Enheter og størrelser i FYS2140

Avogradros tall: $N_A = 6.023 \times 10^{23}$
Elektronvolt: $1eV = 1.602 \times 10^{-19} J$
$\hbar = 6.582 \times 10^{-16} eVs$
Bohrradien: $a_0 = \frac{\hbar^2}{2m_e ke^2} \approx 0.0529$nm
$hc \approx 1240$eVnm og $\hbar c \approx 197.35$eVnm.
Elektronmassen: $m_e \approx 0.511$MeV
Protonmassen: $m_p \approx 938.3$MeV
Nøytronmassen: $m_n \approx 939.6$MeV
Atommasseenheten: $u \approx 931.5$MeV
Coulombfaktor: $ke^2 = 1.44$eVnm

EKSPERIMENTER

Bruddet med klassisk fysikk

1898	Marie Curie	Radioaktiv polonium og radium
1900	Planck	Plancks kvantiseringshypotese og sort 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	Davidsson og Germer	Eksperiment som påviste materiens bølgeegenskaper
1927	Born	Tolkningen av bølgefunksjonen
1928	Dirac	Relativistisk kvantemekanikk og prediksjon av positronet

Sort legeme-stråling og Plancks kvantiseringshypotese

Introduserer ideen om kvantiserte av energier. Et sort legeme kan bare emittere bestemte kvanta med energi. $M(T) = \sigma T^4$, $\lambda_{\max} T = 2.897 \times 10^{-3}$Km. *Enhver fysisk størrelse som utviser harmoniske svingninger har energier som tilfredsstiller $E_n(\nu) = nh\nu$, der ν er frekvensen og h er en universell konstant ($n \in \mathbb{Z}^+$).*

Fotoelektrisk effekt

Lys/elektromegnetisk stråling sendes mot en metallplate. Elektroner kastes løs. Elektronene trekkes mot anoden(positiv). Det finnes en øvre kinetisk energi $K_{\max} = eV_0$ som gjør at ingen elektroner kommer til anoden. • $K_{\max}$ er uavhengig av lysintensiteten I. • Det finnes en laveste frekvens ($K_{\max}$ øker lineært med frekvens). • Elektronene løsrives umiddelbart.
ω_0: arbeidsfunksjon (arbeidet som må gjøres for å rive løs de svakest bundne elektronene). $K_{\max} = h\nu - \omega_0$.

Röntgenstråling

Det motsatte av fotoelektrisk effekt: Elektroner aksellereres gjennom et potensialfall V_R (noen tusen volt), og treffer et metall. Oppbremsingen av elektronene fører til emisjon av röntgenstråling. Kinetisk energi $K_e = eV_R$ og hvis elektronet stopper helt: $h\nu = K_e$ der ν er maksimal frekvens. Brudd med klassisk: Det finnes en minste bølgelengde $\lambda_{\min} = hc/eV_R$ for utsending av Röntgenstråling (en maksimal energi for de utsendte fotonene).

Comptonspredning

Fotoner kan tilordnes bevegelsesmengde. Sendte høyenergetiske fotoner mot en grafittplate og observerte at bølgelengden til den "spredte", utgående strålen vår større enn bølgelengden til den innkommende. Konstruktiv interferens (vha. Bragg diffraksjon) $n\lambda = 2d \sin\phi$. $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} = pc = h\nu \Rightarrow p = h/\lambda$. Bevaring av energi og bevegelsesmengde i kollisjonen foton $\rightarrow$ elektron gir $\Delta\lambda = \Lambda_C(1 - \cos\theta)$ med $\lambda_C = h/m_e c = 2.43 \times 10^{-3}$nm.

Bohrs atommodell

Bohrs postulater: • Et elektron beveger seg i sirkulær baner om en kjerne. Kreftene er gitt ved Coulombkraften $F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}$. • Bare visse elektronbaner er stabile. I disse banene sender elektronene *ikke* ut e.m. stråling. • Et diskontinuerlig "hopp" fra en bane med energi E_i til en bane med energi E_f fører til at det sendes ut stråling med frekvens $\nu = \frac{1}{h}(E_i - E_f)$. Dersom $E_i < E_f$ absorberes stråling med frekvens $-\nu$. • De tillatte elektronbanene er bestemt ved at deres angulærmoment L rundt kjernen er kvantisert: $L = mvr = n\hbar$ der n er et heltall. **Resultater:** Bohr finner *Bohrradien:* $a_0 = -\frac{k^2 m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \approx -13.6\text{eV}\frac{1}{n^2}$. og Bruker dette til å reprodusere *Rydbergs formel* for strålingsoverganger mellom ulike energinivåer: $\frac{1}{\lambda} = \frac{ke^2}{2a_0 hc}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$.

Davidsson-Germer eksperimentet og Bragg diffraksjon

Davidsson-Germer: Likner dobbelspalteeksperimentet. En elektronbølge sendes mot et et krystallgitter. Hvert atom fungerer som en punktkilde. Da registreres interferensmønster med konstruktiv interferens for $n\lambda = d\sin\theta$. **Bragg diffaksjon:** Energirike elektroner sendes med innfallsvinkel θ mot et krystallgitter (da trenger de lengre inn). En detektor plasseres med samme vinkel på andre side. Strålen fra atomlag 2 reiser $2d\sin\theta$ lengre enn strålen som reflekteres fra overflaten. Konstruktiv interferens blir da gitt av $2d\sin\theta = m\lambda$ (*Braggs lov*).

De Broglies hypotese

Partikler med endelig masse utviser både partikkel og bølgeegenskaper. De Broglie foreslo at all materie har en bølgelengde $\lambda = h/p$. Materiebølger må da også ha en frekvens $\nu = E/h$. For partikler med masse er $\nu\lambda$ *ikke* lik partiklens hastiget, slik det er for lys. De broglie forslo to fundamentale relasjoner

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \text{ og } E = h\nu = \hbar\omega.$$

Franck Hertz eksperimentet

Bekreftelse på eksistensen til stasjonære tilstander i atomer (kun bestemte eksiterte tilstander var tillatt). Elektroner aksellereres av et potensial V_{KG} gjennom en kvikksølvgass (fra katode til gitter). Deretter bremses elektronene (fra gitter til anode) av en spenning V_{GA} med $V_{\text{GA}} < V_{\text{KG}}$. De elektronene som ikke kommer frem har kollidert med kvikksølvatomer. Økende spenningsforskjell V_{KA} får flere elektroner gjennom, men ikke linær sammenheng. Elektronstrøm som funksjon av potensialforskjell viste topper ved heltallsmultipler av 4.9V. Når kvikksølvatomene deeksiteres sender de ut lys med $\lambda = 254$nm. Det gir $\Delta E = hc/\lambda \approx 4.88$eV, som er de målte verdiene.

Zeemaneffekten

Når et atom plasseres i et konstant magnetfelt forskyves energinivåene av hamilton-leddet $H_Z = -\frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}$, der $\mathbf{S}$ er elektronets spinn, og $\mathbf{L}$ er angulærmomentet. **Den anomale Zeemaneffekten:** Spinn $\mathbf{S}$ tas med i beregningen. Merk: *Elektronets innebygde dipolmoment er gitt ved $\mu_s = -g_e \frac{e}{2m_e}\mathbf{S}$* der g_e er elektronets gyromagnetiske faktor ≈ 2. **Den normale Zeemaneffekten:** Bare angulærmoment $\mathbf{L}$ tas med: $H_Z = -\frac{e}{2m}\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}$. Egentilstandene for den utvidede hamiltonoperatoren blir de samme $(R(r)Y_{lm}(\theta, \phi))$ men energien blir $E_{nm} = -E_0/n^2 + eBm\hbar/2m_e$ med $E_0 \approx 13.6$eV.

Stern-Gerlach eksperimentet

Skulle undersøke Bohrs hypotese om kvantisert angulærmoment L. Sølvatomer (med ett ytre elektron: fungerer derfor som hydrogenatomer) sendes gjennom et inhomogent magnetfelt. Vi fant kvantifiseringen $L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}, L_z = m\hbar$ der $\ell = 0, 1, 2, \dots$ og $m = -l, \dots, l$. Dipolmoment avhenger av angulærmoment $\mu = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L}$ og kraften er gitt ved $\mathbf{F} = \nabla(\mu \cdot \mathbf{B})$.
Splittingen av sølvatomstrålen er dermed kvantisert. Hydrogenatomer i (1s)-tilstanden ville gitt én linje, men det finnes spinn. Selv om $l = 0$ finnes $\uparrow$ og $\downarrow$ som splitter strålen i to.

Spinn-bane-kobling

I elektronets referansesystem sirkulerer protonet rundt og skaper et konstant magnetfelt. Dette er opphav til det korrigerende hamilton-leddet $H = -\mu \cdot \mathbf{B} = -\mu \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e}{mc^2r^3}\mathbf{L}$. Dette "reduserer" degenerasjonen litt og skaper en riktigere modell for atomer. Da er ikke lenger $|n\ell m_\ell m_s\rangle$ egenfunksjon til Hamiltonoperatoren.

Gruppe-og fasehastighet

For en planbølgeløsning: Gruppehastighet $v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$ er partikkelens fysiske hastighet.
Fasehastighet $v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{2}v_g$ er bølgetoppenes hastighet.

KVANTEMEKANIKK

Operatorer

Posisjon:	$\hat{x}$	x
Bevegelsesmengde:	$\hat{p}$	$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = m\frac{d\langle x\rangle}{dt}$
Kinetisk energi:	$\hat{K}$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
Hamilton:	$\hat{H}$	$\hat{K} + \hat{V}$
Energi:	$\hat{E}$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
Angulærmoment:	$\hat{L}_z$	$-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$
HO Stigeoperator:	$\hat{a}_\pm$	$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\pm i\hat{p} + m\omega\hat{x})$

Kommutatorer

Inkompatible operatorer: $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$

$[\hat{p}, \hat{x}] = i\hbar$	$\left[\hat{L^2}, \hat{L}_z\right] = 0$
$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar L_z$	$\left[\hat{E}, \hat{t}\right] = i\hbar$
$\left[\hat{a}_-, \hat{a}_+\right] = 1$	$\left[\hat{E}, \hat{x}\right] = 0$

Uskarphetsrelasjonen og Ehrenfests teorem

$\langle G\rangle = \int_{\text{all space}} \Psi^* G\Psi \mathrm{d}(\text{space})$, $\sigma_G = \sqrt{\left\langle G^2\right\rangle - \langle G\rangle^2}$.

Uskarphetsrelasjonen: $\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right)^2$. $\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$
Ehrenfests teorem: Dersom Φ er en kvantemekanisk tilstand får vi $i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \hat{H}\Phi$. Dette gir $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Phi|\hat{A}|\Phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Phi^*}{\partial t}\hat{A}\Phi\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty}\Phi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Phi\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty}\Phi^*\hat{A}\frac{\partial\Phi}{\partial t}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\left(-\frac{1}{i\hbar}\Phi^*H^*\right)\hat{A}\Phi + \Phi^*\hat{A}\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Phi\right)\right]\mathrm{d}x + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$ som siden $H^* = H$ gir

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A}, \hat{H}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle.$$

TASL 3D

Den tidsavhengige Schrödingerlikningen

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

TUSL 1D

Separasjon av variable: $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$, med $\phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, $\psi(x)$ gitt av

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

Løsningene av TUSL tilfredsstiller:
• De er *Stasjonære tilstander*: $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Psi|^2 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi|^2 = 0$. Dette gir også $\langle Q\rangle = \langle\Psi|\hat{Q}|\Psi\rangle = \int\Psi^*Q(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}})\Psi\mathrm{dx} = \int\psi^*Q(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}})\psi\mathrm{dx}$
• De har skarpt bestemt energi. Det vil si $\sigma_H^2 = \left\langle H^2\right\rangle - \langle H\rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$.
• De danner et komplett sett. Den generelle løsningen er en lineærkombinasjon av de stasjonære tilstandene:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$

Sfæriske koordinater

$x = r\cos\phi\sin\theta, y = r\sin\phi\sin\theta, z = r\cos\theta, dxdydz = r^2\sin\theta drd\theta d\phi$, der $r \in [0, \infty]$, $\phi \in [0, 2\pi]$ og $\theta \in [0, \pi]$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

eller, om ønskelig

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2r^2}$$

Postulater

- Tilstanden til et system bestemmes av en bølgefunksjon $\Psi(x, t)$ som er en løsning av Shrödingerlikningen $\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$
- Til enhver observabel Q svarer det en lineær, hermitisk operator $\hat{Q}$
- De eneste mulige resultatene av en måling av observabelen Q er en av egenverdiene q_n til operatoren $\hat{Q}$. $\hat{Q}|\Psi_n\rangle = q_n|\Psi_n\rangle$ der $|\Psi_n\rangle$ er en egenfunksjon.
- Et ensemble av systemer preparert i tilstanden Ψ vil ha en forventningsverdi for en observabel Q lik $\langle Q\rangle = \langle\Psi|\hat{Q}|\Psi\rangle$
- Hvis $\hat{Q}$ er en hermitisk operator og $\{\Psi_n\}$ er settet av alle egentilstander til $\hat{Q}$, så er dette settet komplett. Dvs en vilkårlig tilstand Ψ kan skrives $\Psi = \sum_n c_n\Psi_n$

Forhold mellom Ψ og V

• Hvis $V = \infty$ må $\Psi = 0$. • I områder der $V \neq \infty$ er både Ψ og $\frac{\partial\Psi}{\partial x}$ kontinuerlig.

Uendelig brønn

Potensialet $V(x) = 0$ når $0 \leq x \leq a$ og $V(x) = \infty$ ellers. Utenfor må vi ha $\psi(x) = 0$ og innenfor

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dx}^2} = -k^2\psi \text{ der } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Det gir $\psi = A\sin kx + B\cos kx$. Kontinuitetskravet gir $\psi(0) = \psi(a) = 0$ som betyr at $B = 0$ og $A\sin ka = 0$. Det kvantifiserer k ved $k_n = \frac{n\pi}{a}$, $n \in \mathbb{N}$.
Når et potensial går mot uendelig kreves ikke lenger kontinuitet av $\frac{d\psi}{dx}$.
Fra definisjonen av k fører kvantifiseringen til kvantiserte energinivåer:

$$E_n = \frac{\hbar^2k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi\hbar^2}{2ma^2}, \;\; \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).$$

Løsningene er • annenhver odd og jevn med hensyn med brønnens midtpunkt, • Antall nullpunkter øker med én per økt n, • de er orthogonale og • de er komplette.

Harmonisk oscillator

HO potensial: $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ gir HO TUSL

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

med $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ og $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\psi_0(x)$ der $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ og $\hat{a}_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$ med $n = 0, 1, 2, \dots$ og $\hat{a}_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$.
Algebraisk løsning fremkommer av å skrive hamiltonfunksjonen som

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2\right] = \hbar\omega\left[\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right].$$

Videre må $\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle \Rightarrow \hat{H}|\hat{a}_\pm\Psi_n\rangle = E_{n\pm1}|\Psi_{n\pm1}\rangle$ og siden $\hat{a}_-$ senker energien må det, for å unngå negative energier, finnes $\hat{a}_-\Psi_0 = 0$.
Første tre løsninger, med $\alpha = m\omega/\hbar$:

$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$
$\psi_1 = \sqrt{2\alpha}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} xe^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$
$\psi_2 = \left(\sqrt{2}\alpha^{\frac{3}{2}}x^3 - \frac{3}{\sqrt{2}\sqrt{\alpha}}x\right)\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$

For flerdimensjonal harmonisk oscillator kan man bruke separasjonen $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n, t) = \Psi(x_1, t)\Psi(x_2, t)\dots\Psi(x_n, t)$ med energier $E = E_{x_1} + E_{x_2} + \dots + E_{x_n}$.

Fri partikkel

For en fri partikkel er $V(x) = 0$. Det gir den generelle løsningen på TUSL

$$\Psi(x, t) = Ae^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} + Be^{-ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

der $k > 0$: mot høyre og $k < 0$: mot venstre. Løsningen er altså **ikke normaliserbar**. Det har ikke forekommet noen kvantisering, da blir rekkeutviklingen vha. stasjonære tilstander til et integral der $c_n \mapsto \phi(k)dk$ som betyr at en helt generell løsning gir

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}\mathrm{dk}$$

med $\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}}\Psi(x, 0)e^{-ikx}\mathrm{dx}$.

Endelig brønn

Gitt potensialet $V(x) = -V_0\mathbb{I}_{\{-a \leq x \leq a\}}(x)$ kan man definere $\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$. For $x \leq a$ er $Ae^{-\kappa x}$ en ufysisk løsning (går mot ∞ når x går mot $-\infty$). For $x \geq a$ er $Be^{\kappa x}$ ufysisk. Inne i brønnen kan vi definere $l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ og den generelle løsningen $\psi_M = C\sin lx + D\cos lx$. Løsningen er altså $\psi_L(x) = Fe^{-\kappa x}, \psi_M(x) = D\cos lx$ og $\psi_R(x) = \psi_L(-x)$. Kontinuitet av ψ og $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{dx}}$ i a gir $Fe^{-\kappa a} = D\cos la$ og $-\kappa Fe^{-\kappa a} = -lD\sin la$, som kan slås sammen til $\kappa = l\tan la$. Ved å skrive $z \equiv la$ og $z_0 \equiv \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$ får vi $\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$

Kvantemekanikk i 3D

Schrödingerlikningen i tre dimensjoner tar formen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t)+V\Psi(\mathbf{r},t)=\hbar H\Psi(\mathbf{r},t)=\hat{E}\Psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}.$$

Dersom man bruker separasjonen $\Psi(\mathbf{r},t)=\psi(\mathbf{r})\phi(t)$, får $\phi(t)$ de vanlige løsningene $\exp(-iEt/\hbar)$ og ψ løses av en egenverdilikning $\hat{H}\psi=E\psi$. Dersom potensialet $V(\mathbf{r})$ har sfærisk symmetri, kan man benytte separasjonen $\psi(\mathbf{r})=R(r)Y(\theta,\phi)$. Dette gir to differensiallikninger der bare den ene, **Radiallikningen**, avhenger av potensialet V. Den andre, **Angulærlikningen**, kan splittes videre ved å la $Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$. Den generelle løsningen blir da $\Theta(\theta)=AP_\ell^m(\cos\theta)$ der $P_\ell^m(x)\equiv(1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}x^{|m|}}\frac{1}{2^\ell\ell!}\frac{\mathrm{d}^\ell}{\mathrm{d}x^\ell}(x^2-1)^\ell$ er de assosierte Legendre polynomene. Videre er $\Phi(\phi)=e^{im\phi}$. Den fullstendige, normaliserte løsningen av angulærlikningen kalles for de **sfærisk harmoniske**.

Sfæriske harmoniske

De sfærisk harmoniske kan regnes ut ved

$$Y_\ell^m(\theta,\phi)=\epsilon\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}e^{im\phi}P_\ell^m(\cos\theta)$$

der $\epsilon=(-1)^m$ dersom $m\geq 0$ og $\epsilon=0$ ellers. Videre er$P_\ell^m(x)$ de assosierte Legendre polynomene og funksjonene har egenskapen $\langle Y_{\ell'}^{m'}|Y_\ell^m\rangle=\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$.

$$Y_0^0=\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$Y_1^0=\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta$$
$$Y_1^{\pm1}=\mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$$
$$Y_2^0=\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(3\cos^2\theta-1)$$
$$Y_2^{\pm1}=\mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$$
$$Y_2^{\pm2}=\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$$
$$Y_3^0=\left(\frac{7}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta)$$
$$Y_3^{\pm1}=\mp\left(\frac{21}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{\pm i\phi}$$
$$Y_3^{\pm2}=\left(\frac{105}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin^2\theta\cos\theta e^{\pm 2i\phi}$$
$$Y_3^{\pm3}=\mp\left(\frac{35}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin^3\theta e^{\pm 3i\phi}$$

Radiallikningen

• Effektivt potensial: $V_{\text{eff}}=V+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ • Tusl funk. av radius: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+V_{\text{eff}}u=Eu$ der $u=rR(r)$.

Hydrogenatomet

Elektronene blir påvirket av protoner i kjernen ved hjelp av coulombpotensialet $V(\mathbf{r})=V(r)=-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$, som settes inn i radiallikningen. Det innføres $\kappa\equiv\frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}$, $\rho\equiv\kappa r$, $\rho_0\equiv\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar\kappa}$. Som etter løsning ved rekkeutvikling gir $\rho_0=2n$ og derfor

$$E_n=-\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right]\frac{1}{n^2}=\frac{E_1}{n^2},\, n=1,2,3,\ldots$$

med $E_1\approx-13.6$eV. Degenerasjonen er da $d(n)=\sum_{i=0}^{n-1}=n^2$. Løsningen av TUSL blir da

$$\psi_{nlm}=A_{n\ell}e^{-r/na}\left(\frac{2r}{na}\right)^\ell\left[L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na}\right)\right]Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

der $A_{n\ell}=\sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)]^3}}$, $a\equiv\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}\approx 0.529\times 10^{-10}m$ og

$$L_{q-p}^p(x)\equiv(-1)^p\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^p e^x\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^q(e^{-x}x^q)$$

er de **Assossierte Laguerre polynomene:**

$L_0^0(x)=1$	$L_0^2(x)=2$
$L_1^0(x)=-x+1$	$L_1^2(x)=-6x+18$
$L_2^0(x)=x^2-4x+2$	$L_2^2(x)=12x^2-96x+144$
$L_0^1(x)=1$	$L_0^3(x)=6$
$L_1^1(x)=-2x+4$	$L_2^1(x)=3x^2-18x+18$
$L_2^3(x)=60x^2-600x+1200$	

med hovedkvantetall($E_n=-E_1/n^2$) $n=1,2,3,\ldots$, angulærmomentkvantetall ($L=\pm\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$) $\ell=0,1,2,\ldots,n-1$ og magnetisk kvantetall ($L_z=\hbar m$) $m=-\ell,-\ell+1,\ldots,-1,0,1,\ldots,\ell-1,\ell$.

Energidifferanser $E_\gamma=E_i-E_f=-13.6\text{eV}(1/n_i^2-1/n_f^2)$ sammen med $E=h\nu$ gir et analytisk uttrykk for **Rydberg konstanten** $R\equiv\frac{m}{4\pi c\hbar^3}(e^2/2\pi\epsilon_0)^2\approx 1.097\times 10^7\text{m}^{-1}$, definert ved den empiriske loven (**Rydberg formelen**): $\frac{1}{\lambda}=R(1/n_f^2-1/n_i^2)$.

Dersom spinn tas med blir bølgefunksjonen $\Psi_{n\ell m_\ell}\chi_{m_s}$ der Ψ er romdelen og χ er spinndelen. Kvantetallet $m_s=-s,-s+1,\ldots,s-1,s$ er gitt av partikkelens spinn s, som er 1/2 for fermioner, 1 for bosoner og 0 for Higgs. Med spinn dobles degenerasjonen: $d(n)=2n^2$. Det er med mindre spinn-bane-kobling eller andre justeringer tas med i betraktningen.

Spinn

Spinn er et "indre angulærmoment". Mens angulærmoment kan tenkes på som $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ kan vi tenke på spinn som $\mathbf{S}=I\omega$. Vi har $[S_x,S_y]=i\hbar S_z$ og tilsvarende for $x\mapsto y\mapsto z\mapsto x$. Fra angulærmoment følger det at spinn må tilfredsstille $\hat{S}^2|s,m_s\rangle=\hbar^2 s(s+1)|s,m_s\rangle$ og $\hat{S}_z|s,m_s\rangle=\hbar m_s|s,m_s\rangle$, men $s=0,1/2,1,3/2,\ldots$ og $m_s=-s,-s+1,\ldots,s-1,s$. Alle fermioner har uforanderlig $s=1/2$. Da lar vi $\uparrow$ representere $m_s=1/2$ og $\downarrow$ representere $m_s=-1/2$.

Topartikkelsystemer

Topartikkelsystemer kan modeleres ved addisjon av kinetisk energi $\hat{K}=\hat{K}_1+\hat{K}_2$ og et potensial $V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_1,t)$. Med integralet over sannsynlighetstettet $\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}|\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_1,t)|^2\mathrm{d}^3\mathbf{r}_1\mathrm{d}^3\mathbf{r}_2=1$.

Fermioner og Bosoner:
For to ikke-identiske partikler 1 og 2 i tilstand henholdsvis $\psi_a(\mathbf{r}_1)$ og $\psi_b(\mathbf{r}_2)$ er bølgefunksjonen (uten spinn) gitt som et produkt

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2).$$

Dette stemmer bare for $b\neq a$.
For identiske partikler, som f.eks. elektroner eller fotoner, må bølgefunksjonen enten være symmetrisk eller antisymmetrisk om ombytte av partiklene:

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\pm\psi(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1).$$

Her svarer $+$ til Bosoner og $-$ til fermioner. Vi kan da konstruere en bølgefunksjon:

$$\psi_\pm(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=A\left[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)\pm\psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)\right].$$

Merk at dersom vi ser på fermioner med $a=b$ får vi $\psi_-(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=A\left[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)-\psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_a(\mathbf{r}_1)\right]=0$. Som er det vi kaller
Paulis eksklusjonsprinsipp: *To identiske fermioner kan <u>aldri</u> befinne seg i samme tilstand til samme tid.*
Når spinn tas med må den totale bølgefunksjonen være antisymmetrisk for fermioner og symmetrisk for bosoner. For spinn-1/2 partikler har man total spinn $s=s_1+s_2\in\{0,1\}$ og dermed mulighetene $m_s=m_{s_1}+m_{s_2}\in\{0,\pm1\}$. Det finnes tre symmetriske muligheter, kalt **triplet** (s=1):

$$|11\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle,|10\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle\right),|1\text{-}1\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle$$

og én antisymmetrisk, såkalt *entangled state*, kalt **singlett**(s=0):

$$|00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle\right).$$

Koeffisientene $C_{m_1\,m_2\,m}$ kalles **Clebsch-Gordan koeffisienter** og er definert ved

$$|s\;m_s\rangle=\sum_{m_1+m_2=m}C_{m_1\,m_2\,m}^{s_1\,s_2\,s}|s_1\;m_1\rangle|s_2\;m_2\rangle$$

eller

$$|s_1\;m_1\rangle|s_2\;m_2\rangle=\sum_s C_{m_1\,m_2\,m}^{s_1\,s_2\,s}|s\;m_s\rangle.$$

"Exchange forces"
For identiske partikler er forventningsverdien til kvadratet av avstanden mellom dem gitt av

$$\left\langle(x_1-x_2)^2\right\rangle_\pm=\left\langle x^2\right\rangle_a+\left\langle x^2\right\rangle_b-2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b\mp 2|\langle x\rangle_{ab}|^2$$

der $\langle x\rangle_{ab}\equiv\int x\psi_a^*\psi_b\mathrm{d}x$. Moralen er:
• *Partikler med symmetrisk romdel er nærmere hverandre enn partikler med antisymmetrisk romdel .*
For adskillbare partikler mister man $|\langle x\rangle_{ab}|^2$-leddet og får en mellomting.

Grunnstoffer

Et nøytralt atom med atomnummer Z har Hamiltonfunksjon gitt av

$$\hat{H}=\sum_{j=1}^{Z}\left\{-\frac{\hbar}{2m}\nabla_j^2-\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r_j}\right)\right\}+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)\sum_{j\neq k}^{Z}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_k|}.$$

Den første summen representerer elektronenes kinetiske energi og energien fra kjernens elektriske felt. Andre del representerer energiene fra elektronenes påvirkning av hverandre. Andre del antas lik 0 når det regnes analytisk.

Kjemikernotasjon:
Kjemikere skriver orbital-tilstander ifølge

$$(\{n\}\{\ell\})^{\{\#e^-\}}$$

der hovedkvantetallet n og antallet elektroner, $\#e^-$, i tilstanden skrives med tall og det orbitale angulærmomentet ℓ med bokstaver:

s: "sharp"	$\ell=0$	
p: "principal"	$\ell=1$	etterfulgt av $g,h,i,k,l,\ldots$
d: "diffuse"	$\ell=2$	
f: "fundamental"	$\ell=3$	

Ved hjelp av **Hunds regler:**
1• *Så lenge det er konsistent med Paulis prinsipp vil tilstanden med høyest totalt spinn S ha lavest energi.*
2• *For et gitt spinn vil det høyeste totale angulærmomentet L, så lenge antisymmetri er overholdt, gi lavest verdi.*
3• *Hvis et skall (n,ℓ) er ikke er over halvfullt vil det laveste energinivået ha $J=|L-S|$. Hvis det er mer enn halvfullt må $J=L+S$.*
kan totalt spinn skrives på formen ${}^{2S+1}L_J$:

H	$(1s)$	${}^2S_{1/2}$
He	$(1s)^2$	${}^1S_0$
Li	$(1s)^2(2s)$	${}^2S_{1/2}$
Be	$(1s)^2(2s)^2$	${}^1S_0$
B	$(1s)^2(2s)^2(2p)$	${}^2P_{1/2}$
C	$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$	${}^3P_0$

Elementærpartikler

Henfall
Ved å redefinere Hamiltonoperatoren $\hat{H}_0$ til

$$\hat{H}=\hat{H}_0-\frac{i\hbar}{2}\Gamma$$

er ikke hamiltonoperatoren lenger en hermitisk operator, men sannsynlighetstettheten faller. Dvs sannsynligheten for at partikkelen henfaller øker.

$$P=\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2\mathrm{d}x=|\phi(t)|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\mathrm{d}x=e^{-\Gamma t}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\mathrm{d}x.$$

En partikkels **levetid** er definert ved $\tau\equiv 1/\Gamma$. Når Hamiltonoperatoren er på formen over har ikke engang egentilstandene til $\hat{H}$ skarpt bestemt energi. Siden hvilemassen til en partikkel er gitt ved energien betyr dette at det eksisterer en fundamental uskarphet i en ustabil partikkels masse. Sannsynlighetsfordelingen for massen, m, rundt en sentralverdi m_0 er gitt av den såkalte **ikke-relativistiske Breit-Wigner fordelingen**

$$P(m)=\frac{i\hbar}{2\pi}\frac{1}{(m-m_0)^2+\left(\frac{\hbar\Gamma}{2}\right)^2}$$