimulert absorpsjon stimuler et innkommende foton med frekvens $\nu = (E_2 - E_1)/h$ atomet til å gjøre en overgang fra tilstanden E_1 til tilstanden E_2 . I stimulert emisjon derimot, er atomet i tilstanden E_2 . Et



Figur 11.1: Illustrasjon av (a) spontan emisjon, (b) stimulert absorpsjon og (c) stimulert emisjon av elektromagnetisk stråling.

innkommende foton med frekvens $\nu = (E_2 - E_1)/h$ stimulerer atomet i tilstanden E_2 til å sende ut et foton med samme frekvens samtidig som det henfaller til tilstand E_1 . Vi får da to utkommende fotoner med samme frekvens, en forsterkning dermed.

Disse tre prosessene vil forekomme med en viss sannsynlighet og forholdet mellom de respektive sannsynlighetene er avgjørende for virkemåten til en laser. Vi antar at vi har en gass av atomer ved gitt temperatur og gitt antall partikler. Spektret til den elektromagnetiske strålingen er gitt ved $\rho(\nu)$. Vi begrenser oss til en to-nivå model med energier E_1 og E_2 , hvor $E_2 > E_1$. Vi antar også at det finnes n_1 atomer med energi E_1 og n_2 atomer med energi E_2 .

For spontan emisjon har vi ikke tilstede elektromagnetisk stråling før emisjon. Vi antar at denne overgangen kan skrives vha. en overgangssannsynlighet A_{21} som avhenger av tilstandene 1 og 2. For stimulert absorpsjon finnes det en bestemt energifordeling for fotonene (som er bosoner). Vi skal vise at regningen vår gir oss Plancks fordeling for frekvensspektret til fotonene, dvs. frekvensfordelingen for et svart legeme. Vi setter prosessen for stimulert absorpsjon lik

$$T_{1 \rightarrow 2} = B_{12}\rho(\nu). \quad (11.31)$$

Faktoren B_{12} er som A_{12} en faktor som avhenger av tilstandene 1 og 2.

For stimulert emisjon må vi også ta hensyn til at det kan foregå spontan emisjon, det betyr at overgangssannsynligheten for stimulert emisjon er gitt ved

$$T_{2 \rightarrow 1} = A_{21} + B_{21}\rho(\nu). \quad (11.32)$$

Setter vi opp likningene for detaljert balanse mellom absorpsjon og dermed overgangen $\rightarrow 2$ og total

emisjon fra $2 \rightarrow 1$ har vi

$$n_1 T_{1 \rightarrow 2} = n_2 T_{2 \rightarrow 1}, \quad (11.33)$$

som gir

$$n_1 B_{12} \rho(\nu) = n_2 (A_{21} + B_{21} \rho(\nu)), \quad (11.34)$$

og løser vi med tanke på $\rho(\nu)$ finner vi

$$\rho(\nu) = \frac{A_{21}/B_{21}}{(n_1/n_2)(B_{12}/B_{21}) - 1}, \quad (11.35)$$

og med Boltzmann fordelingen

$$\frac{n_1}{n_2} = e^{(E_2 - E_1)/k_B T} = e^{h\nu/k_B T}, \quad (11.36)$$

finner vi

$$\rho(\nu) = \frac{A_{21}/B_{21}}{e^{h\nu/k_B T}(B_{12}/B_{21}) - 1}. \quad (11.37)$$

Denne frekvensfordelingensfunksjonen må være konsistent med Plancks strålingslov for et svart legeme som er gitt ved

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (11.38)$$

Det gir

$$\frac{B_{12}}{B_{21}} = 1, \quad (11.39)$$

og

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}. \quad (11.40)$$

Det var Einstein som utledet disse forholdene i 1917. Derfor kalles koeffisientene A og B for Einstein koeffisientene. Vi finner kun forholdet mellom koeffisientene. For å beregne de eksakte verdiene må vi foreta en kvantemekanisk beregning hvor vi benytter bølgefunksjonen for å beregne en kvantemekanisk forventningsverdi.

Det er mye interessant fysikk i de to siste likningene. Vi ser at koeffisientene for stimulert emisjon og absorpsjon er like og at forholdet mellom spontan emisjon og stimulert emisjon varierer som funksjon av ν^3 . Det betyr at jo større energiforskjellen er mellom to tilstander desto større sannsynlighet har vi for spontan emisjon. Vi kan alternativt uttrykke dette forholdet vha.

$$\frac{A_{21}}{B_{21}\rho(\nu)} = e^{h\nu/k_B T} - 1. \quad (11.41)$$

Dersom $h\nu \gg k_B T$ for atomer i termisk likevekt ved en temperatur T , så vil spontan emisjon dominere over stimulert emisjon. Dette er tilfelle for de fleste atomer og molekyler. Stimulert emisjon blir viktig dersom $h\nu \approx k_B T$ eller $h\nu \ll k_B T$.

Vi kan nå uttrykke forholdet mellom total emisjon og absorpsjon som

$$\frac{\text{emisjonsrate}}{\text{absorpsjonsrate}} = \frac{n_2(A_{21} + B_{21}\rho(\nu))}{n_1 B_{12}\rho(\nu)}, \quad (11.42)$$

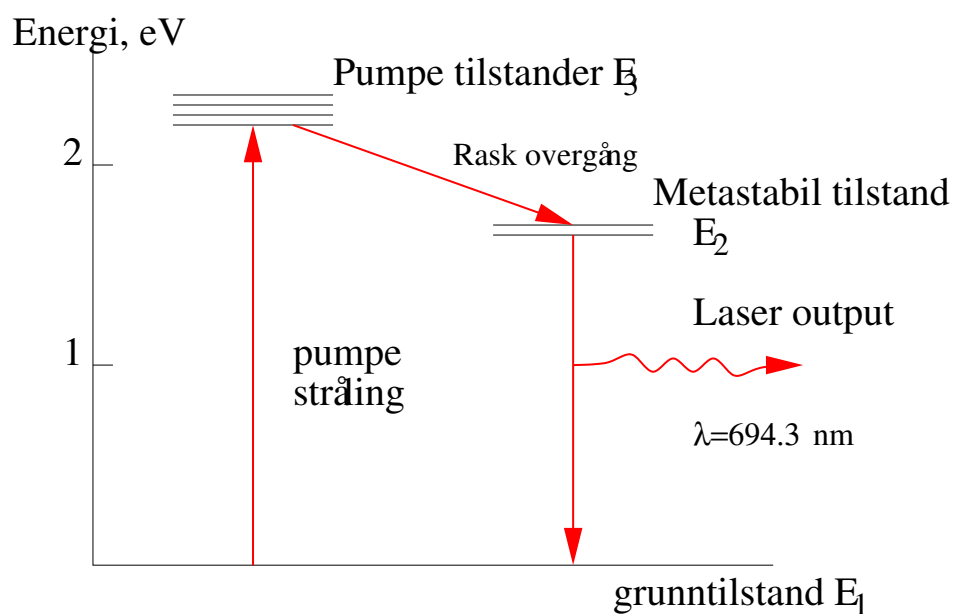
som resulterer i

$$\frac{\text{emisjonsrate}}{\text{absorpsjonsrate}} = \left[\frac{A_{21}}{B_{21}\rho(\nu)} + 1 \right] \frac{n_2}{n_1}. \quad (11.43)$$

Dersom $h\nu \approx k_B T$ eller $h\nu \ll k_B T$ finner vi

$$\frac{\text{emisjonsrate}}{\text{absorpsjonsrate}} \approx \frac{n_2}{n_1}. \quad (11.44)$$

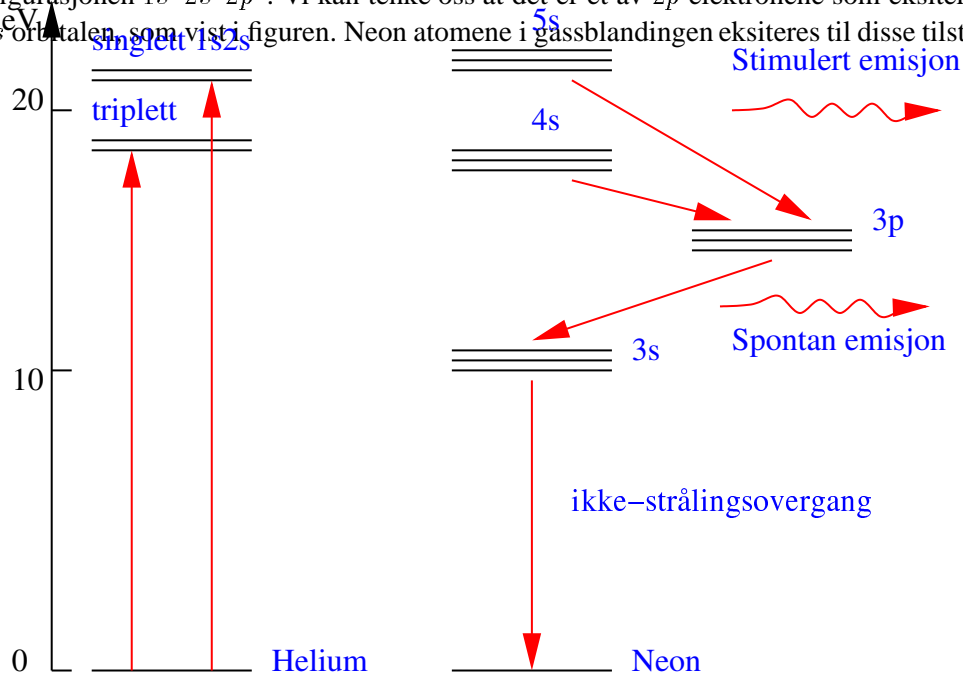
Dersom vi har termisk likevekt må vi kunne anta at $n_1 > n_2$. Kan vi ha flere atomer i tilstandene n_2 vil emisjon dominere over absorpsjon. Det betyr at den elektromagnetiske strålingen med frekvens $\nu = (E_2 - E_1)/h$ vil forsterkes, mer kommer ut enn det som sendes inn. Men, antallet atomer i den eksiterte tilstanden vil reduseres til likevekt igjen etableres. For at emisjon skal dominere over absorpsjon, må vi opprettholde et antall atomer i tilstand 2 som er større enn i tilstand 1. Dette kalles også populasjonsinversjon. Lasere og masere er anretninger som gjør dette, typisk ved det som kalles optisk pumping hvis output er en intens koherent og monokromatisk stråle. Et eksempel på en laser som virker etter denne måten er Rubidumlaseren, den første laseren som blei laget, i 1960. Dens skjematiske virkemåten er vist i Figur 11.2



Figur 11.2: Illustrasjon av virkemåten til en rubidumlaser som sender ut monokromatisk stråling med bølgelengde $\lambda = 694.3 \text{ nm}$.

11.3 Helium-Neon laseren

I 1961 blei helium-neon laseren presentert. Dette er en gasslaser hvor mekanismen bak populasjonsinversjon er forskjellig fra rubidiumlaseren. Figur 11.3 viser de ulike eksiterte tilstandene som er viktige for virkningen av helium-neon laseren. Vær obs på at eksitasjonsspektret til både helium og neon er mye mer komplisert enn vist på figuren. De eksiterte tilstandene i helium som er av interesse er de første triplett og singlett tilstandene, med spektroskopisk notasjon henholdsvis 3S_1 og 1S_0 med eksitasjonsenergier 19.72 eV og 20.61 eV. Her kan vi tenke oss at et av elektronene er eksistert til $2s$ orbitalen, slik at elektronkonfigurasjonen er $1s^1 2s^1$. Begge tilstandene er metastabile da elektriske dipoloverganger til grunntilstanden er forbudte. Neon har to grupper eksiterte tilstander med energi, med liten energiforskjell, nær de to tilstandene i helium, med energier på henholdsvis 19.83 eV og 20.66 eV. I grunntilstanden har neon konfigurasjonen $1s^2 2s^2 2p^6$. Vi kan tenke oss at det er et av $2p$ elektronene som eksiteres til enten $4s$ eller $5s$ orbitalen, som vist i figuren. Neon atomene i gassblandingen eksiteres til disse tilstandene via



Figur 11.3: Illustrasjon av helium-neon laseren.

kollisjoner med eksiterte heliumatomer. Den kinetiske energien til heliumatomene sørger for den ekstra energiforskjellen, ca. 0.05 eV, som trengs for å eksitere neonatomene. Det finnes ytterligere en eksitert tilstand for neon med energi 18.70 eV over grunntilstanden og 1.96 eV under tilstanden med 20.66 eV. Denne tilstanden har elektronkonfigurasjonen $1s^2 2s^2 2p^5 3p^1$. Denne tilstanden er normalt ikke okkupert og populasjonsinversjon mellom disse eksiterte tilstandene forekommer umiddelbart. Den stimulerte

emisjonen som foregår mellom disse tilstandene resulterer i utsendte fotoner med energi 1.96 eV og bølgelengde $\lambda = 632.84$ nm, som produser rødt lys. Etter stimulert emisjon, henfaller atomene spontant til den lavereliggende tilstanden med elektronkonfigurasjon $1s^2 2s^2 2p^5 3s^1$ og fotoner med utsendt bølgelengde $\lambda \approx 600$ nm. Dette henfallet etterfølges av ikke-strålings deeksitasjoner (typisk via kollisjoner) tilbake til grunntilstanden.

I helium-neon laseren har vi 4 tilstander som er involvert i produksjonen av stråling med $\lambda = 632.84$ nm. For rubidiumlaseren har vi kun tre tilstander. For en trenivålaser er populasjonsinversjon vanskeligere å få til da mer enn halvparten av atomene som er i grunntilstanden må eksiteres. I helium-neon laseren er det lettere å få til populasjonsinversjon da tilstanden som nås etter stimulert emisjon ikke er grunntilstanden, men en eksitert tilstand slik at antall atomer i grunntilstanden kan holdes lavt.

Kapittel 12

KJERNE OG PARTIKKELFYSIKK

12.1 Kjernefysikk

12.2 Nukleosyntese

12.3 Partikkelfysikk

12.4 Kosmologi

12.5 Oppgaver

12.5.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 12.1

Vi skal i denne oppgave studere følgende radioaktive desintegrasjons prosess



hvor substansen A har en desintegrasjonskonstant λ_A , B en desintegrasjonskonstant λ_B , mens substansen C er stabil. Ved tiden $t = 0$ har vi N_0 atomkjerne av type A og ingen av typen B eller C.

- a) Finn antall kjerner av type A – N_A som funksjon av tiden t .
- b) Finn antall kjerner av type B – N_B som funksjon av t .
- c) Finn antall kjerner av type C – N_C som funksjon av t .

Oppgave 12.2

Vi skal i denne oppgaven studere kjernereaksjonen $a + A \longrightarrow B + b$. Prosjektilet a med masse m_a har kinetisk energi E_k , mens målsystemet A med masse M_A ligger i ro. Vi forutsetter at vi kan behandle problemet ikke-relativistisk.

- a) Vis at den totale kinetiske energien i tyngdepunkt systemet er

$$\frac{M_A}{M_A + m_a} E_k$$

- b) Sett opp den formelle definisjonen for Q -verdien for reaksjonen.
- c) Vis at den totale energien tilgjengelig for kjernereaksjonen $A(a, b)B$ er

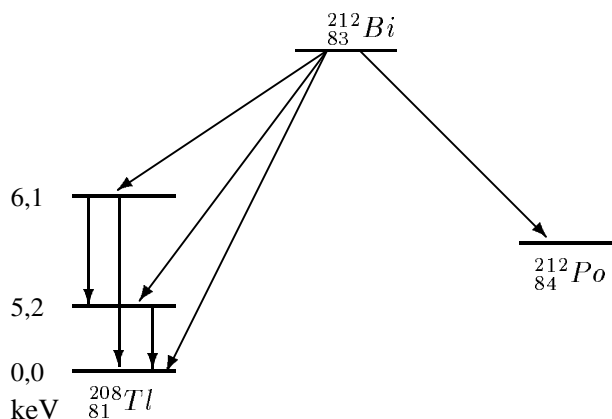
$$Q + \frac{M_A}{M_A + m_a} E_k$$

- d) Finn den minste kinetiske energien E_k for prosjektilet a i lab-systemet som gjør kjernereaksjonen mulig i det tilfelle at $Q < 0$

Oppgave 12.3

En berylliumkjerne ${}^9_4\text{Be}$ som ligger i ro, utsettes for stråling av α -partikler med kinetisk energi $K_\alpha = 5,3 \text{ MeV}$. I den resulterende kjernereaksjon produseres et foton γ og en ukjent kjerne X .

- a) Identifisér den ukjente kjernen X ved bruk av de bevaringslover man kjenner for slike kjernereaksjoner.
- b) Hva blir Q -verdien for denne reaksjonen i MeV?
- c) Beregn energien til fotonet hvis det beveger seg fremover i samme retning som den innkommende α -partikkelen.



Figur 12.1: Desintegrasjonskanaler for ${}^{212}\text{Bi}$.

Oppgave 12.4

Atomkjernen ${}^{212}\text{Bi}$ er radioaktiv. I figur 12.1 er vist noen av de desintegrasjonskanalene som er mulige for ${}^{212}\text{Bi}$.

- a) Gi en kort forklaring på hvilke prosesser som er vist i figur 12.1 og sett opp reaksjons ligningene. Hvilke generelle prinsipper bestemmer prosessenes forløp.

Vi skal nå tenke oss at den radioaktive strålingen blir analysert for å bestemme energi fordelingen.

- b) Hvordan ser energi fordelingen ut for de forskjellige typer stråling vist i figur 12.1? Bruk massetabellen i begynnelsen av oppgavesettet til å beregne energien av strålingen. Vi ser bort fra mulig rekyl energi.
- c) Vis at baryontall og leptontall er bevart i reaksjonen $^{212}\text{Bi} \longrightarrow ^{212}\text{Po}$ i figur 12.1.

Oppgave 12.5

- a) Baryonet Λ er ustabilt. Ved tiden $t = 0$ har vi N_0 Λ partikler. Utled formelen $N(t) = N_0 \exp(-\lambda t)$ som bestemmer antall Λ partikler som funksjon av tiden t .
- b) Definer størrelsene midlere levetid τ og halveringstid $t_{1/2}$. Finn sammenhengen mellom disse størrelser og desintegrasjonskonstanten λ .
- c) Vi ser på reaksjonen $p + p \longrightarrow p + \Lambda + X$. Hvilke kvantetall må være bevart i reaksjonen? Hvilken partikkel må X være?
- d) Vi ser på reaksjonen i punkt c) i massesentersystemet der de to protonene med masse m_p kolliderer med like store og motsatt rettede bevegelsesmengder p_0 . Finn et uttrykk for den minste verdien p_0 kan ha for at reaksjonen skal kunne skje.
- e) Vi ser på reaksjonen i punkt c) i laboratoriesystemet der det ene protonet har bevegelsesmengden p_0 , mens det andre ligger i ro. Finn et uttrykk for den minste verdien p_0 kan ha for at reaksjonen skal kunne skje.

Oppgave 12.6

Aktiviten $R = |dN/dt|$ av Carbon i levende materie er $0,007\mu\text{ Ci}$ pr. kg. Dette skyldes isotopen C^{14} . Trekull funnet blant bålrester i en indiansk teltleir viste en aktivitet på $0,0048\mu\text{ Ci}$ pr. kg. Anta at halveringstiden for C^{14} er 5730 år. Beregn hvor mange år det er siden denne teltleiren har vært i bruk.

Oppgave 12.7

Finn et uttrykk for p_{\min} for reaksjonen

$$p_1 + p_2 \longrightarrow p_1 + p_2 + \pi^0$$

der p_1 har bevegelsesmengden p_0 , og p_2 ligger i ro i laboratoriesystemet.

Oppgave 12.8

Hvilke konserveringsregler gjør følgende reaksjoner (u)mulige?

$$\begin{aligned} p + p &\longrightarrow p + \gamma \\ p + p &\longrightarrow p + p + e^- \\ p + p &\longrightarrow \pi + p + p \\ p + p &\longrightarrow p + p + K^+ \\ p + p &\longrightarrow p + p + K^+ + K^0 \\ p + p &\longrightarrow e^+ + e^- \\ p + p &\longrightarrow e^+ + e^- + \mu^+ \\ p + p &\longrightarrow e^+ + e^- + \nu \end{aligned}$$

Oppgave 12.9

- Forklar hvordan mesoner og baryoner settes sammen av kvarker. Hva er kvarkinnholdet i protoner, nøytroner, π -mesoner (π^+ , π^0 , π^-) og Λ^0 partiklene?
- Har det noen gang blitt observert en fri kvark? Gi forslag til forklaring.
- Λ^0 desintegrerer ofte til $p + \pi^-$. Hvilke kvantetall er ikke bevart i denne reaksjonen?
- Sett opp de ligningene som er nødvendige til å bestemme den kinetiske energien til protonet og π^- -mesonet i prosessen diskutert i c) når vi antar at Λ er i ro før desintegrasjonen.

Oppgave 12.10

Vi skal i denne oppgaven studere radioaktive atomkjerner.

- Hvis antallet radioaktive atomkjerner med desintegrasjonskonstant λ ved tiden $t = 0$ er N_0 , utled formelen for antallet radioaktive atomkjerner $N(t)$ ved tiden $t > 0$.
- Finn sammenhengen mellom λ , den midlere levetid \bar{t} og halveringstiden $t_{1/2}$.
- Definér aktivitetet R og finn $R(t)$.
- Et radioaktivt element med desintegrasjonskonstant λ blir produsert i en reaktor i et konstant antall A pr. sec.. Vis at etter en tid t er antallet radioaktive kjerner $N_A(t)$ gitt ved ligningen

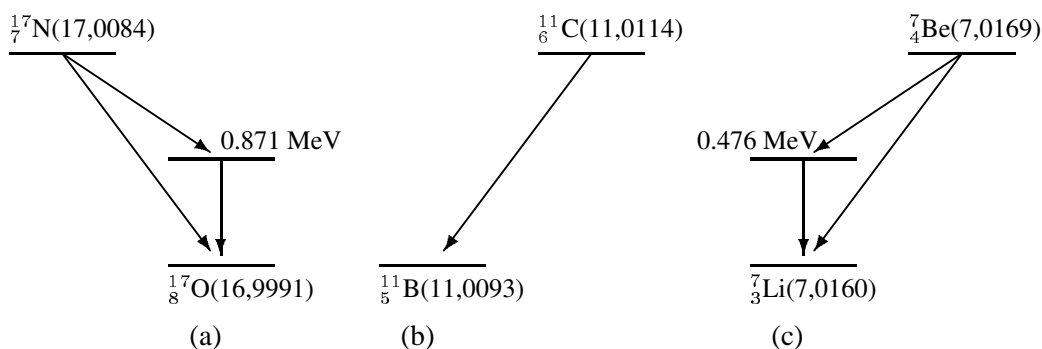
$$N_A(t) = \frac{A}{\lambda} (1 - \exp(-\lambda t)).$$

- Det vil oppstå likevekt mellom produksjon og desintegrasjon av det radioaktive elementet. Finn denne likevektsverdi. Hvor lang tid t vil det gå før antallet radioaktive elementer er halvdelen av likevektsverdien?

Oppgave 12.11

Mange atomkjerner er ustabile. Etter en viss tid vil de desintegrere. I fig. 12.2 er vist tre eksempler på slike prosesser. I fig. 12.2 (a) er to tilstander i $^{17}_8\text{O}$ angitt, grunntilstanden og en eksitert tilstand, 0,871 MeV over grunntilstanden. Samme tilfelle har vi i fig. 12.2 (c) for ^7_3Li hvor den eksiterte tilstand har energi 0,476 MeV. Tallene i parentes er de atomære massene i enheten $u = 931,478$ MeV.

- Gi en kort forklaring på hvilke prosesser som er vist i fig. 12.2 (a) og forklar hvilke generelle prinsipper som bestemmer prosessenes forløp. Sett opp reaksjonsligningene og beregn energi av den utgående stråling i de tre tilfellene.
- Gjenta det samme for prosessen beskrevet i fig. 12.2 (b).
- Gjenta det samme for prosessen beskrevet i fig. 12.2 (c).

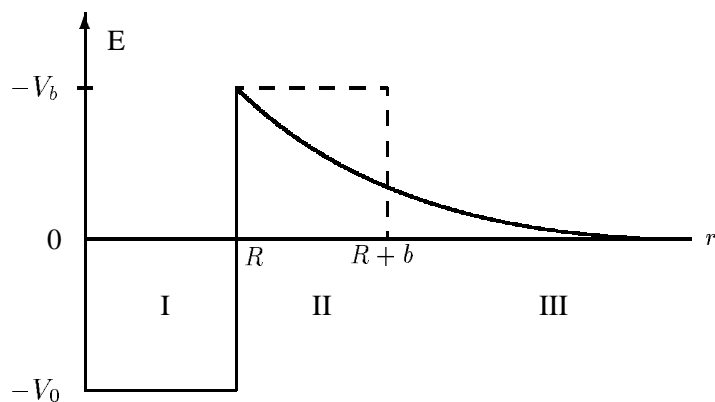


Figur 12.2: Radioaktiv desintegrasjon

Oppgave 12.12

Radioaktive kjerner er ustabile og sender ut bl. a. α partikler ($\alpha = {}^4_2\text{He}$). Ett eksempel er $^{232}_{92}\text{U}$ som går over til Thorium med en halveringstid på 72 år.

- Sett opp reaksjonsligningen i det generelle tilfelle og spesielt for $^{232}_{92}\text{U}$ ved utsendelse av en α partikkel.
- Utleid loven for radioaktiv desintegrasjon og finn sammenhengen med halveringstiden $T_{1/2}$.

Figur 12.3: Kvantemekanisk model for utsendelse av en α partikkel

I teorien for α desintegrasjon antar man at slike partikler eksisterer inne i atomkjernen. For å slippe ut må de gå gjennom en potensialbarriere. Vi kan forestille oss dette som et 1-dimensjonalt kvantemekanisk problem hvor den potensielle energien har formen som vis i fig. 12.3.

- Hvordan forklarer vi potensialbarrierens høyde V_b ?

Vi skal nå diskutere det kvantemekaniske problemet for en α -partikkel i potensialfeltet gitt i fig. 12.3. For å forenkle beregningen bruker vi imidlertid det stiplede potensialet.

- d) Sett opp Schrödingerligningen for hvert av de tre områdene

$$\text{I: } 0 < r < R, \quad \text{II: } R < r < R + b, \quad \text{III: } R + b < r < \infty,$$

og finn løsningen med integrasjonskonstanter.

- e) Sett opp de betingelser som bestemmer relasjonen mellom integrasjonskonstantene. Konstantene skal ikke finnes eksplisitt.
- f) Nevn rent kvalitativt hva som bestemmer halveringstiden.

Oppgave 12.13

- a) En partikkel med hvilemasse $m > 0$ og bevegelsesmengde $p > 0$ støter mot en annen partikkel som har samme hvilemasse og som ligger i ro. Er det kinematisk mulig at de to partikler fortsetter etter støtet sammen som ett system med hvilemasse $M = 2m$? Begrunn svaret ved å regne både klassisk og relativistisk.
- b) Hvordan desintegrerer et fritt nøytron? Hvilken type vekselvirkning forårsaker denne desintegrasjonen? Hvorfor kan ikke et fritt proton desintegrere på lignende måte?
- c) Hva er isospinnet for protonet, nøytronet, π -mesonene og Λ^0 ? Hvilke vekselvirkninger forårsaker reaksjonene

$$\begin{aligned} \pi^0 + p &\rightarrow \pi^+ + n \\ \Lambda^0 &\rightarrow p + \pi^- \end{aligned}$$

Vis at isospinnets tredjekomponent er bevart i den ene av de to reaksjoner, men ikke i den andre. Er resultatet i overensstemmelse med de to typer vekselvirkning? Hva er kvarkinnholdet av et proton, et nøytron, π -mesonene og Λ^0 ?

- d) Hvilke av følgende reaksjoner er forbudt, og i tilfelle hvorfor?

$$\begin{aligned} p + p &\rightarrow p + p + n, \\ p + p &\rightarrow p + n, \\ p + p &\rightarrow p + p + \pi^0, \\ p + p &\rightarrow e^+ + e^+, \\ e^- + p &\rightarrow e^- + p + \gamma, \\ e^- + p &\rightarrow \nu_\mu + n \end{aligned}$$

Oppgave 12.14

- a) Forklar kort hva som menes med bindingsenergi til en atomkjerne med massetall A og ladning Z . Gitt Weizsäcker semi-empiriske masseformel for bindingsenergi $B_W(Z, A)$ til en kjerne med massetall A og ladning Z

$$B_W(Z, A) = C_1 A - C_2 A^{2/3} - C_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} - C_4 \frac{(A - 2Z)^2}{A}.$$

Gi en kort fysisk begrunnelse for de enkelte ledd.

Vi velger verdiene for de enkelte konstantene til å være

$$C_1 = 15,56 \text{ MeV}, C_2 = 17,23 \text{ MeV}, C_3 = 0,70 \text{ MeV} \text{ og } C_4 = 23,29 \text{ MeV}.$$

- b) Forklar kort hva som menes med Q -verdien for en kjernereaksjon. Sett opp Q_α verdien for en spontan α -partikkel desintegrasjon.

Vi skal nå bruke Weizsäcker's semi-empiriske masseformel for bindingsenergien $B_W(Z, A)$ fra a) til å beregne Q_α .

- c) For store verdier av A og Z , vis at vi kan approksimere den frigjorte energien når en kjerne med gitt A, Z spontant emitterer en α -partikkel, til

$$Q_\alpha \approx -4C_1 + \frac{8}{3}C_2 \frac{1}{A^{1/3}} + 4C_3 \frac{Z(1-Z/3A)}{A^{1/3}} - 4C_4 \frac{(N-Z)^2}{A^2} + BE({}_2^4\text{He}),$$

hvor $BE({}_2^4\text{He}) = 28,3 \text{ MeV}$ er bindingsenergien til He. Hjelp: Bruk binomial utviklingen for ledd av typen

$$(A - x)^{n/m} \approx \left(1 - x \frac{n}{mA}\right) A^{n/m}.$$

- d) To naturlig forekommende isotoper av sølv og gull er ${}_{47}^{107}\text{Ag}$ og ${}_{79}^{197}\text{Au}$. Bruk resultatene fra c) og diskuter stabiliteten til disse kjernene med tanke på α -partikkel desintegrasjon.
- e) ${}_{92}^{235}\text{U}$ kan fisjonere spontant. Beregn ved hjelp av formelen i a) den frigjorte energien i reaksjonen ${}_{92}^{235}\text{U} \rightarrow {}_{35}^{87}\text{Br} + {}_{57}^{145}\text{La} + 3n$. Hvilket ledd i den semi-empiriske masseformelen gir størst bidrag til forandringen i bindingsenergien?

Kapittel 13

FASTSTOFFFYSIKK

13.1 Halvledere og transistorer

13.2 Superledning og superfluiditet

13.3 Oppgaver

13.3.1 Analytiske oppgaver

Oppgave 13.1

Kobber er en god elektrisk leder. Ved romtemperatur er resistiviteten målt til $\rho = 1,7 \cdot 10^{-8} \Omega m$. Egenvekten er $8,96 \text{ g/cm}^3$. Hvert kobberatom bidrar med ett ledningselektron.

- a) Beregn tettheten av ledningselektroner i metallisk kobber.
- b) Finn midlere termisk hastighet \bar{v} og midlere kollisjonslengde L fra den klassiske Drudemodellen for elektronene i metallet.
- c) Fermienergien for elektronene i kobber er 7,0 eV. Hva gir nå den kvantemekaniske elektronmodellen for de to størrelsene i punkt b)?

Kapittel 14

KVANTEDATAMASKINER

It would appear that we have reached the limits of what it is possible to achieve with computer technology, although one should be careful with such statements, as they tend to sound pretty silly in five years. *John von Neumann*

For bare et knapt tiår siden, inngikk mange av de sidene ved kvantemekanikken som har vært med å definere det nå allerede omfangsrike forskningsfeltet om kvantedatamaskiner og kvanteinformasjonsteori, som en del av filosofiske diskusjoner om kvantemekanikkens begrensninger, paradokser, implikasjoner om vår forståelse av naturen. I de siste fem år, til manges overraskelse, har grunnleggende sider av kvantemekanikken slik som superposisjonsprinsippet¹, Schrödingers katt tilstander, lokal virkelighets beskrivelse kontra 'spooky action at distance' og kvante entanglement² danna grunnlaget for den rivende utviklinga vi ser i f.eks. kvante informasjonsteori, fra felt som kvantekryptering, kvante teleportasjon, helt nye algoritmer for rask søking i databaser, til kvantenettverk til vakre eksperimentelle realiseringer av kvantekretser.

Dette er et felt i rivende utvikling, og ingen kan med sikkerhet si hvordan feltet vil se ut om bare noen få år, men at det representerer et hav av fantastiske muligheter er neppe å ta munnen for full. Framtida tilhører dere!

Her vil dere bare få en sterkt kondensert oversikt, mer informasjon kan dere finne på f.eks. www.qubit.org, www.quantum.at eller www.iu.hio.no/data/quantum.html med flere linker til liknende steder.

Det er to viktige spørsmål som reiser seg i tilknytting enhver ny teknologi. Det første er: Hva kan en kvantedatamaskin gjøre i tillegg til en vanlig datamaskin? Hittil har følgende områder pekt seg

- Kvanteeinformasjonsteori, ny måte å tenke informasjonsteori på .
- Kvanteealgoritmer til kryptering og søking i store databaser.
- Simulering av fysiske systemer i langt større skala enn dagens maskiner.
- Raskere søking i store databaser.
- Bra utgangspunkt for parallellisering pga. superponering av kvantemekaniske tilstander.
- Operere med mye større datamengder

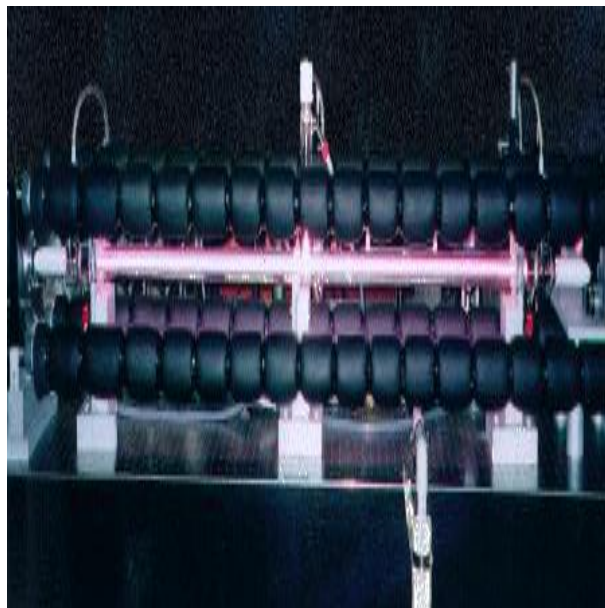
¹Husk at dette har sitt opphav i de Broglie sitt postulat om materiens bølge og partikkel natur.

²Som så ofte, henfaller jeg til anglosaksiske ord eller deres latiniserte varianter. Entanglement er en fri oversettelse av det tyske ord Verschränkung, å legge i kryss, første gang introdusert av Schrödinger i 1935 for å beskrive sammensatte kvantetilstander.

- Generere virkelige vilkårlige tall.
- Teleportasjon?
- ...

Det andre spørsmålet retter søkelyset mot om vi overhodet kan lage en kvantedatamaskin. Per dags dato finnes det flere metoder til å lage kvantemekaniske kretser, hvor følgende er blant de mest lovende

- Ionefelle baserte kretser
- Quantum dots, et eller flere elektroner som er fanga inn i små områder mellom halvlederlag
- Hulroms kvanteelektrodynamikk (Cavity QED)
- Kjernemagnetisk resonans (NMR)
- Supraledende Qubits

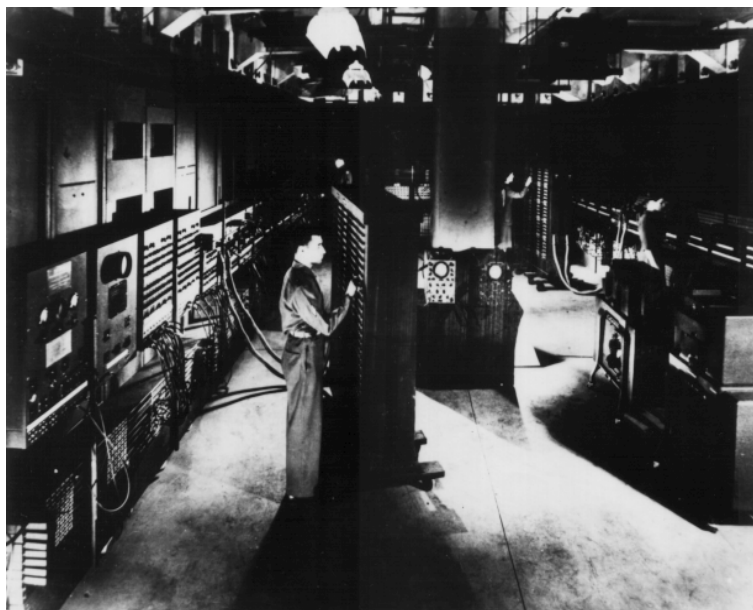


Figur 14.1: Denne stabile CO₂ laseren tillater forskere å fange enkeltatomer for mer enn 5 minutter, for deretter å kunne studere atomenes ulike tilstander, se Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 4204.

Hittil har en vært i stand til å lage kvantemekaniske kretser vha. ionefelle baserte kretser og kjernemagnetisk resonans. Vi skal diskutere noen av disse kretsene i dette kapitlet. Men først et aldri så lite historisk tilbakeblikk.

14.1 Historisk tilbakeblikk og Moores lov

I 1946 framsto ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer), som kunne addere 5000 tall per sekund, som det store teknologiske gjennombruddet. Dens reknekraft svarte altså til noen tusen flytende



Figur 14.2: Bilde av ENIAC som viser noe av dens omfang.

talls operasjoner per sekund (FLOPS). Idag har vi maskiner som kan utføre trillioner av FLOPS. ENIAC besto av

1. ca. 19000 vakuumrør
2. veide ca. 30 tonn
3. brukte ca 174 kW, eller 233 hk
4. trengte ca. 150 m² med plass (30 ft × 50 ft)

Et ekspertpanel i 1949 uttrykte forhåpningsfullt følgende “.... en eller annen dag kan vi utvikle en like kraftig datamaskin med bare 1500 vakuumrør, med vekt på kanskje 1500 kg og et forbruk på ca. 10 kW..... Resten er vel historie...? Transistoren som blei introdusert på begynnelsen av 50-tallet revolusjonerte fullstendig feltet, og innen få år var vakuumrør teknologien akterutseilt.

Idag representeres bit 0 og 1 vha. spenningsforksjeller. Med dagens teknologi brukes ca. 100000 elektroner for å lagre en bit med informasjon og en chip har en utstrekning på noen få micrometer. Transistoren, som er arbeidshesten i enhver datamaskin, består i dag av noen få hundre elektroner. Skal miniatyriseringen av elektroniske kretser fortsette med uforminska styrke, vil vi, dersom vi ekstrapolerer trenden i forminskning fra 1960 til år 2010 knapt trenge et elektron for å lagre en bit med informasjon. Det sier seg sjøl at før eller siden vil kvantemekaniske effekter begynne å spille en viktig rolle, og dagens teknologi vil møte veggen dersom ikke nye måter å bygge kretser utvikles. Denne ekstrapolasjonen kalles også Moore sin lov, etter Gordon Moore ved Intel, kjent for sin observasjon i 1965, kun fire år etter at den først integrerte kretsen kom på markedet, at antall transistorer per integrert krets ville doble hver 18 måned. Tabellen her viser antall transistorer per krets fra 1971 til Pentium 4 prosessorern fra 2000.

Det er her kvantemekanikken kommer inn. Kvantemekanikk tilbyr en enkel og naturlig representasjon av bits: vi kan f.eks. tenke på tilstander i et atom, hvor bit 0 er gitt ved normaltstanden (grunntilstanden) mens bit 1 er gitt ved en eller annen eksitert tilstand.

Tabell 14.1: Moore sin lov, antall transistorer per krets fra 1971 til 2000. For mer informasjon se www.intel.com/research/silicon/mooreslaw.htm.

Prosesor	år	antall transistorer per krets
4004	1971	2250
8008	1972	2500
8080	1974	5000
8086	1978	29000
286	1982	120000
386[tm] processor	1985	275000
486[tm] DX processor	1989	1180000
Pentium 256 processor	1993	3100000
Pentium II processor	1997	7500000
Pentium III processor	1999	24000000
Pentium 4 processor	2000	42000000

En enda enklere tilnærming er å se på enkeltelektroner. Kan vi isolere et enkelt elektron, kan vi vha. et ytre påsatt magnetfelt ha spinn egenverdier $+1/2$ eller $-1/2$. Den første kan da tilsvare bit 0 mens den andre spinneigenveriden svarer til bit 1.

En slik kvantemekanisk representasjon av en bit kalles **QUBIT** og det leder oss til neste avsnitt!

14.2 Superposisjon og qubits

14.2.1 Superposisjonsprinsippet

Det kvantemekaniske superposisjonsprinsippet spiller en sentral rolle i alle betraktninger om kvante informasjonsteori, de fleste såkalla 'gedanken' eksperiment og paradokser i kvantemekanikk.

Vi har i kapittel 2 allerede stifta bekjentskap med dobbelspalt eksperimentene, som i følge Feynman har i seg 'hjerter av kvantemekanikken'. De viktigste bestandelene i dette eksperimentet er en partikkel kilde, en dobbelspalt innretning og en skjerm hvor vi kan observere eventuelle interferens mønstre. Interferens mønstrene kan kun forstås dersom vi antar at materien utviser en bølgenatur. Denne type eksperiment har blitt gjort med flere partikkel typer, fra fotoner, via elektroner, til nøytroner og atomer. Kvantemekanisk er tilstanden vi observerer gitt ved en koherent superposisjon

$$\Psi(x, t) = \Psi(x, t)_a + \Psi(x, t)_b, \quad (14.1)$$

hvor indeks a svarer til en tilstand med bare spalt a mens indeks b er den tilsvarende tilstanden for spalt b . En slik **superposisjon** av kvantemekaniske tilstander kalles for koherente tilstander (kvante koherens) og følger fra postulatet om materiens bølge og partikkel natur. Det finnes per dags ingen eksperiment som tillater oss å si bestemt hvilken spalt f.eks. et enkelt elektron går gjennom. Ønsker vi å gjøre det, vil en eventuell måling kreve at vi vekselvirker med partikkelen, noe som leder til **dekoherens**, dvs. tap av interferens. Kun når vi ikke har noen kunnskap om hvilken spalt partikkelen passerte kan vi observere interferens! Det er klart at dette strider med vår oppfatning av en partikkel som en lokalisert størrelse.

14.2.2 Qubits

I informasjonsteori er den fundamentale enheten en bit. Den utgjør et system med to verdier, '0' eller '1'. I sin klassiske realisering, kan vi tenke oss en bit som en mekanisk bryter, et system med to forskjellige tilstander. Vi kunne tenke oss også at energi, eller potensialforskjellen mellom de to tilstandene er såpass stor at en ikke kan ha spontane overganger fra f.eks. bit '0' til bit '1'.

Den kvantemekaniske analog til den klassiske bit er den såkalla *qubit*, og på lik linje med sin klassiske partner, må den ha minst to tilstander, som vi heretter kaller for $|0\rangle$ og $|1\rangle$. I prinsippet kan ethvert kvantemekanisk system som har minst to tilstander tjene som en basis for en qubit, tenk bare på et elektron i et magnetfelt. Avhengig av magnetfeltets retning, kan vi ha kvantetallene $m_s = \pm 1/2$. Disse to kvantetallene kan tjene som basis for en qubit. I slutten av dette kapitlet skal vi se på et eksperimentelt oppsett som manipulerer to qubits.

Alt dette høres kanskje ikke så banebrytende. Men kopler vi superposisjons prinsippet til en slik qubit, kan vi lage oss en generell qubit tilstand

$$|q\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (14.2)$$

med den egenskap at $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Det betyr ikke at qubiten har en verdi et sted mellom '0' og '1', men heller at qubiten er i en kvantemekanisk superposisjon av begge tilstander, og dersom vi foretar en måling på denne tilstanden, finner vi en sannsynlighet $|\alpha|^2$ for at den er i tilstand '0' og $|\beta|^2$ for at den er i tilstand '1'. Qubiten er i en koherent superposisjon av to kvantemekaniske basis tilstander. Et enkelt eksempel er

$$|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad (14.3)$$

som betyr at vi har 50% sannsynlighet for at qubiten er i tilstand '0' og 50% sannsynlighet for at den er i tilstand '1'.

Hvorfor er anvendelsen av det kvantemekaniske superposisjonsprinsippet av interesse? Og hva er nytt i forhold til en klassisk representasjon?

La oss se på et tilfelle hvor vi har en kvantemekanisk tilstand med åtte komponenter, dvs. vi har superposisjonen

$$|\psi\rangle = a_0|\psi\rangle_0 + a_1|\psi\rangle_1 + a_2|\psi\rangle_2 + a_3|\psi\rangle_3 + a_4|\psi\rangle_4 + a_5|\psi\rangle_5 + a_6|\psi\rangle_6 + a_7|\psi\rangle_7, \quad (14.4)$$

hvor hver komponent $|\psi\rangle_i$ er enten i en tilstand '0' eller '1'. Vi kunne f.eks. tenke oss at hver $|\psi\rangle_i$ var et elektron med enten $m_s = -1/2$ eller $m_s = +1/2$. Koeffisientene a_i er imaginære.

Dersom vi ønsker å representere denne tilstanden i en klassisk datamaskin for en eventuell kvantemekanisk beregning, må vi lagre hver av koeffisientene a_i et sted i minnet. Vi trenger da et ord med 128 bits for å representere hver a_i som er imaginær i en konvensjonell datamaskin. Et alternativ er alltid å skrive dataene ut på disk. Men dersom vi ender opp med å lese og skrive store datamengder til og fra ei fil, senker dette hastigheten på programmet vårt, da lesing til/fra ei fil tar lengre tid enn å aksessere data i internminnet til en datamaskin. I vårt tilfelle trenger vi åtte adresser i minnet for å lagre en bestemt kombinasjon av koeffisientene a_i . Det burde ikke være vanskelig å overbevise seg sjøl at dersom antall elektroner øker (systemet vårt blir større), øker også vårt behov for minne. Med dagens teknologi, kan vi lagre informasjon som svarer til ca. $\sim 2^{30} - 2^{35}$ i minnet på de beste datamaskinene vi har tilgjengelig. Det vil da svare til et sted mellom 30 og 35 elektroner som kan ha spinn opp eller ned. Generelt har vi et totalt antall tilstander gitt ved 2^n , hvor n kan være antall elektroner i to tilstander, spinn opp eller ned.

Hvordan omgå dette problemet? Det kvantemekaniske superposisjonsprinsippet kommer oss her til unnsetning. En tilstand som den beskrevet i likning (14.4), gitt ved en bestemt kombinasjon av koeffisientene

a_i , kan da tenkes lagret som et enkelt ord i et enkelt kvanteregister, dvs. kun en adresse, i motsetning til de åtte vi trenger for en klassisk datamaskin. Dersom vi f.eks. kan manipulere $n = 500$ qubits, har vi 2^{500} mulige tilstander, som er mye større enn det estimerte antallet atomer i verdensrommet. Kvantemekanikk gir oss dermed et potensiale for informasjonsbehandling langt utover det en klassiske datamaskin kan gjøre.

Hvordan en skal lage slike kvanteregistre er dog ikke klart. Det en har klart eksperimentelt hittil er å lage enkle kvantemekaniske kretser hvor en manipulerer noen få qubits.

14.3 Operasjoner på en qubit

Innsikt i noen av de mer grunnleggende operasjonene som danner grunnlaget for en kvantedatamaskin og kvanteinformasjons teori, finnes ved å studere et tenkt oppsett for en enkel strålesplitter, f.eks. gitt ved endringen av polarisasjonsretningen til en innkommende lysstråle.

Vi kan tenke oss at vi har en innkommende stråle som kan være i to tilstander, med lik sannsynlighet. I vårt tilfelle ser vi for oss en partikkel som enten kommer inn ovenifra (tilstand $|0\rangle$) eller nedenfra (tilstand $|1\rangle$) mot strålesplitteren. Strålen påvirkes deretter av en stråle splitter. Strålen splittes i to, med lik sannsynlighet for at partikkelen kommer ut ovenfor eller nedenfor. En enkel matematisk beskrivelse av denne strålesplitteren er gitt ved den såkalte Hadamard transformasjonen \hat{H} , hvis virkning på en tilstand $|0\rangle$ eller $|1\rangle$ er

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad (14.5)$$

og

$$\hat{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (14.6)$$

Vi merker oss også at

$$\hat{H}\hat{H}|0\rangle = \hat{H}\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = |0\rangle, \quad (14.7)$$

og

$$\hat{H}\hat{H}|1\rangle = \hat{H}\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) = |1\rangle. \quad (14.8)$$

Virkningen av denne kvantemekaniske transformasjonen er altså å lage en midlertidig tilstand som består av en superposisjon av bit '0' og bit '1'. Klassisk er ikke det mulig. En alternativ beskrivelse er gitt ved en matriserepresentasjon av tilstandene $|0\rangle$ og $|1\rangle$ og transformasjonen \hat{H} , gitt ved

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (14.9)$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (14.10)$$

og

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (14.11)$$

Overbevis deg selv om at dette stemmer!

Det finnes flere slike operasjoner på qubits. Den såkalte NOT-kretsen, hvor bit '0' skifter til bit '1', eller omvendt, kan skrives som

$$\hat{H}_{\text{NOT}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (14.12)$$

Vi ser da at

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{NOT}}|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle, \quad (14.13)$$

og

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{NOT}}|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle. \quad (14.14)$$

Det siste er ikke noe annet enn en alternativ måte å uttrykke virkningen av en standard NOT-krets i elektronikk.

En annen viktig operasjon er den såkalte faseskiftoperasjonen, hvor vi kan skifte fasen til en av amplitudene ved hjelp av f.eks. laserlys med en bestemt frekvens. Matematisk kan vi uttrykke denne operasjonen som

$$\hat{\mathbf{H}}_{\Phi}|0\rangle = e^{i\phi}|0\rangle, \quad (14.15)$$

og

$$\hat{\mathbf{H}}_{\Phi}|1\rangle = |1\rangle, \quad (14.16)$$

eller med operatoren på følgende form

$$\hat{\mathbf{H}}_{\Phi} = \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (14.17)$$

Når vi skal lage kvantemekaniske kretser, kan vi tenke oss at flere slike operasjoner på en qubit tilstander utgjør en bestemt endelig krets.

Hittil har vi sett på en begynnelsestilstand som bare består av en tilstand. Vi kan også lage en begynnelsestilstand gitt ved en superposisjon, f.eks.

$$|q\rangle_{in} = \alpha|0\rangle_{in} + \beta|1\rangle_{in}, \quad (14.18)$$

hvor α og β er to imaginære konstanter. Virkningen av vår strålesplitter er gitt ved

$$|q\rangle_{ut} = \hat{\mathbf{H}}|q\rangle_{in} = \frac{1}{\sqrt{2}}((\alpha + \beta)|0\rangle_{ut} + (\alpha - \beta)|1\rangle_{ut}), \quad (14.19)$$

hvor $\alpha + \beta$ er sannsynlighetsamplituden for å finne partikkelen i den øvre utgående strålen mens $\alpha - \beta$ er den tilsvarende amplituden for å finne den i nedre utgående strålen. Velger vi enten $\alpha = 0$ eller $\beta = 0$, ser vi at partikkelen har like stor sannsynlighet for å være i den nedre utgående strålen som den øvre. Velger vi $\alpha = \beta$ vil partikkelen definitivt komme ut i den øvre strålen. Virker vi en gang til på den resulterende tilstanden får vi tilbake begynnelsestilstanden,

$$|q\rangle_{ut} = \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{H}}|q\rangle_{in} = |q\rangle_{in}. \quad (14.20)$$

Som et siste eksempel kan vi tenke oss en krets representert vha. følgende operasjoner

$$\hat{\mathbf{H}}\hat{\Phi}\hat{\mathbf{H}}|0\rangle, \quad (14.21)$$

hvis resultat er

$$\frac{1}{\sqrt{2}}((e^{i\phi} + 1)|0\rangle + (e^{i\phi} - 1)|1\rangle). \quad (14.22)$$

Dersom $\phi = 0$ får vi bit '0' som resultat mens for $\phi = \pi$ finner bit '1' som sluttresultat. Det betyr at faseskiftet ϕ gjør en i stand til å veksle mellom bit '0' eller bit '1'.

14.4 Entanglement og to-qubit tilstander

Forestill deg nå en partikkelkilde som sender ut et par med partikler, slik at en partikkel dukker opp til venstre mens den andre kommer ut til høyre for kilden. Vi kan tenke oss at kilden er slik innretta at partiklene som sendes ut kommer med motsatt retta bevegelsesmengder, eller spinn, eller polarisasjonsretning for å nevne noen muligheter. Vi gir partikkelen til venstre merkelappen partikkel '1' mens partikkelen til høyre merkes som partikkel '2'. Dersom vi beholder eksemplet med strålesplitteren, er det slik at dersom partikkel '1' kommer ut i den øvre strålen, vil alltid partikkel '2' komme ut i den nedre strålen til høyre. I vår bit-sjargong, betyr det at dersom partikkel '1' kommer ut med bit '0', må partikkel '2' komme ut med bit '1', eller motsatt. Kvantemekanisk kan vi tenke oss denne tilstanden av to partikler, eller to qubits om vi vil, gitt ved to qubits kombinasjonen

$$\frac{|0\rangle_1|1\rangle_2 + |1\rangle_1|0\rangle_2}{\sqrt{2}}, \quad (14.23)$$

hvor indeksene '1' og '2' henspiller på henholdsvis partikkel 1 og 2. Denne likningen beskriver det som kalles for en entangled tilstand (kryssa tilstand) med den interessante egenskap at ingen av de to qubiten har en bestemt verdi. Men det vi finner ut om denne kvantetilstanden ved måling på en av qubiten (partiklene), en måling hvis resultat ikke er kjent a priori, er at den andre qubiten har motsatt verdi av f.eks. spinn eller bevegelsesmengde. Det ser ut som om det kan være kvantekorrelasjoner, sjøl om målingen på partiklene foretas når partiklene er langt borte. Denne kvantemekaniske ikke-lokaliteten ga opphav til den store disputten mellom Einstein og Bohr om paradokser i kvantemekanikken. Tilstanden i siste likning kalles også for en Bell tilstanden (etter den irske fysikeren John Bell), eller EPR par (etter Einstein, Podolsky og Rosen) og er en viktig byggestein i kvanteinformasjonsteori, teleportasjon og kryptering. Korrelasjonene som framkommer i slike tilstander har vært heftig debattert siden artikkelen til Einstein, Podolsky og Rosen i 1935. John Bell viste at målingskorrelasjonene mellom slike kvantemekaniske tilstander er mye sterkere enn de som finnes blant klassiske systemer.

I vår diskusjon skal vi nøye oss med å slå fast, på lik linje med dobbelspalt eksperiment hvor vi ikke kan fastslå hvorvidt partikkelen går gjennom spalt 1 eller to, at den kvantemekaniske superposisjonen slik vi ser den i likning (14.23) ikke tillater oss å si hvilke av de to en-qubit mulighetene går inn i tilstanden. Vi kan ikke si om qubit '1', partikkel '1', er i bit '0' eller '1', likeså om qubit '2', partikkel '2', er i bit '0' eller '1'. Men, dersom vi måler på qubit '1' kan vi umiddelbart si noe om hva slags tilstand qubit '2' er i. Disse betraktningene leder oss til spørsmålet om hvordan vi kan lage og observere såkalte 'entangled' tilstander.

En mulighet er ved henfall av partikler med spinn 0 til to partikler med halvtallig spinn. Det totale spinnet må være bevart, noe som betyr at de to utgående partiklene må ha motsatt retta spinn. Et slikt eksempel er et nøytralt pion, et boson (meson) med masse $134 \text{ MeV}/c^2$, som kan henfalle til et elektron og et positron, en partikkel med elektronets masse men motsatt ladning, et såkalt antielektron. Dersom det kun er spinnets verdi som tillater oss å skille mellom mulige utkommer ved kilden, vil den resulterende to qubit kvantetilstanden se ut som følger

$$\frac{|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|+\rangle_2}{\sqrt{2}}, \quad (14.24)$$

hvor + og - henspiller til henholdsvis spinn opp og spinn ned, mens indeksene 1 og 2 refererer til partikkel '1' og '2'. En måling på partikkel '1' vil umiddelbart også fastlegge spinnet til partikkel '2'. Det er slik virkning 'uten vekselvirkning' samt det kvantemekaniske superposisjonsprinsippet som danner grunnlaget for det nye forskningsfeltet om kvantedatamaskiner og kvante informasjonsteori.

Vi avslutter dette avsnittet med en kort beskrivelse av to-qubit tilstander. I neste avsnitt skal vi se hvordan vi kan bruke slike to-qubit tilstander til å simulere kvantemekaniske kretser.

En en-qubit tilstand er gitt ved

$$|q\rangle_1 = \alpha_1|0\rangle_1 + \beta_1|1\rangle_1, \quad (14.25)$$

hvor indeksen '1' henviser til qubit '1'. Setter vi sammen en slik en-qubit tilstand sammen med en annen en-qubit tilstand har vi

$$|q\rangle_{12} = |q\rangle_1|q\rangle_2 \quad (14.26)$$

eller

$$|q\rangle_{12} = \alpha_1\alpha_2|0\rangle_1|0\rangle_2 + \alpha_1\beta_2|0\rangle_1|1\rangle_2 + \beta_1\alpha_2|1\rangle_1|0\rangle_2 + \beta_1\beta_2|1\rangle_1|1\rangle_2, \quad (14.27)$$

slik at våre nye basistilstander blir $|0\rangle_1|0\rangle_2$, $|0\rangle_1|1\rangle_2$, $|1\rangle_1|0\rangle_2$ og $|1\rangle_1|1\rangle_2$.

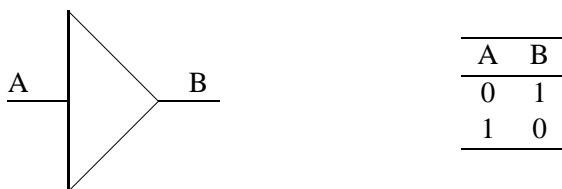
Dersom alle koeffisientene er forskjellige fra null, kan vi lage en tilstand som nå er en superposisjon av fire ulike tilstander.

Slik kan vi fortsette med flere qubits og lage superposisjoner av flere og mer kompliserte basistilstander.

14.5 Kvantemekaniske kretser

I elektronikk er det slik at vi kan bygge alle mulige type kretser vha. kun to basiskretser, en såkalt NOT krets og en AND krets. Disse kan slås sammen til en NAND krets, slik at i grunnen trenger vi kun en basis krets.

En NOT krets er reversibel, dvs. at vi kan fortelle utifra utgangsbiten hvilken verdi inngangs-biten har. Dersom utgangs-biten har verdi '1', må inngangs-biten ha verdi '0'. Kretsen er vist i Figur 14.3.



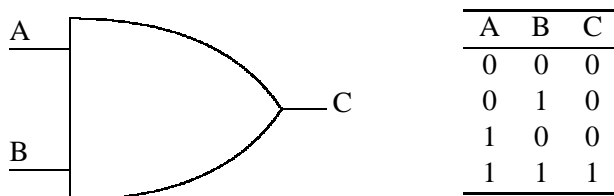
Figur 14.3: NOT krets med tilhørende verdiskjemaer. En NOT krets er såkalt reversibel da vi kan lese av utgangsbiten B hvilken verdi A har.

Problemet med klassiske kretser som en AND og en NAND krets er at de er irreversible. Det betyr at vi ikke kan fortelle utifra utgangs-biten hva slags verdi de to inngående bitene har. Figur 14.4 viser en AND krets med tilhørende bitverdier. Dersom vi ønsker å lage kvantekretser derimot må vi ha kretser som er reversible. Grunnen til det ligger i kravet om hermitiske operatorer i kvantemekanikken. Enhver kvantekrets må kunne formuleres som virkningen av en eller annen kvantemekanisk operator \hat{H} . Generelt har vi da at

$$|q\rangle_{ut} = \hat{H}|q\rangle_{in}, \quad (14.28)$$

men siden \hat{H} må være hermitesk, dvs. $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ og $\hat{H}^\dagger\hat{H} = 1$, har vi

$$\hat{H}^\dagger|q\rangle_{ut} = \hat{H}^\dagger\hat{H}|q\rangle_{in} = |q\rangle_{in}. \quad (14.29)$$



Figur 14.4: AND krets med tilhørende verdiskjemaer. En AND krets er såkalt irreversibel da vi kan ikke avlede av utgangsbiten C hvilken verdi A og B har, unntatt for tilfellet hvor $C = 1$.

Vi ser av siste likning at vi kan få ut begynnelsestilstanden utifra den inverse transformasjonen $\hat{H}^\dagger|q\rangle_{ut}$ på slutttilstanden. Det betyr igjen at vi må kunne dedusere fra utgangs-biten(e) hvilken verdi inngangs-biten(e) hadde. En slik krets kalles reversibel og skiller seg fra en klassisk irreversibel AND krets.

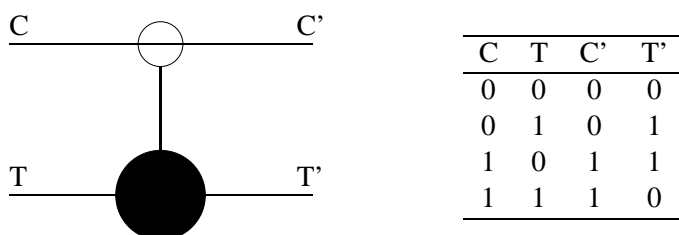
Det er mulig å vise innenfor informasjonsteori at en kan lage en reversibel Turingmaskin vha. kun to basis kretser, på lik linje med en klassisk irreversibel Turingmaskin basert på kun en NAND krets. Dvs. at vi kan lage oss alle mulige typer reversible kretser vha. kun to basis kretser. Disse er en NOT krets og en CNOT krets.

En CNOT krets, eller kontrollert NOT som den kalles, har blitt demonstrert vha. både ionefelle teknikker, hvor enkeltioners kvantemekaniske tilstander representerer bit '0' og '1', og kjernemagnetisk resonans teknikker.

Vi skal diskutere disse to kretsene i neste underavsnitt og avslutte med en faktisk realisering av en CNOT krets.

14.5.1 CNOT kretser

Vi har allerede stifta bekjentskap med en NOT gate, se tilbake til avsnitt 14.3. En NOT krets virker kun på en qubit. En CNOT krets er vist i Figur 14.5 med tilhørende verdiskjema. En CNOT krets beskriver



Figur 14.5: CNOT krets med tilhørende verdiskjemaer. Bokstaven C står for kontroll-biten mens T står for target-biten.

vekselvirkningen mellom to qubits. Den ene qubiten kalles for kontroll-biten mens den andre kalles target-biten. Vi bruker indeks c for den første og indeks t for den siste. Dens virkning er slik at når kontroll-biten har verdi bit '0', forblir target-biten også uforandret. Dersom kontroll-biten har verdien bit '1', forandres target-biten fra f.eks. bit '0' til bit '1', eller motsatt, dvs. virkningen på target-biten er

som en NOT krets dersom kontroll-biten har verdi bit '1'. Vi kan derfor tenke oss en kvantemekanisk begynnelsestilstand gitt ved en qubit for kontroll-biten og en qubit for target-biten. Virkningen kan da oppsummeres som følgende

$$|0\rangle_c|0\rangle_t \rightarrow |0\rangle_c|0\rangle_t, \quad (14.30)$$

$$|0\rangle_c|1\rangle_t \rightarrow |0\rangle_c|1\rangle_t, \quad (14.31)$$

$$|1\rangle_c|0\rangle_t \rightarrow |1\rangle_c|1\rangle_t, \quad (14.32)$$

og

$$|1\rangle_c|1\rangle_t \rightarrow |1\rangle_c|0\rangle_t. \quad (14.33)$$

Matematisk kan vi uttrykke en CNOT krets som en 4×4 matrise

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{CNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (14.34)$$

som virker på basistilstandene $|0\rangle_c|0\rangle_t$, $|0\rangle_c|1\rangle_t$, $|1\rangle_c|0\rangle_t$ og $|1\rangle_c|1\rangle_t$. Som vektorer kan vi skrive disse tilstandene på følgende vis

$$|0\rangle_c|0\rangle_t = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (14.35)$$

$$|0\rangle_c|1\rangle_t = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (14.36)$$

$$|1\rangle_c|0\rangle_t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (14.37)$$

og

$$|1\rangle_c|1\rangle_t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (14.38)$$

Som et eksempel kan vi rekne

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{CNOT}}|1\rangle_c|1\rangle_t = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (14.39)$$

som er $|1\rangle_c|0\rangle_t$, dvs. target-biten forandrer verdi fra bit '1' til bit '0' når kontroll-biten har verdi bit '1'.

14.6 CNOT kretser og Schrödingers katt tilstander

Vi avslutter dette kapitlet med en diskusjon av det som kalles hyperfinsplitting, som har sitt opphav i koplingen mellom kjernespinnet og det totale spinnnet til elektronene, og hvordan denne effekten kan nyttes til å lage både en CNOT krets og en virkelig Schrödingers katt tilstand.

Ser vi tilbake på alkalimetallene og tar for oss Natrium, så husker vi at grunntilstanden er gitt ved den spektroskopiske termen $^2S_{1/2}$ mens den første eksiterte tilstanden er gitt ved eksitasjonen av et elektron i $3s$ orbitalen til $3p$ orbitalen. Pga. spinnbane vekselvirkningen splittes det første eksiterte nivået i to, ett med totalt spinn $J = 1/2$ og et med $J = 3/2$, noe som gir henholdsvis $^2P_{1/2}$ og $^2P_{3/2}$ som spektroskopiske termer. Finstrukturopsplittingen mellom disse to nivåene er gitt ved en energidifferanse på ca 0.0022 eV, eller en frekvens $\nu \approx 515$ GHz. Energioppsplittingen blir litt mer komplisert dersom vi tar hensyn til vekselvirkningen mellom det totale kjernespinnet I og det totale spinnnet til valenselektronet J . Siden kjernen består av fermioner, dvs. partikler med halvtallig spinn, kan kjernespinnet ta verdiene $I = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$.

Kjernespinnet og elektronspinnnet kan igjen koples til et totalt spinn $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{J}}$. En og samme verdi for F kan oppnås ved ulike I og J , på lik linje med hva vi fant for det totale spinn J pga. ulike verdier av L og S . Energitilstanden som skyldes ulike F verdier er dermed splitta via det som kalles for en hyperfin oppsplitting gitt ved $A\hat{\mathbf{I}}\hat{\mathbf{J}}$, på lik linje med spinnbane vekselvirkningen, med A en konstant. Energiforskjellen mellom to hyperfin nivåer er gitt ved

$$\Delta E_{\text{hfs}}(F) - \Delta E_{\text{hfs}}(F-1) = \hbar A F + 3\hbar B F \frac{F^2 - I(I+1) - J(J+1) + 1/2}{2I(2I-1)J(J-1)}, \quad (14.40)$$

med F den største verdien og med A og B to konstanter som kan bestemmes ved bruk av eksperimentelle spektra.

For Natrium, har kjernespinnet verdien $I = 3/2$, som betyr at grunntilstanden har $F = 1$ og $F = 2$. Energiforskjellen er gitt ved en frekvens på $\nu \approx 1.77$ GHz. For den eksiterte $^2P_{3/2}$ tilstanden har vi $F = 0, 1, 2$ og 3 med en oppsplitting på ca. 100 MHz. Med et ytre påsatt magnetfelt kompliseres dette bildet ytterligere.

Slike hyperfin tilstander har blitt brukt nylig, sammen med teknikker for å fange inn enkeltioner i avgrensede områder til å lage både Schrödingers katt tilstander og simulere en CNOT kretser.

Schrödingers katt paradokset blei presentert av Schrödinger i 1935 og har sitt utgangspunkt i det kvantemekaniske superposisjonsprinsippet og det faktum at kvantemekanikken som teori har som målsetting å beskrive både makroskopiske og mikroskopiske frihetsgrader.

Kort fortalt går paradokset ut på følgende. En katt befinner seg i et lukka rom sammen med en beholder med en radioaktiv kjerne hvis sannsynlighet for å henfalle innen en time er 50%. Når kjernen henfaller knuses en beholder med en giftig gass som deretter tar livet av katten. Kvantemekanisk kan vi uttrykke systemet som består av både kjernen og katten som en superposisjon av to muligheter

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|katt\rangle_{\text{ikke-levende}}|kjerne\rangle_{\text{henfalt}} + |katt\rangle_{\text{levende}}|kjerne\rangle_{\text{ikke-henfalt}}). \quad (14.41)$$

Klassisk er det neppe trivielt å tenke seg en slik tilstand. Dersom vi foretar en måling, f.eks. ved å kikke inn i beholderen, av systemet bestående av både katten og kjernen etter en time, vil bølgefunksjonen klappe sammen til en av løsningene med en sannsynlighet på 50%. Det er egentlig alt hva vi kan si om systemet.

Vi legger merke til at tilstanden vi har beskrevet ovenfor likner på to-qubit tilstandene vi diskuterte i de to foregående avsnitt. Spørsmålet vi da stiller oss er om det overhodet er mulig å lage slike Schrödingers katt tilstander.

Vha. ionefelle teknikker og laserteknologi, klarte forskere ved National Institute of Standards i Boulder, Colorado, å lage både Schrödingers katt tilstander og å simulere en CNOT krets.

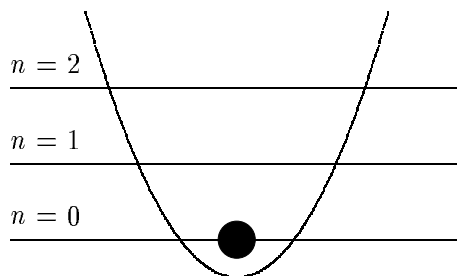
Enkeltioner kan idag fanges inn i små områder, noen få nanometere, vha. såkalte ionefeller. Ladde partikler, som f.eks. et ion, kan 'fanges' vha. elektromagnetiske felter, enten ved å bruke en kombinasjon av enten statiske elektriske og magnetiske felt (såkalt Penning trap) eller et tidsavhengig inhomogent elektrisk felt (såkalt Paul trap).

For å kunne 'fange' inn et ion, trengs ei kraft \mathbf{F} , f.eks. $\mathbf{F} \propto \mathbf{r}$ hvor \mathbf{r} er avstanden fra et valgt origo i ionefella. Slike krefter kan oppnås vha. et kvadropol potensial

$$\Phi = \Phi_0(\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2)/r_0^2, \quad (14.42)$$

hvor Φ_0 er et anvendt spenningsfall for en kvadropol elektrode, r_0 er den typiske størrelsen for fella mens konstantene α , β og γ bestemmer forma på potensialet.

Vi skal ikke gå inn i detalj her (forskning i dette feltet resulterte i Nobelprisen i Fysikk i 1989 til Dehmelt og Paul) men vi legger merke til at potensialet vårt likner et harmonisk oscillator potensial. Avgrenser vi oss til et system i en dimensjon kan vi nå forestille oss et ion som er fanga inn i et harmonisk oscillator potensial $1/2kx^2$, med fjærkonstanten $k = \Phi_0\alpha/r_0^2$, som vist i Figur 14.6. I denne figuren har vi inntegna



Figur 14.6: Skjematisk framstilling av et ion (svart sirkel) som er fanga inn i et harmonisk oscillator potensial. Energinivåene som er inntegna er ulike harmonisk oscillator tilstander. I tillegg har vi også elektroniske eksitasjonsfrihetsgrader i ionet også.

harmonisk oscillator eksitasjonsenergiene. I tillegg utviser også ionet indre elektroniske eksitasjoner. Det er kombinasjonen av disse to frihetsgradene som tillot forskere ved National Institute of Standards i Boulder, Colorado, å lage både Schrödingers katt tilstander og å simulere en CNOT krets.

Vi kan tenke oss at eksitasjonsfrihetsgradene fra den harmoniske oscillator representerer katten i likning (14.41). Vi kan la grunntilstanden i den harmoniske oscillator brønnen erstatte tilstanden hvor katten er i live mens den første eksiterte harmonisk oscillator energien erstatter tilstanden hvor katten er død.

Forskerne i Colorado brukte Be^+ som ion i eksperimentet sitt. Be^+ har som grunntilstand konfigurasjonen $1s^2 2s^1$ med en hyperfin tilstand gitt ved $F = 1$. Den første eksiterte tilstanden som forskerne brukte hadde hyperfin kvantetallet $F = 2$. I forsøket på lage en Schrödingers katt tilstand, kan vi la disse to tilstandene til ionet representere den henfallende kjernen i likning (14.41). Vår nye likning (14.41) blir f.eks.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_{\text{HO}} |g\rangle_{\text{Be}^+} + |1\rangle_{\text{HO}} |e\rangle_{\text{Be}^+}), \quad (14.43)$$

hvor $|0\rangle_{\text{HO}}$ og $|1\rangle_{\text{HO}}$ er henholdsvis den laveste og første eksiterte harmonisk oscillator tilstandene mens $|g\rangle_{\text{Be}^+}$ og $|e\rangle_{\text{Be}^+}$ er henholdsvis grunntilstanden og den første eksiterte tilstanden i Be-ionet. Begynnelsetilstanden er gitt ved $|0\rangle_{\text{HO}}|g\rangle_{\text{Be}^+}$. En laserpuls lager tilstandene $|0\rangle_{\text{HO}}|g\rangle_{\text{Be}^+}$ og $|0\rangle_{\text{HO}}|e\rangle_{\text{Be}^+}$. Deretter manipuleres harmonisk oscillator eksitasjonsfrihetsgradene slik at vi til slutt ender opp med en lineær kombinasjon av tilstandene $|0\rangle_{\text{HO}}|g\rangle_{\text{Be}^+}$ og $|1\rangle_{\text{HO}}|e\rangle_{\text{Be}^+}$.

Dette oppsette blei også brukt til å demonstrere hvordan en kan bruke kvantemekaniske tilstander til å lage en CNOT krets. For å simulere en slik CNOT krets kan vi la de to harmonisk oscillator tilstandene representere en kontroll-qubit mens de to hyperfintilstandene i Be-ionet kan reserveres som bit '0' og bit '1' for target-biten, dvs.

$$|0\rangle_t = |g\rangle_{\text{Be}^+}, \quad (14.44)$$

$$|1\rangle_t = |e\rangle_{\text{Be}^+}, \quad (14.45)$$

$$|0\rangle_c = |0\rangle_{\text{HO}}, \quad (14.46)$$

og

$$|1\rangle_c = |1\rangle_{\text{HO}}. \quad (14.47)$$

Vha. ulike laserpulsers virkning på disse fire basistilstandene kunne dermed forskningsgruppen ved Boulder i Colorado implementere og demonstrere en CNOT krets, se www.boulder.nist.gov for mer informasjon.