

Contents

1	Innledende emner	3
1.1	Plancks strålingslov	3
1.2	Fotoelektrisk effekt	3
1.3	Comptoneffekt	3
1.4	Bohrs atommodell	4
1.5	de Broglies hypotese	4
2	Schrödingerligningen	5
2.1	Introduksjon	5
2.2	Uke 35 (Bølgefunksjon)	6
2.2.1	Bølgefunksjon; fysisk tolkning	6
2.2.2	Bølgepakker og uskarphet	6
2.2.3	Operatorer, egenfunksjoner, egenverdier	6
2.3	Uke 36 (TUSL)	7
2.3.1	Tidsuavhengig Schrödingerligning og stasjonære tilstander	7
2.3.2	Partikkel i 1D-boks	7
2.3.3	Noen merknader	8
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	10
2.4.5	Forventningsverdiens tidsutvikling	10
2.4.6	Ehrenfests teorem	10
2.5	Uke 39 (Motivasjon for stykkevis konstante potensialer)	11
2.5.1	Elektroner i krystaller 1D	11
2.5.2	Periodisk potensial, Blochs teorem	11
2.5.3	Energibånd	11
2.5.4	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	13
2.5.9	Lagdelte halvledere, heterostrukturer, effektiv masse	13
2.6	Uke 40 (Enkle modeller)	14
2.6.1	Endeling potensialbrønn	14
2.6.2	Harmonisk oscillator i 1D	15
2.6.3	Klassisk vs QM oscillator	16

2.6.4	Morsepotensialet	16
2.7	Uke 41 (Tunnelering)	16
2.7.1	Tunneleffekt	16
2.7.2	Resonant tunnelering	17
2.7.3	Anvendelser av tunnelering	17
2.7.4	Deltafunksjonspotensial	18
2.7.5	Potentialsprang	18
2.8	Uke 42 (QM i 2D og 3D)	18
2.8.1	Harmonisk oscillator i 3D	18
2.8.2	Degenerasjon	19
2.8.3	Partikkel i 3D boks	20
2.8.4	Tilstandstetthet	20
2.8.5	2D kulesymm, pot. og dreieimpuls	21
2.8.6	Kompatible størrelser og simultane egenfunksjoner	21
2.9	Uke 43 (Dreieimpuls og rotasjon)	22
2.9.1	Symmetriegenskaper og paritet	22
2.9.2	Dreieimpuls i 3D	22
2.9.3	Egenfunksjoner for dreieimpuls i 3D	23
2.9.4	Merknader ved egenfunksjonen	23
2.9.5	Kvantisert rotasjonsenergi	24
2.10	Uke 44 (Hydrogenatomet)	24
2.10.1	Isotropt potensial, radialligning	24
2.10.2	Hydrogenatomet	25
2.10.3	Utvalgsregler for strålingsoverganger	27
2.10.4	Effekter av magnetfelt	27
2.11	Uke 45 (Spinn, atomer)	28
2.11.1	Spinn: Tilstander og operatorer	28
2.11.2	Atomer	29
3	Numerikk	31
3.1	Numerisk løsning av TUSL	31
3.2	Atomære enheter	31
4	Postulatene	31
4.1	A) Operatorpostulatet	31
4.2	B) Tilstandspostulatet	31
4.3	C) Forventningsverdipostulatet	32
4.4	D) Målepostulatet	32

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 $E = E_n = n \cdot h\nu$:

$$p_n \sim \exp(-E_n/k_bT)$$

Konkluderer at strålingsintensitet fra svart legeme med absolutt temperatur T er

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

med frekvensfordeling

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

Kjent som **Plancks Strålingslov**.

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

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

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

Ekvipartisjonsprinsippet: Et kvadratisk ledd i energifunksjonen gir et bidrag $\frac{1}{2}k_bT$ 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 $\langle E \rangle = 2 \cdot \frac{1}{2}k_bT$ Som betyr at $du/d\nu = \frac{8\pi k_bT}{c^3} \cdot \nu^3$ 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 løsriv 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)
- Balmerserien 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

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

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 av 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 bølgefunktjonen 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 bølgefunktjonen blir null. Løser TUSL med grensebetingelser at bølgefunktjonen 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

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

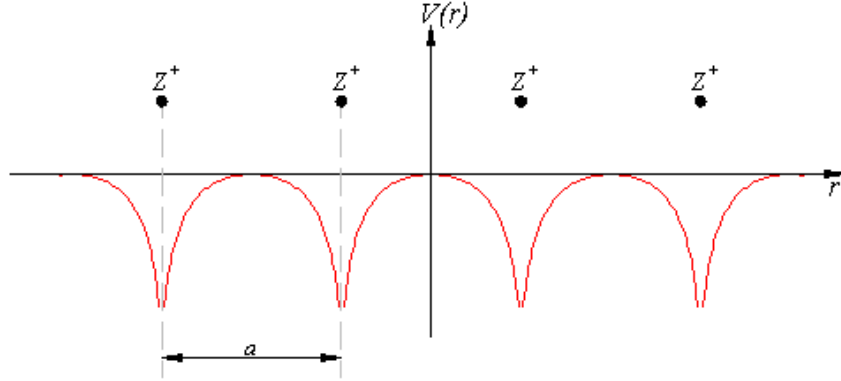
Kan for eksempel skrive en kvantemekanisk versjon av Newtons 2. lov:

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

2.5 Uke 39 (Motivasjon for stykkevis konstante potensialer)

2.5.1 Elektroner i krystaller 1D

Tenker oss en regulær 1D krystall, som da vil ha periodisk potensial:



2.5.2 Periodisk potensial, Blochs teorem

Periodisk potensial er på formen $V(x + j \cdot a) = V(x)$. Her er a gitterkonstanten og j er et heltall. Dette gir periodisk sannsynlighet. **Blochs teorem** gir bølgefunksjonen på formen

$$\psi(x) = e^{ikx} \cdot u(x)$$

med $u(x + j \cdot a) = u(x)$.

2.5.3 Energibånd

Kan diskretisere TUSL og få kontinuerlige energibånd. For makroskopisk krystall er $N \approx \infty$ og vi setter $V_n = 0$ for alle n . Med $\varepsilon = \hbar^2/m(\Delta x)^2$ og $\Delta x = a$ har vi

$$-\frac{\varepsilon}{2} \{\psi_{n+1} - 2\psi + \psi_{n-1}\} = E\psi_n$$

med $\psi_n = e^{ikx_n} = e^{ikna}$. Setter inn og får

$$-\frac{\varepsilon}{2} e^{ikna} \{e^{ika} - 2 + e^{-ika}\} = E \cdot e^{ikna} \Rightarrow E(k) = \varepsilon(1 - \cos(ka))$$

for det kontinuerlige energibåndet. Merk at ved stor bølgelengde ser partikkelen essensielt et konstant potensial.

2.5.4 Spinn

Spinn: Partiklers kvantemekaniske indre dreieimpuls \vec{S} . Elektroner har spinn $m_s \pm 1/2$. Altså er total bølgefunksjon (tilstand) for et elektron

$$\phi(\vec{r}, m_s) = \psi(\vec{r})\chi_{m_s}$$

To mulige spinn gir **to** tilstander per orbital => **2N tilstander pr energibånd**

2.5.5 Pauliprinsippet

Maksimalt ett elektron i en gitt enpartikkeltilstand. **Grunntilstand** for atom, molekyl, krystall: lavest mulig total energi i henhold til Pauliprinsippet. Dermed; for krystallens grunntilstander:

- Med $2M$ (partall) elektroner pr enhetscelle: $2M \cdot N$ elektroner i alt => M fylte energibånd, resten tomme
- Med $2M + 1$ (oddtall) elektroner pr enhetscelle: $(2M + 1) \cdot N$ elektroner i alt => M fylte energibånd, ett halvfylt.

2.5.6 Valensbånd, ledningsbånd, båndgap

Valensbåndet: Fylt bånd med høyest energi. **Ledningsbåndet:** Neste bånd (tomt eller halvfylt) (conduction band) **Båndgap:** Energiforskjellen mellom valensbånd og ledningsbånd: $E_g = E_C - E_V$

- Isolator: $E_g \geq 4 \text{ eV}$
- Halvleder: $E_g \leq 4 \text{ eV}$
- Metall: $E_g = 0$

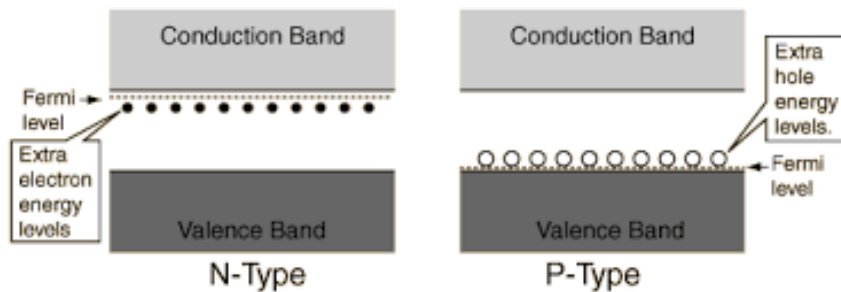
2.5.7 Isolator, halvleder, metall

Halvledere: Isolator ved $T = 0$. Når $T > 0$, kan elektroner eksiteres fra fylte tilstander nær toppen av valensbåndet, til ledige tilstander nær bunnen av ledningsbåndet.

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

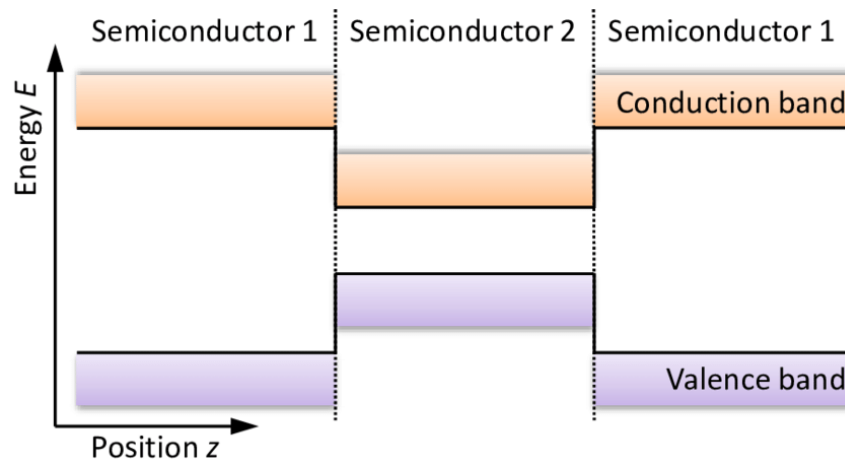
Hull: Eksiterte elektroner etterlater seg tomme tilstander i VB, såkalte **hull**, som er "partikler" med positiv ladning. Siden $k_b T \approx 25$ meV ved 300 K blir antall slike elektron-hull-par lite i en perfekt "ren" halvleder.

Doping: p-type: Anta Si (silisium) med 4 valenselektroner, og at en liten andel av Si erstattes a P (fosfor), med 5 valenselektroner. Da vil 4 av disse inngå i hver sin binding med 4 nabo-Si-atomer, mens det 5. doneres til Si-krystallens ledningsbånd. **n-type:** Dopes Si med Al (aluminium), med 3 valenselektroner, aksepterer Al ett elektron fra Si-krystallens valensbånd og skaper et fritt hull.



2.5.9 Lagdelte halvledere, heterostrukturer, effektiv masse

Kan skjøte halvledere med ulike båndgap, og danne potensialbrønner og barrierer.



Lagtykkelser kan kontrolleres med atomær nøyaktighet.

Effektiv masse: Elektroner og hull i hhv CB og VB opplever periodisk - dvs ikke konstant - potensial. De oppfører seg som frie partikler, med effektiv masse m^* .

2.6 Uke 40 (Enkle modeller)

2.6.1 Endeling potensialbrønn

Ser for oss et potensial

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| < l \\ 0 & |x| \geq l \end{cases}$$

Løser TUSL for bundne tilstander når $E < V_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & x \leq -l \\ C \sin(kx) + D \cos(kx) & |x| < l \\ Be^{-\kappa x} & x \geq l \end{cases}$$

Vet at for symmetrisk potensial må vi ha symmetrisk eller antisymmetrisk bølgefunksjon. Holder å kreve at $\psi(x)$ og $d\psi(x)/dx$ er kontinuerlige i f.eks $x = l$.

Mulige symmetriske:

$$\begin{aligned} Be^{-\kappa l} &= D \cos(kl) \\ -\kappa Be^{-\kappa l} &= -kD \sin(kl) \\ \Rightarrow \tan(kl) &= \kappa/k \end{aligned}$$

Mulige antisymmetriske:

$$\begin{aligned} Be^{-\kappa l} &= C \sin(kl) \\ -\kappa Be^{-\kappa l} &= -kC \cos(kl) \\ \Rightarrow \tan(kl) &= -k/\kappa \end{aligned}$$

Løsningene her gir tillatte k-verdier, og dermed tillatte energier for bundne tilstander. Definierer $\varepsilon = E/V_0$; $0 < \varepsilon < 1$.

$$\Rightarrow \tan(\sqrt{\varepsilon} k_0 l) = \begin{cases} \sqrt{(1-\varepsilon)/\varepsilon} & \text{(S)} \\ \sqrt{\varepsilon/(1-\varepsilon)} & \text{(AS)} \end{cases}$$

$\tan(\sqrt{\varepsilon} k_0 l)$ har asymptoter for $\sqrt{\varepsilon} k_0 l = (n + 1/2)\pi$ og nullpunkter for $\sqrt{\varepsilon} k_0 l = n\pi$.

- Antall nullpunkter $< 1 =$ Antall bundne S
- Antall asymptoter $< 1 =$ Antall bundne AS

\Rightarrow Antall bundne: $N = 1 +$ heltallsverdien av $2k_0l/\pi$.

Får ubundne tilstander når $E > V_0$: For $|x| > l$ er nå

$$\psi(x) = a \sin(Kx) + b \cos(Kx); K = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

og kontinuerlig ψ og $d\psi/dx$ i $x = \pm$ kan realiseres for alle $E > V_0$, dvs vi har et kontinuum.

2.6.2 Harmonisk oscillator i 1D

Med symmetrisk potensial forventer vi at TUSL har bundne tilstander, vekselvis symmetrisk og antisymmetrisk, med økende antall nullpunkter.

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

Definerer

$$\varepsilon = 2E/\hbar\omega \text{ og } x = q\sqrt{\hbar/m\omega}$$

og får TUSL på formen

$$\psi''(x) + (\varepsilon - x^2)\psi(x) = 0; \psi'' = \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

Ved en drøss utregning, gjetning, normering og forskjellig snacks ender vi opp med et **resultat**:

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

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

Med H_n som Hermite-polynomer.

2.6.3 Klassisk vs QM oscillator

QM:

$$dP_n = |\psi_n(q)|^2 dq$$

Klassisk:

$$dP = \frac{dq}{\pi \sqrt{q_0^2 - q^2}}$$

For små verdier av n er det få likhetstrekk mellom QM og klassisk.

For store n oscillerer sannsynlighetsfordelingen ca n ganger på det klassiske tillatte området, men omhylningskurven ligner mye på den klassiske fordelingen.

2.6.4 Morsepotensialet

Potensial for toatomig molekyl kan modelleres med **Morsepotensialet**:

$$V(q) = V_0 \{ [1 - e^{-\alpha(q-d)}]^2 - 1 \}$$

Atomene vil ha avstand d , som gir potensial $V = -V_0$. Dersom de er for nærme, blir potensialet veldig stort. Når avstanden vokser mot uendelig blir potensialet null. Nær likevekt kan dette modelleres som en QM harmonisk oscillator.

2.7 Uke 41 (Tunnelering)

2.7.1 Tunneleffekt

Ser for oss en potensialbarriere på et gitt intervall langs x-aksen. Kan for eksempel realiseres ved å bruke halvledere. Antar elektron med skarp impuls $p = \hbar k$ fra venstre, med

$$E = K = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \psi_i(x) = e^{ikx}$$

To mulige utfall: Refleksjon R og transmisjon T (tunnelering). Total sannsynlighet gir $R + T = 1$.

- Reflektert bølge: $\psi_r(x) = r \cdot e^{-ikx}, (x < 0)$
- Transmittert bølge: $\psi_t(x) = t \cdot e^{ikx}, (x > L)$

For "firkantbarriere" med $\varepsilon = E/V_0$ og $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$:

$$T = \begin{cases} \left[1 + \frac{\sinh^2(k_0 L \sqrt{1-\varepsilon})}{4\varepsilon(1-\varepsilon)}\right]^{-1} & \varepsilon < 1 \\ \left[1 + \frac{\sin^2(k_0 L \sqrt{\varepsilon-1})}{4\varepsilon(\varepsilon-1)}\right]^{-1} & \varepsilon > 1 \end{cases}$$

Merknader:

- Tunnereling: $T > 0$ for $E < V_0$. (og $R > 0$ for $E > V_0$)
- Hvis $E \ll V_0$ og $k_0 L \gg 1$ er $\sinh(k_0 L \sqrt{1-\varepsilon}) \approx \frac{1}{2}e^{k_0 L} \gg 1 \Rightarrow T \approx 16\varepsilon \cdot \exp(-2k_0 L) \ll 1$
- $T = 1$ når $\sin(k_0 L \sqrt{\varepsilon-1}) = 0$, dvs $k_0 L \sqrt{\varepsilon-1} = n\pi$ og dermed $E - V_0 = K = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$, som er energinivåene for partikkel i boks, der vi har stående bølger med bølglengder $\lambda_n = 2L/n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$).

2.7.2 Resonant tunnelering

Antar to potensialbarrierer med innbyrdes avstand b . Resonant og stående bølger mellom barrierene gir $T = 1$ når

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mb^2}; \lambda_n = \frac{2b}{n}; n = 1, 2, 3, \dots$$

Eksperimentelt kan vi tenke å sette på en spenning i en krets med slike potensialbarrierer, og dermed "løfte" den ene siden. Vil da få at dersom vi øker spenningen, vil strømmen nå et lokalt maksimum der det er resonant tunnelering, og deretter avta litt, før den til slutt vil vokse videre. Det gir altså negativ differensiell resistans for spenning mellom U_1 og U_2 :

$$r = \frac{dU}{dI} < 0$$

2.7.3 Anvendelser av tunnelering

1. AC-forsterker Ser for oss en krets med en gitt spenning, resistans, dobbelpotensialbarriere og påtrykt AC-spenning. Dersom den gitte spenningen ligger midt i intervallet mellom U_1 og U_2 , og AC-signalet oscillerer i dette intervallet, vil signalet bli forsterket.
2. STM (Scanning Tunneling Microscope) Nål med ett atom ytterst på spissen scannes i (xy)-planet nær metalloverflaten; strømmen $I(x, y)$ måles.

$$I \sim T \sim \exp(-2\kappa L), \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

$\Rightarrow I(x, y)$ gir avbildning av overflaten med atomær oppløsning.

2.7.4 Deltafunksjonspotensial

Deltafunksjonen er definert ved

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

gitt at $f(x)$ er kontinuert i $x = 0$.

Noen egenskaper:

- $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1$
- $\delta(x) = 0$ for $x \neq 0$; $\delta(0) = \infty$
- $\delta(-x) = \delta(x)$
- $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$

2.7.5 Potentialsprang

Tenker oss et potensial som gjør et sprang fra i et gitt punkt. Hvis $E < V_0$ er $R = 1$ og $T = 0$. Med $E > V_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}; k^2 = 2mE/\hbar^2 & x < 0 \\ te^{iqx}; q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 & x > 0 \end{cases}$$

Dette gir

$$\Rightarrow R = |r|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2; T = |t|^2 \cdot \frac{q}{k} = \frac{4kq}{(k+q)^2}$$

Likt som bølge på streng med skjøt i $x = 1$.

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

2.8.1 Harmonisk oscillator i 3D

Har at

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z; \hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 \dots$$

TUSL har produktløsninger og separerer i 3 helt tilsvarende ligninger:

$$\psi(x, y, z) = \phi(x) \cdot \phi(y) \cdot \phi(z)$$

som gir

$$\hat{H}_x \phi(x) = E_x \phi(x)$$

og tilsvarende for y og z .

Energien blir

$$E = E_x + E_y + E_z = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_z$$

For isotrop harmonisk oscillator har vi

$$\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$$

og

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 = V(r)$$

Får tilhørende energiverdier

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega$$

Den fullstendige bølgefunksjonen blir nokså tilsvarende den for 1D.

2.8.2 Degenerasjon

1D: Alltid 1 egenfunksjon $\psi_n(x)$ pr energiverdi E_n

2D og 3D: Når potensialet $V(\vec{r})$ har en viss symmetri, kan det være flere egenfunksjoner for gitt energi. Da er energinivået **degenerert**, med **degenerasjonsgrad** $g_n =$ antall tilstander med energi E_N .

For isotrop harmonisk oscillator i 3D:

- $E_0 = \frac{3}{2} \hbar \omega : \psi_{000} \Rightarrow g_0 = 1$
- $E_1 = \frac{5}{2} \hbar \omega : \psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001} \Rightarrow g_1 = 3$

Kan utlede generelt uttrykk, som sier at

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

2.8.3 Partikkel i 3D boks

Har boks med sidekanter L_x, L_y, L_z . Separasjon av TUSL, med $\psi = 0$ i grenseflatene gir

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{2^3/L_x L_y L_z} \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

og

$$E_{n_x n_y n_z} = (\pi^2 \hbar^2 / 2m) (n_x^2 / L_x^2 + n_y^2 / L_y^2 + n_z^2 / L_z^2)$$

Like sidekanter gir degenerasjon

- $E_1 = E_{111} \Rightarrow g_1 = 1$
- $E_2 = E_{211} = E_{121} = E_{112} \Rightarrow g_2 = 3$

OSV ...

2.8.4 Tilstandstetthet

$N(E) = \int_0^E g(E) dE =$ antall tilstander mellom 0 og E . $g(E) = dN/dE =$ antall tilstander pr energienhet.

1D: $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \Rightarrow 2$ tilst. pr lengdeenhet langs n-aksen $\Rightarrow N_1(E) = 2\sqrt{2mL^2 E / \pi^2 \hbar^2} =$ antall tilst i $(0, E)$. $\Rightarrow g_1(E) = dN_1/dE = \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} L \cdot E^{-1/2}$
 = DOS i 1D \Rightarrow Pr lengdeenhet: $\frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} E^{-1/2}$

$$2D: E = \frac{(n_x^2 + n_y^2) \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$\Rightarrow 2$ tilst. pr flateenhet i planet.

$$\Rightarrow N_2(E) = 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \pi (n_x^2 + n_y^2) = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{2mL^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot E$$

$$\Rightarrow g_2(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot L^2 = \text{DOS i 2D, uavh. av } E.$$

$$3D: E = \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$\Rightarrow 2$ tilst. pr volumenhet i rommet.

$$\Rightarrow N_3(E) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2} = \frac{\pi}{3} \left(\frac{2mL^2 E}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$\Rightarrow g_3(E) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot L^3 \cdot E^{1/2} = \text{DOS i 3D.}$$

Observerer at 1D avtar med E , 2D er konstant med E , og 3D øker med E .

Metaller har ledige bånd der det er høy tilstandstetthet, som gir god ledningsevne. Halvledere har relativt lav tilstandstetthet rundt ledige tilstander, men blir svakt metallisk ved at det har små hull. En halvleder kan da lede strøm, men er dårligere enn et metall.

2.8.5 2D kulesymm, pot. og dreieimpuls

Kan lage 2D verden for elektroner ved smal potensialbrønn med en bunden tilstand. Elektroner i grunntilstanden ser et isotropt potensial dersom

$$V(x, y) = V(r)$$

Kan formulere TUSL i polarkoordinater med partikkelmasse μ og dreieimpuls med kvantetall m .

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r, \phi) + V(r)\psi(r, \phi) = E\psi(r, \phi)$$

Denne har produktløsning

$$\psi(r, \phi) = R(r)\Phi(\phi)$$

som kan separeres. Fokuserer på vinkeldelen, som blir

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2\Phi$$

med løsning $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$. I 2D har vi naturligvis bare dreieimpuls i z -retning, altså

$$\vec{L} = L_z\hat{z} \Rightarrow \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$\Phi_m(\phi)$ må være egenfunksjon til dreieimpulsen med egenverdi $m\hbar$.

$$\hat{L}_z\Phi_m = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}e^{im\phi} = m\hbar e^{im\phi} = m\hbar\Phi_m$$

Dette betyr at \hat{H} og \hat{L}_z har **felles egenfunksjoner**.

2.8.6 Kompatibler størrelser og simultane egenfunksjoner

To størrelser A og B er **kompatible** hvis de kan ha skarpe verdier samtidig. Da **kommutterer** A og B:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Skarpe verdier A og B betyr at partikkelen er i en stasjonær tilstand ψ som er egenfunksjon til \hat{A} og \hat{B} ,

$$\hat{A}\psi = A\psi \text{ og } \hat{B}\psi = B\psi$$

Dette betyr at vi kan finne **felles egenfunksjoner** for to operatorer som kommuterer.

Eksempelvis fra forrige deloverskrift, $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$, altså kan partikkelen ha skarp energi og dreieimpuls samtidig!

2.9 Uke 43 (Dreieimpuls og rotasjon)

2.9.1 Symmetriegenskaper og paritet

Paritetsoperatoren \hat{P} speiler en funksjon gjennom origo:

$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

Egenfunksjoner til **paritetsoperatoren** må oppfylle

$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = p\psi(\vec{r})$$

der p er konstant. Det gir to muligheter:

- Like paritet: $\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \Rightarrow p = +1$
- Odde paritet: $\psi(-\vec{r}) = -\psi(\vec{r}) \Rightarrow p = -1$

2.9.2 Dreieimpuls i 3D

Bruker kulekoordinater som definert i PC Hemmer s91. Det gir

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\ \hat{L}_y &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\ \hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\phi}\end{aligned}$$

Produktregel for derivasjon gir

$$\hat{L}^2 = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right)$$

Dermed: $\hat{H} = \hat{K}_r + \hat{K}_L + V$ med

$$\begin{aligned}\hat{K}_r &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ \hat{K}_L &= \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2\end{aligned}$$

Anta isotropt potensial $V(r)$. Gir følgende relasjoner

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0, [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0, [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0,$$

Altså er E, L^2, L_z kompatible størrelser. Siden potensialet er isotropt, er det ingenting spesielt med z -aksen, og relasjonene over kan like gjerne gjelde for en vilkårlig komponent av dreieimpulsen, men bare **en**. Hele \vec{L} kan ikke være skarp siden komponentene ikke kommuterer innbyrdes!

2.9.3 Egenfunksjoner for dreieimpuls i 3D

Finner egenfunksjoner for \hat{H} , \hat{L}^2 og \hat{L}_z ved å prøve produktløsninger:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Kvadratet av dreieimpulsvektoren avhenger ikke av radialkomponenten, så

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \phi) = L^2 Y(\theta, \phi)$$

med

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi) = \Theta(\theta) \cdot e^{im\phi}$$

Setter $L^2 = \hbar^2 \cdot l(l+1)$, som til slutt gir egenfunksjoner definert ved **Legendrepolymer**.

For isotropt potensial er dreieimpulsen og dens komponenter kvantisert:

$$\begin{aligned} L &= \sqrt{l(l+1)}\hbar & ; l = 0, 1, 2, \dots \\ L_z &= m\hbar & ; m = 0, \pm 1, \dots \pm l \end{aligned}$$

$m \leq l$ fordi $|L_z| \leq |\vec{L}|$, naturligvis. Egenfunksjonene blir

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \cdot e^{im\phi}$$

med

$$\Theta_{lm}(\theta) = \begin{cases} P_l(\cos \theta) & m = 0 \\ P_l^m(\cos \theta) & m \neq 0 \end{cases}$$

2.9.4 Merknader ved egenfunksjonen

Normering:

$$\int \int |Y_{lm}|^2 d\Omega = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} |Y_{lm}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

Ortogonalitet:

$$\int \int Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Paritet: Speiling gjennom origo:

$$\begin{aligned}\cos \theta &\rightarrow \cos(\pi - \theta) = -\cos \theta \\ e^{im\phi} &\rightarrow e^{im(\phi+\pi)} = (-1)^m e^{im\phi}\end{aligned}$$

For alle Y_{lm} :

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

Terminologi

l-verdi	0	1	2	3	4	5
bokstavangivelse	s=sharp	p=principal	d=diffuse	f=fundamental	g	h

Polardiagram Kurve der avstanden fra origo angir verdien av absoluttkvadratet av dreieimpulsen. Sjekk s98 i PC Hemmer for fine illustrasjoner. Kvalitativt blir det sirkulært for s-verdier, åttetall for p+verdier, firkløver for d-verdier osv...

2.9.5 Kvantisert rotasjonsenergi

Beskriver molekyler som stive legemer med treghetsmoment I:

$$K = \frac{1}{2}I\vec{\omega}^2; \vec{L} = I\vec{\omega} \Rightarrow K = \frac{1}{2I}\vec{L}^2$$

Kvantisering: $\hat{K} = \frac{1}{2I}\hat{\vec{L}}^2$

Eigenverdiligning: $\hat{K}Y_{lm} = K_l Y_{lm} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} Y_{lm}$

Degenerasjonsgrad: $g_l = 2l + 1$

Utvalsregel ved absorpsjon og emisjon av foton: Pga at fotonet har spinn $\pm\hbar$ kan molekylet gjennomgå en strålingsovergang som gir $\Delta l = \pm 1$. Energibevarelse gir da (her: emisjon)

$$h\nu = K_l - K_{l-1} = \hbar^2 l/I$$

2.10 Uke 44 (Hydrogenatomet)

2.10.1 Isotropt potensial, radiallyigning

Har ligningen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{\vec{L}}^2 + V(r) \right] R \cdot Y_{lm} = E \cdot R \cdot Y_{lm}$$

- Bruker $\hat{L}^2 Y_{ml} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$ og multipliserer ligningen med $-2\mu/\hbar^2 Y_{lm}$
- Innfør $u(r) = r \cdot R(r)$; da er $R'' + \frac{2}{r} R' = \frac{u''}{r}$
- Multipliser ligningen for u med $-\hbar^2 r/2\mu$

Dette gir TUSL i 1D:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u'' + V_{eff}^l u = E u$$

med et l -avhengig effektivt potensial

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

Når $l > 0$ blir området nær $r = 0$ klassisk forbudt pga det frastøtende sentrifugalbidraget

$$\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

2.10.2 Hydrogenatomet

$$V_{eff}^l(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

Med Z antall protoner. Fokuserer på relativbevegelsen til de to partiklene elektronen og kjernen, og ser bort fra tyngdepunktbevegelsen til atomet. Ser bort fra bevegelse til kjernen rundt tyngsepunkt fordi den er neglisjerbar i forhold til elektronet (pga masseforskjell). Innfører

$$\begin{aligned}\rho &= r \cdot \sqrt{-8\mu E/\hbar} \\ \lambda &= (Ze^2/4\pi\epsilon_0\hbar) \cdot \sqrt{-\mu/2E}\end{aligned}$$

Vil finne **bundne** der $E < 0$.

$$u'' + \left[\frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4} \right] u = 0; u'' = \frac{d^2 u}{d\rho^2}$$

$l = 0$: $u'' = [\lambda/\rho - 1/4] u = 0$ Prøver $u = \rho e^{-\rho/2}$, som med $\lambda = 1$ gir

$$E = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \approx -13.6 \text{ eV}$$

$l > 0$: Prøver $u = \rho^{l+1} e^{-\rho/2}$, som er oppfylt for $\lambda = l + 1$.

Kan ved potensrekker vise at $\lambda = n = l + 1 + n_r$, der n er hovedkvantetall, og n_r er det radielle kvantetallet.

1. Energiverdiene:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\mu c^2 \cdot \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} \approx -13.6 \text{ eV} \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

2. Degenerasjon: For en gitt n er $l = 0, 1, \dots, n-1$ og $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

$$\Rightarrow g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

3. Bohr-radien Innsetting for E_n gir $\rho = r \cdot \frac{2}{na}$ med $a = \frac{\hbar}{\mu c Z \alpha}$. Med H-atomet, dvs $Z = 1$ og $\mu \approx m_e$ er

$$a \approx a_0 = \frac{\hbar}{m_e c \alpha} \approx 0.529 \text{ Å}$$

4. Radialfunksjoner (unormerte)

n_r	l	n	$R_{nl}(r)$	Orbitalnavn
0	0	1	$\exp(-r/a)$	1s
1	0	2	$\exp(-r/2a)(1 - r/2a)$	2s
0	1	2	$\exp(-r/2a)(r/a)$	2p
2	0	3	$\exp(-r/3a)(1 - 2r/3a + 2r^2/27a^2)$	3s
1	1	3	$\exp(-r/3a)(r/a + r^2/6a^2)$	3p
0	2	3	$\exp(-r/3a)(r^2/a^2)$	3d

5. Normering Vil har $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ slik at

$$\int \int \int |\psi|^2 d^3r = 1; d^3r = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

Kan normere R og Y hver for seg

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr &= \int_0^\infty u_{nl}^2(r) dr = 1 (u_{nl} = R_{nl} \cdot r) \\ \Rightarrow u_{nl}^2 \cdot dr &= dP_{nl} \end{aligned}$$

som er sannsynligheten for å finne elektronet i et kuleskall mellom r og $r + dr$. **Radialtetthet**

$$\frac{dP_{nl}}{dr} = u_{nl}^2$$

6. Ortogonalitet

$$\int \int \int \psi_{n'l'm'}^* \psi_{nlm} d^3r = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

7. Forventningsverdier (av isotrope størrelser)

$$\begin{aligned} \langle f(r) \rangle_{nlm} &= \int \int \int f(r) R_{nl}^2 Y_{lm}^2 r^2 dr d\Omega \\ &= \int_0^\infty f(r) u_{nl}^2(r) dr \end{aligned}$$

2.10.3 Utvalgsregler for strålingsoverganger

H-atomet kan absorbere og emittere fotoner. Som nevnt har fotonet $\pm\hbar$ spinn og dreieimpulsbevarelse gir derfor tillatte overganger dersom $\Delta l = \pm 1$ (og i tillegg $\Delta m = 0, \pm 1$)

- Lymanserien : Mellom $n = 1$ og $n > 1$
- Balmer-serien : Mellom $n = 2$ og $n > 2$
- Paschen-serien : Mellom $n = 3$ og $n > 3$

Siden $\Delta l = \pm 1$ kan ikke et elektron i 2s-tilstanden komme seg til grunntilstanden 1s ved emisjon (sjekk radialfunksjoner under hydrogenatomet). Derfor er levetiden τ i 2s-tilstanden lang:

$$\tau_{2s} \approx 0.1 \text{ s} ; \tau_{2p} \approx 1 \text{ ns}$$

2.10.4 Effekter av magnetfelt

Klassisk atom: $L = rm_e v$ $\mu = I \cdot \pi r^2 =$ magnetisk moment $I = ev/2\pi r \Rightarrow \mu = evr/2$ Dermed: $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$

Gyromagnetisk forhold: $\frac{\mu}{L} = \frac{e}{2m_e}$

Bohr: $L = n\hbar$, $\mu = n \cdot e\hbar/2m_e = n \cdot \mu_b$, $\mu_m =$ **Bohr magneton**.

Schrödinger: $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, $L_z = m\hbar$

Magnetisk dipol i magnetfelt:

$\vec{\tau} = m\vec{u} \times \vec{B} =$ dreiemoment på dipolen $V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} =$ potensiell energi
 $\vec{F} = -\nabla V = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) =$ kraft på dipolen $\Rightarrow \vec{F} = 0$ når \vec{B} -feltet er uniformt

Larmor-presesjon:

Med $\vec{B} = B\hat{z}$ vil \vec{L} presesere (rottere) om z -aksen med **Larmorfrekvensen**

$$\omega_L = \frac{eB}{2m_e}$$

- $L_x(t) = L_0 \cos(\omega_L t)$
- $L_y(t) = L_0 \sin(\omega_L t)$
- $L_z = \text{konst}$
- $L_0^2 = L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2$

Zeemaneffekt:

Et \vec{B} -felt opphever degenerasjon for tilstander med $l > 0$. Med $\vec{B} = B\hat{z}$:

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} L_z B = \frac{e\hbar}{2m_e} m B = m\mu_b B$$

2.11 Uke 45 (Spinn, atomer ...)

2.11.1 Spinn: Tilstander og operatorer

Sender sølvatomer gjennom inhomogent magnetfelt. Kraft på sølvatomene: $F_z = -m \cdot \mu_b \cdot \frac{dB}{dz}$, $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ Forventet $2l + 1$ ulike avbøyninger, men eksperimentet gir bare **to**.

Foreslår at elektronet har indre dreieimpuls, et **spinn** \vec{S} , med tilhørende magnetisk moment $\vec{\mu}_s$, og at spinnnet er kvantisert slik som dreieimpulsen:

- $L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$; $L_z = m\hbar$; $m = -l, -l+1, \dots, l$
- $S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$; $S_z = m_s\hbar$; $m_s = -s, -s+1, \dots, s$

Eksperiment viser at m_s har **to** mulige verdier:

$$m_s = -\frac{1}{2} \text{ og } m_s = +\frac{1}{2} \Rightarrow s = \frac{1}{2}$$

Magnetisk moment til spinn er ikke helt analogt med den for dreieimpuls; $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$. Nøyaktige eksperiment gir

$$\vec{\mu}_s = g_s \cdot \left(-\frac{e}{2m_e} \right) \cdot \vec{S}$$

med $g_s \approx 2$. Protoner og nøytroner er også spinn- $\frac{1}{2}$ -partikler, med magnetisk moment:

- Proton: $g_p = 5.59$
- Nøytron: $g_n = -3.83$

Velger egentilstander slik, som for dreieimpuls, feller for \hat{S}^2 og \hat{S}_z , og kommuteringsrelasjoner likt som for dreieimpuls

Egenvektorer:

- Spinn + : $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ og $\chi_+^\dagger = (1 \ 0)$
- Spinn - : $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ og $\chi_-^\dagger = (0 \ 1)$

Normering:

$$\chi_+^\dagger \chi_+ = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1; \chi_-^\dagger \chi_- = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$$

Ortogonalitet:

$$\chi_+^\dagger \chi_- = \chi_-^\dagger \chi_+ = 0$$

Spinn-operatorer:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \\ \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \\ \hat{S}_y &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \\ \Rightarrow \hat{S}^2 &= \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Med **Paulimatrissene** $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

2.11.2 Atomer

1. Pauliprinsippet Elektroner og andre elementærpartikler er **identiske** partikler, og **ombytte** av to elektroner har ingen målbar effekt.

$$|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2$$

Bosoner: $\Psi(1, 2) = \Psi(2, 1)$, symmetrisk ved ombytte av 1 og 2.
Bosoner har heltallig spinn.

Bose-Einstein-kondensasjon: Alle bosonene i systemet kan ved lav nok temperatur befinne seg i samme (enpartikkel-) grunntilstand.

Fermioner: $\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$, antisymmetrisk ved ombytte av 1 og 2. Elektroner, protoner og nøytroner er eksempel. Fermioner har som kjent halvtallig spinn. Dersom to fermioner er i samme enpartikkeltilstand, ser vi at bølgefunksjonen blir null. Dermed

Pauliprinsippet: To elektroner kan ikke befinne seg i samme enpartikkeltilstand.

2. Det periodiske system Grunntilstanden for H-atomet: elektronet i 1s
Elektronkonfigurasjon: 1s'

Numerisk løsning av TUSL for andre atomer gir en lignende struktur, med økende energi

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < \dots$$

Aufbau-prinsippet: Atomets grunntilstand har inntil 2 elektroner (med motsatt spinn) i orbitaler med lavest mulig energi.

Hund's regel: Atomets totale spinn er størst mulig. Fyller alltid opp et nivå med opp-spinn før ned-spinn.

Edelgasser: Betydelig energigap fra høyeste okkuperte til laveste ledige tilstand. Derfor lite reaktive.

Alkalimetaller: Har et forholdsvis løst bundet elektron som kan avgis eller deles med f.eks. halogener.

Halogener: Mangler ett elektron for å oppnå edelgasskonfigurasjon. Danner stabile salter med alkalimetallene.

Innskuddsmetaller: Kan ha ulike oksidasjonstall, dermed en "rik kjemi". Inngår ofte i katalyse, dvs reduserer energibarrieren og øker hastigheten for ulike kjemiske reaksjoner.

3. Molekyler Enpartikkeltilstander, molekylorbitaler (MO), for elektroner i et molekyl kan konstrueres som lineære kombinasjoner (LC) av atomære orbitaler (AO), kjent som LCAO:

$$\psi = \sum_j c_j \phi_j$$

Grunntilstanden for molekylet:

- Inntil 2 elektroner i hver MO slik at total energi blir så lav som mulig.
- Atomposisjoner, dvs bindingslengder og -vinkler, slik at netto kraft er lik null på alle atomene i molekylet.

3 Numerikk

3.1 Numerisk løsning av TUSL

Ser for oss en endelig 1D boks delt inn i små intervall Δx . Det gir

$$\psi_n'' \approx \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta x)^2}$$

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 impulskoordinater erstatter av operatorer. Eksempelvis impuls og kinetisk energi.

4.2 B) Tilstandspostulatet

Bølgefunksjonen beskriver partikkelens tilstand og er bestemt av Schrödingerligningen.

4.3 C) Forventningsverdipostulatet

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

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

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!