

Contents

1	Innledende emner	2
1.1	Plancks strålingslov	2
1.2	Fotoelektrisk effekt	3
1.3	Comptoneffekt	3
1.4	Bohrs atommodell	3
1.5	de Broglies hypotese	4
2	Schrödingerligningen	4
2.1	Introduksjon	4
2.2	Uke 35 (Bølgefunksjon)	5
2.2.1	Bølgefunksjon; fysisk tolkning	5
2.2.2	Bølgepakker og uskarphet	6
2.2.3	Operatorer, egenfunksjoner, egenverdier	6
2.3	Uke 36 (TUSL)	6
2.3.1	Tidsuavhengig Schrödingerligning og stasjonære tilstander	6
2.3.2	Partikkel i 1D-boks	7
2.3.3	Noen merknader	7
2.4	Uke 38 (Sannsynlighet og operatorer)	9
2.4.1	Samns.strøm og samns.bevarelse	9
2.4.2	Kommutatorer	9
2.4.3	Hermitske operatorer	9
2.4.4	Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner	9
2.4.5	Forventningsverdiens tidsutvikling	10
2.4.6	Ehrenfests teorem	10
2.5	Uke 39 (Krystaller og halvledere)	12
2.5.1	Stykkevis konstante potensialer	12
2.5.2	Elektroner i krystaller 1D	12
2.5.3	Periodisk potensial, Blochs teorem	12
2.5.4	Energibånd, spinn	12
2.5.5	Pauliprinsippet	12
2.5.6	Valensbånd, ledningsbånd, båndgap	12
2.5.7	Isolator, halvleder, metall	12
2.5.8	Hull, doping av halvledere, p- og n-type	12
2.5.9	Lagdelte halvledere, heterostrukturer, effektiv masse .	12
2.6	Uke 40 (Enkle modeller)	12
2.6.1	Endeling potensialbrønn	12
2.6.2	Harmonisk oscillator i 1D	12
2.6.3	Klassisk vs QM oscillator	12

2.6.4	Morsepotensialet	12
2.7	Uke 41 (Tunnelering)	12
2.7.1	Tunneleffekt	12
2.7.2	Resonant tunnelering	12
2.7.3	Anvendelser av tunnelering	12
2.7.4	Deltafunksjonspotensial	12
2.7.5	Potentialsprang	12
2.8	Uke 42 (QM i 2D og 3D)	12
2.8.1	Harmonisk oscillator i 3D	12
2.8.2	Partikkel i 3D boks	12
2.8.3	Tilstandstetthet	12
2.8.4	2D kulesymm, pot. og dreieimpuls	12
2.9	Uke 43	12
2.9.1	Kompatible størrelser	12
2.9.2	Simultane egenfunksjoner	12
2.9.3	Symmetriegenskaper og paritet	12
2.9.4	Dreieimpuls i 3D	12
3	Numerikk	12
3.1	Numerisk løsning av TUSL	12
3.2	Atomære enheter	13
4	Postulatene	13
4.1	A) Operatorpostulatet	13
4.2	B) Tilstandspostulatet	13
4.3	C) Forventningsverdipostulatet	13
4.4	D) Målepostulatet	13

1 Innledende emner

1.1 Plancks strålingslov

Max Planck: **Kvantehypotese** $E_n = n \cdot h\nu$.

Ser på metallboks med lite hull, svart legeme. Kan kun ha stående EM bølger tilsvarende streng med lengde L Sannsynlighet for gitt energi $E = E_n = n \cdot h\nu$:

$$p_n \sim \exp(-E_n/k_b T)$$

Konkluderer at strålingsintensitet fra svart legeme med absolutt temperatur T er

$$j(T) = \int_0^\infty d\nu \frac{dj}{d\nu}$$

med frekvensfordeling

$$\frac{dj}{d\nu} = \frac{2\pi h \nu^3 / c^2}{\exp(h\nu / k_b T) - 1}$$

Kjent som **Plancks Strålingslov**.

Stefan-Boltzmanns lov: $j(T) \sim T^4$.

Wiens forskyvningslov: Maksimal $dj/d\nu$ ved λ_{max} .

Rayleigh-Jeans lov: $h\nu \ll k_b T \Rightarrow \frac{du}{d\nu} \approx \frac{8\pi k_b T}{c^3} \cdot \nu^2$

Ekvipartisjonsprinsippet: Et kvadratisk ledd i energifunksjonen gir et bidrag $\frac{1}{2}k_b T$ til midlere energi, pr partikkel, eller (som her) svingemode. Her: $u = u_\epsilon + u_B = \frac{1}{2}\epsilon_0 \epsilon^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2$. Det gir $\langle E \rangle = 2 \cdot \frac{1}{2}k_b T$ Som betyr at $du/d\nu = \frac{8\pi k_b T}{c^3} \cdot \nu^3$ Dette er det samme som **Plancks strålingslov** i grensen, som betyr at klassisk fysikk og kvantefysikk "henger sammen".

1.2 Fotoelektrisk effekt

EM stråling kvantisert: Elektron i metallet kan bare absorbere hele $h\nu$. W = minste energi som løsriver elektron fra metalloverflaten = frigjøringsarbeid. Det vi si at $h\nu$ må være større enn W for å kunne løsrive elektroner.

1.3 Comptoneffekt

Kollisjon mellom røntgenfoton med masse 0 og elektron i ro. Foton: $m=0$, $E = h\nu = pc \Rightarrow p = h\nu/c = h/\lambda$. Energi- og impulsbevaring gir $\lambda_{foton,etter} = \lambda_{foton,for} + \lambda_c(1 - \cos\theta)$ med $\lambda_c = h/m_e c \approx 0.024$. Dette er kjent som elektronets **Comptonbølgelengde**.

1.4 Bohrs atommodell

Frem til nå:

- Elektronet (Thomson 1897)
- Atomkjernen (Rutherford 1911)
- Balmer-serien for H-atomet (Balmer 1885) $\lambda_n = B \cdot \frac{n^2}{n^2 - 2^2}$
- Kvantisert strålingsenergi (Planck 1900, Einstein 1905)

Bohr antok:

- Elektron beveger seg i klassiske baner rundt kjernen med bestemte energier; såkalte stasjonære tilstander.
- Elektronet kan foreta **kvantesprang** mellom de stasjonære tilstandene, ved hjelp av absorpsjon eller emisjon av et strålingskvant med energi hc/λ .
- Elektroet har **kvantisert dreieimpuls** $L = n\hbar$.

Elektronbaner med radius $r_n = n^2 \cdot a_0$. **Bohr-radien:** $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2 \approx 0.059 \text{ Å}$. Mulige energiverdier for elektronet: $-\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} \approx -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$

1.5 de Broglies hypotese

Partikler med masse har - i likhet med masseløse partikler - både partikkel- og bølgeegenskaper. For fotoner: $\lambda = h/p$ og $\nu = E/h$. De Broglie: Dette gjelder også for elektroner, protoner, nøytroner, atomer, molekyler...

Partiklers termiske de Broglie-bølgelengde fra ekvipartisjonsprinsippet:

$$p_{rms} = \sqrt{2m \cdot 3 \cdot \frac{1}{2} k_b T}$$

og dermed

$$\lambda = h/p_{rms} = h/\sqrt{3mk_b T}$$

k

2 Schrödingerligningen

2.1 Introduksjon

Vil finne bølgefunksjon som kan beskrive de Broglies partikkelbølger. Fra klassisk fysikk:

- Bølgeligningen

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

med generell løsning $y(x, t) = y(x \pm v_f t)$ og **harmoniske løsninger** o

$$y(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

- Bølgestørrelser og relasjoner:
 - A = amplitude
 - $k = 2\pi/\lambda$ = bølgetall
 - $\omega = 2\pi/T$ = vinkelfrekvens
 - $\nu = \omega/2\pi$ = frekvens
 - $v_f = \lambda/T = \lambda\nu = \omega/k$ = fasehastighet
 - $v_g = d\omega/dk$ = gruppehastighet

Fra de Broglie:

$$\lambda = h/p \Rightarrow k = 2\pi/\lambda = 2\pi p/h = p/\hbar$$

$$\nu = E/h \Rightarrow \omega = 2\pi\nu = 2\pi E/h = E/\hbar$$

Finner noe som passer i bølgeligning, og ender opp noe som

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

for fri partikkel i potensial $V = 0$. En fri partikkel i konstant potensial kan beskrives ved

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

Dette gir opphav til **Schrödingerligningen**

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

Merk Bølgefunksjonen må være kompleks, og er dermed ikke direkte målbar.

2.2 Uke 35 (Bølgefunksjon)

2.2.1 Bølgefunksjon; fysisk tolkning

Både masseløse partikler (fotoner) og partikler med masse (elektroner...) har bølge- og partikkelegenskaper. Tenker på absoluttkvadratet av bølgefunksjonen som sannsynlighetsfordeling for posisjon til partikkel. Max Born :

$$dP = |\Psi(x, t)|^2 dx = \text{sanns for partikkel mellom } x \text{ og } x + dx \text{ ved tid } t$$

Må dermed normere bølgefunksjonen slik at

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

2.2.2 Bølgepakker og uskarphet

Skarp impuls gir

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

Må derfor innføre en prefaktor for å lage bølgepakke. Dersom vi har skarpt definert bølgepakke for posisjon, vil usikkerheten i impuls være stor, og omvendt. Fra der får vi **Heisenbergs uskarphetsrelasjon**:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

2.2.3 Operatorer, egenfunksjoner, egenverdier

Definerer

$$\hat{A}f(x) = Af(x)$$

der \hat{A} er en operator, $f(x)$ en egenfunksjon, og A er egenverdien. Fra dette kan vi utlede følgende operatorer: **Impulsoperator**

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

Operator for kinetisk energi

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

Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = \hat{K} + V(x)$$

slik at Schrödingerligningen blir

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

2.3 Uke 36 (TUSL)

2.3.1 Tidsuavhengig Schrödingerligning og stasjonære tilstander

Antar Schrödingerligning er et produkt at tidsuavhengig og posisjonsuavhengig funksjoner $\psi(x)$ og $T(t)$. Ved separasjon får vi tidsuavhengig Schrödingerligning

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

og Schrödingerligninger blir

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

Dette kalles en **stasjonær tilstand** siden absoluttkvadratet av bølgefunksjonen er uavhengig av tid ($|e^{if(t)}| = 1$). Vi har at E er mulige **energieigenverdier**, og ψ mulige **energieigenfunksjoner**.

Ved linearitet er SL en lineærkombinasjon av energieigenfunksjoner av stasjonære løsninger:

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

Dersom ulike energieigenverdier bidrar til $\Psi(x, t)$ er den ikke lenger stasjonær (avhengig av tid).

2.3.2 Partikkel i 1D-boks

Ser for oss et potensial som er null i et intervall mellom 0 og L , og uendelig ellers. Partikkel kan ikke være utenfor intervallet, så bølgefunksjonen blir null. Løser TUSL med grensebetingelser at bølgefunksjonen er kontinuerlig og null i endepunkter. Det gir følgende

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

og

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

2.3.3 Noen merknader

1. Symmetri Symmetrisk potensial gir symmetrisk sannsynlighetsfordeling, og enter symmetrisk eller antisymmetrisk bølgefunksjon.
2. Nullpunkter $\psi_n(x)$ har $n - 1$ nullpunkter, som gjelder generelt. Ekskludert eventuelle endepunkt.
3. Grunntilstand og eksiterte tilstander Tilstand med lavest mulig energi.
1D brønn: $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} > 0$

4. Grensebetingelser Ser at TUSL på formen

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

gir ψ'' endelig der V er endelig. Dette betyr at ψ og ψ' er kontinuerlige. ψ og $|\psi|^2$ vil alltid være kontinuerlige over alt.

5. Krumningsegenskaper ψ''/ψ har samme fortegn som $V - E$.

- Klassisk tillatt område der $E \geq V$, slik at ψ krummer mot x-aksen.
- Klassisk forbudt område der $E < V$, slik at ψ krummet bort fra x-aksen. (Lov i QM dersom potensial ikke er uendelig.)

6. Ortogonalitet, ortonormert sett av funksjoner Et funksjonssett $\{\psi_n(x)\}$ er ortonormet når

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

Dette gjelder generelt for løsninger av TUSL.

7. Starttilstand og tidsutvikling Kan uttrykke en starttilstand som en lineærkombinasjon av energieigenfunksjonene:

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

Tidsutviklingen blir en lineærkombinasjon av stasjonære tilstander:

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

Kan fastlegge konstanene slik:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) dx$$

I normert tilstand må vi da ha at

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

slik at sannsynlighet er bevart.

2.4 Uke 38 (Sannsynlighet og operatorer)

2.4.1 Sanns.strøm og sanns.bevarelse

Definerer $j(x, t)$ som **sannsynlighetsstrøm** inn eller ut av et lite intervall dx . Har fra før at sannsynlighetstettheten $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ Fra dette får vi kontinuitetsligning for sannsynlighet

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

2.4.2 Kommutatorer

Definisjon av **kommutatoren** mellom to operatorer:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

\hat{A} og \hat{B} kommuterer dersom $[\hat{A}, \hat{B}]f = 0$.

2.4.3 Hermitske operatorer

Definerer den **adjunkte** \hat{A}^+ av en operator \hat{A} :

$$\int (\hat{A}\Psi_1)^* \Psi_2 dx = \int \Psi_1^* (\hat{A}^+ \Psi_2) dx$$

La F være en fysisk størrelse og \hat{F} operatorer som representerer F . Da må forventningsverdien $\langle F \rangle$ være **reell**.

$$\langle F \rangle = \langle F \rangle^*$$

Har generelt at

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

Sier at \hat{F} er **hermitesk** dersom den oppfyller dette. Dermed er også $\hat{F}^+ = \hat{F}$ oppfylt, og vi sier at \hat{F} er **selvadjungert**.

2.4.4 Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

Definerer **standardavvik**

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

For to målbare størrelser A og B:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$

To størrelser med operatorer som ikke kommuterer, kan altså ikke ha skarpe verdier samtidig. Eksempelvis posisjon og impuls:

$$[x, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$$

.

2.4.5 Forventningsverdiens tidsutvikling

Ser på tidsuavhengig operator \hat{F} slik at $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$. Dermed:

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle$$

.

Dvs: $\langle F \rangle$ endrer seg ikke hvis \hat{F} kommuterer med Hamiltonoperatoren \hat{H} .

2.4.6 Ehrenfests teorem

Kvantemekaniske forventningsverdier $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$ oppfyller samme bevegelsesligninger som de klassiske x og p ,

$$\frac{dx}{dt} = v = \frac{p}{m}; \frac{dp}{dt} = F = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Får

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, x] \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle$$

og

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

Kan for eksempel skrive en kvantemekanisk versjon av Newtons 2. lov:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \langle F \rangle$$

2.5 Uke 39 (Krystaller og halvledere)

2.5.1 Stykkevis konstante potensialer

2.5.2 Elektroner i krystaller 1D

2.5.3 Periodisk potensial, Blochs teorem

2.5.4 Energibånd, spinn

2.5.5 Pauliprinsippet

2.5.6 Valensbånd, ledningsbånd, båndgap

2.5.7 Isolator, halvleder, metall

2.5.8 Hull, doping av halvledere, p- og n-type

2.5.9 Lagdelte halvledere, heterostrukturer, effektiv masse

2.6 Uke 40 (Enkle modeller)

2.6.1 Endeling potensialbrønn

2.6.2 Harmonisk oscillator i 1D

2.6.3 Klassisk vs QM oscillator

2.6.4 Morsepotensialet

2.7 Uke 41 (Tunnelering)

2.7.1 Tunneleffekt

2.7.2 Resonant tunnelering

2.7.3 Anvendelser av tunnelering

2.7.4 Deltafunksjonspotensial

2.7.5 Potensialsprang

2.8 Uke 42 (QM i 2D og 3D)

2.8.1 Harmonisk oscillator i 3D

2.8.2 Partikkel i 3D boks

2.8.3 Tilstandstetthet

2.8.4 2D kulesymm, pot. og dreieimpuls

2.9 Uke 43

2.9.1 Kompatible størrelser 12

2.9.2 Simultane egenfunksjoner

2.9.3 Symmetriegenskaper og paritet

2.9.4 Dreieimpuls i 3D

3 Numerikk

TUSL blir N differensialligninger. Får egenverdi problemet

$$\mathbf{H}\vec{\psi} = E\vec{\psi}$$

med den tridiagonale, reelle og symmetriske Hamiltonmatrisen \mathbf{H} .

Anvendt i numeriske øvinger.

3.2 Atomære enheter

Setter $\hbar = e = a_0 = m_e = 1$. Energienheten **hartree**: $\hbar^2/m_e a_0^2 = 1$ hartree som tilsvarer 27.2 eV.

4 Postulatene

4.1 A) Operatorpostulatet

Målbare størrelser i klassisk mekanikk representeres i QM av lineære operatorer som konstrueres ved at impuls koordinater erstatter av operatorer. Eksempelvis impuls og kinetisk energi.

4.2 B) Tilstandspostulatet

Bølgefunksjonen beskriver partikkelens tilstand og er bestemt av Schrödingerligningen.

4.3 C) Forventningsverdi postulatet

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

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau$$

der $\langle F \rangle$ er forventningsverdien til F .

4.4 D) Målepostulatet

Eneste mulige måleverdier av F er egenverdiene f_j gitt ved

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

Dersom F måles til f_j havner systemet i egentilstanden Ψ_j . Bølgefunksjonen **kollapser**, med andre ord påvirker målingen systemet!