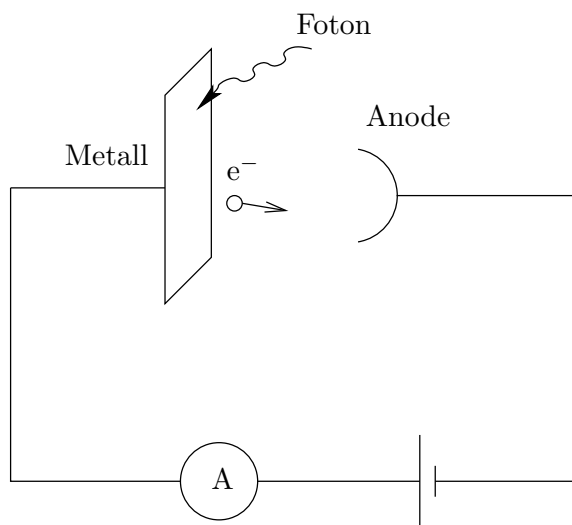


1 Fra kompendiet

1.1 Fotoelektrisk effekt

Lys innfallende på en metallplate, elektroner rives løs. Observeres med elektrisk krets gitt ved figur 1. $V > 0$: Frigjorte elektroner dratt mot anoden. Store positive V : Alle frigjorte elektroner når anoden; strømmen flater ut. $V < 0$: Elektronene bremses, dras mot katoden. Stor nok motspenning ($-|V_0|$): Ingen elektroner når anoden. Bindingsenergi w for elektronene. Svakest bundede w_0 : Arbeidsfunksjonen. Ett elektron absorberer ett foton. Økt lysintensitet: Samme ν gir samme V_0 , men flere frigjorte elektroner som igjen gir større strøm.



Figur 1: Figur som illustrerer oppsettet ved observasjon av fotoelektrisk effekt.

1.2 Røntgenstråling

Elektroner mot metallplate. Elektronene bremses ned og avgir fotoner. Minimum bølgelengde, maks frekvens, blir avgitt dersom elektronet bremses helt opp:

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eV_R}$$

1.3 Comptonspredning

Foton kolliderer med fritt elektron (neglisjerbar arbeidsfunksjon grunnet store energier). Fotoners bevegelsesmengde fås fra følgende formel ved å sette $m = 0$:

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Som gir:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Ved å bruke bevaring av bevegelsesmengde og energi får man:

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

Her er θ spredningsvinkelen til fotonet. Intensiten får to top- per. Den første ved λ' , det spredte fotonets bølgelengde, og λ_0 , det opprinnelige fotonets bølgelengde. Det siste forklares med at et elektron kan være sterkt bundet til atomet slik at fotonet ikke har nok energi til å rive det løs. Da kan vi betrakte kollisjonen som en kollisjon mellom et foton og et atom. Den økte massen til atomet i forhold til elektronet gjør at λ_C blir mye mindre. Da blir $\Delta\lambda \approx 0$ slik at endringen i bølgelengde ikke er observerbar.

1.4 Materiebølger

Materie har bølgeegenskaper, med bølgelengden gitt ved:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Fasehastighet:

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{\frac{2\pi}{\lambda}} = \nu\lambda$$

Gruppehastighet:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Fasehastigheten er materiebølgens hastighet, gruppehastigheten er partikkelens og bølgepakkens hastighet.

1.5 Bohrs atommodell

Bohrradien er definert:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ Å}$$

Bølgelengden ved energioverganger er gitt ved:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{ke^2}{2a_0hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

2 Fra Griffiths

Alle ubestemte integraler går implisitt fra mins uendelig til uendelig dersom ikke annet står.

2.1 Generell teori

2.1.1 Kvantemekanikk i en dimensjon

Schrödingerligningen:

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

Tidsuavhengig Schrödingerligning:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = \hat{H}\psi = E\psi$$

Tilhørende tidsledd:

$$\phi(t) = e^{-iE_n t/\hbar}$$

Normalisering:

$$\int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Forventningsverdien til posisjonen:

$$\langle x \rangle = \int x |\Psi(x, t)|^2 dx$$

Forventningsverdien til bevegelsesmengden:

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

Gitt en operator $\hat{Q}(x, p)$, er forventningsverdien til den tilhørende fysiske størrelsen:

$$\langle \hat{Q}(x, p) \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

Heisenbergs uskarphetsrelasjon:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Alle (interessante) løsninger kan skrives på formen:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \phi_n(t)$$

Konstantene c_n kan bestemmes ved hjelp av Fouriers triks:

$$c_n = \int \psi_n^*(x) f(x) dx$$

Forventningsverdien til energien er gitt ved:

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

En kommutator mellom to operatører er definert ved:

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

Kommutatoren mellom posisjon og bevegelsesmengde er gitt ved:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Den kinetiske energien er gitt ved operatoren:

$$\langle T \rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

2.1.2 Kvantemekanikk i tre dimensjoner

Den tidsavhengige Schrödingerligningen lyder:

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

Her er:

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned}$$

Den tidsuavhengige Schrödingerligningen lyder:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Vi har fortsatt kompletthet av stasjonære løsninger:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum c_{nlm} \psi(\vec{r}) e^{-iE_{nlm}t/\hbar}$$

Normeringsintegralet blir:

$$\iiint |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz$$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty |\psi(r, \phi, \theta)|^2 r^2 \sin \theta dr d\phi d\theta$$

Bevegelsesmengdeoperatoren blir:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

Konsentrerer oss om sentralsymmetriske potensial: $V(\vec{r}) = V(r)$. Separerer så variabler: $\psi(r, \phi, \theta) = R(r)Y(\phi, \theta) = R(r)F(\phi)P(\theta)$. Det gir:

$$F_m(\phi) = e^{im\phi}, \quad m \in \mathbb{Z}$$

$$\begin{aligned} P_l^m &= (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x), \quad x = \cos \theta \\ &= P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \end{aligned}$$

Dette gir begrensningene $l \in \mathbb{N}_0$ og $|m| \leq l$. Oppsummert gir dette at:

$$Y_l^m(\phi, \theta) = N_{lm} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta)$$

$$N_{lm} = \varepsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}$$

$$\varepsilon = \begin{cases} (-1)^m, & m > 0 \\ 1, & m \leq 0 \end{cases}$$

Funksjonene $Y_l^m(\phi, \theta)$ kalles sfærisk harmoniske og er ortogonale, det vil si:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^m(\phi, \theta)^* Y_{l'}^{m'}(\phi, \theta) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

For radialdelen $R(r)$ innfører man ofte en hjelpefunksjon $u(r) = rR(r)$. Det gir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \right] u = Eu$$

Denne har altså samme form som Schrödingerligningen i én dimensjon; $u(r)$ er en slags pseudobølgefunksjon, effektiv radiell materiebløge. Leddet inne i klammaparantesen kalles det effektive potensialet der det siste leddet er en sentrifugalterm.

Vinkeldelen er allerede normert, så normeringsintegralet reduseres nå til:

$$\int_0^\infty r^2 |R(r)|^2 dr = \int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1$$

Det gjør at vi definerer den radielle sannsynlighetstettheten:

$$P(r) = r^2 |R(r)|^2 = |u(r)|^2$$

2.1.3 Spinn

Alle partikler har et innebygget magnetisk dipolmoment (spinn). Denne egenskap er uløselig tilknyttet partikkelen, på samme måte som dens ladning eller masse. Selv om spinn er en rent kvantemekanisk effekt, finnes det mer matematiske analogier til angulærmoment. Noen fakta:

- Dipolmoment:

$$\vec{\mu}_s = -g_e \frac{e}{2m_e} \vec{S}, \quad g_e \approx 2$$

g_e er her den gyromagnetiske faktor.

- Kvantisering av totalspinn:

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

Fermioner har halvtallig spinn (halvtallig s), bosoner har heltallig spinn (heltallig s).

- Kvantisering av spinnkomponent:

$$S_z = m_s \hbar, \quad m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$$

Spinn inkluderes i notasjonen av bølgefunksjonen på følgende måte:

$$\psi_{nlmm_s} = \psi_{nlm}(r, \phi, \theta) \chi_{m_s}$$

Dette er ikke et vanlig produkt, men symboliserer hva bølgefunksjonen består av. χ oppfyller:

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 \chi &= s(s+1)\hbar^2 \chi \\ \hat{S}_z \chi &= m_s \hbar \chi \end{aligned}$$

Det faktum at elektronet har spinn medfører spinn-banekobling. Elektronets spinn-angulærmoment vekselvirker med strømsløyfen satt opp av protonet og medfører ytterligere oppsplitting av energinivåene, men denne korreksjonen er liten i atomer:

$$\hat{H}_{LS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_{\text{int}} = \text{konstant} \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$$

2.1.4 Addisjon av angulærmoment

Har sett at \vec{L} og \vec{S} er svakt koblet. Derfor er de strengt tatt ikke kvantisert/bevart uavhengig av hverandre. Det er derimot summen $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (totalt angulærmoment). Reglene for å addere er de samme enten vi adderer to spinn, to angulærmoment eller en av hver. Vi har følgende regler:

$$\begin{aligned} J &= \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad j = |l-s|, |l-s+1|, \dots, l+s \\ J_z &= m_j \hbar, \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j \end{aligned}$$

Vi har tre spinnkombinasjoner som er symmetriske, og utgjør tripletten for spinn 1/2-partikler:

$$\{\uparrow, \uparrow\}, \{\downarrow, \downarrow\}, \{\uparrow, \downarrow\} + \{\downarrow, \uparrow\}$$

Den antisymmetriske kombinasjonen kalles singlet, og lyder:

$$\{\uparrow, \downarrow\} - \{\downarrow, \uparrow\}$$

Dette er summen av spinn for to spinn 1/2-partikler.

2.1.5 Flerpartikkelsystemer

Felles bølgefunksjon $\Psi(x_1, x_2, t)$. Sannsynlighetstettheten er gitt ved $|\Psi(x_1, x_2)|^2$. Schrödingerligningen er en energiligning, så for to partikler inngår summen av de to partiklers kinetiske energi:

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) \psi(x_1, x_2) + \\ &U(x_1, x_2) \psi(x_1, x_2) = E \psi(x_1, x_2) \end{aligned}$$

Potensiell energi kan være både eksternt potensiale og vekselvirkning mellom partiklene. To muligheter:

- Bare eksternt potensiale: $U(x_1, x_2) = U(x_1) + U(x_2)$.
- Vekselvirkning mellom partiklene: $U(x_1, x_2) \neq U(x_1) + U(x_2)$.

For to ikkevekselvirkende (ikke identiske) partikler har vi:

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) &= \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \\ E &= E_a + E_b \end{aligned}$$

I kvantemekanikken kan vi ikke skille mellom identiske partikler, for eksempel to elektroner. Det betyr at vi må ha:

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2 \Rightarrow$$

$$\psi(x_1, x_2) = \alpha \psi(x_2, x_1), \quad |\alpha|^2 = 1$$

I 3D er kun $\alpha = \pm 1$ tillatt. $\alpha = +1$ gir bosoner med heltallig spinn, $\alpha = -1$ gir fermioner med halvtallig spinn. Skal bølgefunksjonen beskrive fermioner må vi derfor konstruere en antisymmetrisk bølgefunksjon (det er dette som kalles $\alpha = -1$). Da må enten romdelen være symmetrisk og spinndelen være antisymmetrisk, eller romdelen være antisymmetrisk og spinndelen symmetrisk. Symmetrisk romdel:

$$\psi_S = \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)$$

Antisymmetrisk:

$$\psi_A = \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)$$

For spinndelen, se seksjonen om spinn.

Paulis eksklusjonsprinsipp Dersom $a = b$ blir $\psi_A = 0$. Det gjør at eneste mulighet for fermioner er symmetrisk romdel og antisymmetrisk spinndel. Altså kan to identiske fermioner aldri ha samme sett kvantetall, dvs kan aldri være i samme en-partikkeltilstand. Bosoner har ingen slik begrensning.

Hunds regel Ved fylling av "underskall" (dvs en gitt verdi på l , for eksempel en p-orbital), foretrekker spinnene å være i en symmetrisk tilstand; fyller opp ulike m_l først. Dette minimerer Coulombenergien ved hjelp av exchange.

Exchange-vekselvirkning En ren kvanteeffekt som gjør at identiske partikler med symmetrisk romlig bølgefunksjon har en tendens til å være litt nærmere hverandre enn de med antisymmetrisk romlig bølgefunksjon. Anta at vi har to partikler i tilstand ψ_a og ψ_b . Definerer så avstanden $(\Delta x)^2 = (x_1 - x_2)^2$. Får da:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_S = \langle (\Delta x)^2 \rangle_{\text{ii}} - 2|\langle x \rangle_{ab}|^2$$

$$\langle(\Delta x)^2\rangle_A = \langle(\Delta x)^2\rangle_{ii} + 2|\langle x\rangle_{ab}|^2$$

$$\langle x\rangle_{ab} = \int \psi_a^* x \psi_b dx$$

ii indikerer ikke-identiske partikler. Korreksjonen $\langle x\rangle_{ab}$ forsvinner dersom overlappet mellom ψ_a og ψ_b er null, så det er ikke nødvendig å ta hensyn til (anti)symmetrisering hvis partiklene er langt fra hverandre.

3 Molekyler

Bindingstyper:

- Ionebinding (sterkest): Coulombtiltrekning mellom motsatt ladde ioner. Eks.: NaCl.
- Kovalent binding: Atomer “deler elektroner”. Eks: H₂. To elektroner i singlettilstand i felles s-orbital.
- Hydrogenbinding: H⁺ mellom to negative ioner; for eksempel HF₂⁻.
- Van der Waals-binding: Dipol-dipol-vekselvirkning mellom molekyler.

Molekylers vibrasjon og rotasjon: Bidrag til molekylers “indre” energi er elektronisk (orbitalene i enkeltatomer, modifisert - er komplisert), rotasjon og vibrasjon. Har da $E = E_{\text{el}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}}$.

3.1 Rotasjon

Ser på et diatomisk molekyl, rotasjon rundt massesenteret. Klassisk utledning av rotasjonsenergien gir:

$$E_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I_{\text{cm}}}$$

I kvantemekanikken får vi da:

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I_{\text{cm}}} l(l+1)$$

$l = 0, 1, \dots$ kalles rotasjonskvantetallet. For to identiske atomer er l partall eller 0. Et diatomisk molekyl har to (ikke tre) uavhengige rotasjonsakser. Rotasjon rundt molekylets akse bidrar ikke til spekteret fordi atomene har så liten utstrekning av treghetsmomentet er tilnærmet 0.

3.2 Vibrasjon

Effektivt potensiale mellom atomene i molekylet tilnærmes med harmonisk oscillatorpotensialet. Et gir:

$$E_{\text{vib}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n \in \mathbb{N}$$

n kalles rotasjonskvantetallet, og E_0 kalles nullpunktsenergi og denne vibrasjonen er alltid tilstede. Energinivåene øker lineært, der $\Delta E_{\text{vib}} \gg \Delta E_{\text{rot}}$ typisk. I tillegg er $\Delta E_{\text{vib}} \gtrsim kT$ som gjør at termisk eksitasjon av vibrasjon ikke skjer. Rotasjon eksiteres mye lettere.

3.3 Molekylspektra

Ikke alle overganger i rot-vib-spekteret er tillat. har følgende føringer:

$$\begin{aligned} |l_1 - l_2| &= 1 \\ |n_1 - n_2| &= 1 \end{aligned}$$

Kan altså ikke ha rene vibrasjons- og rotasjonsoverganger.

3.3.1 Nyttige bemerkninger

- Et sett av egenverdier $\{\lambda_n\}$ til en operator kalles operatorens spektrum. Dersom to eller flere egenfunksjoner har samme egenverdi sier vi at tilstanden er degenerert.
- To operatorer som kommuterer med hverandre kan bestemmes skarpt samtidig, det vil si ha felles egenfunksjoner. Kalles kompatible variable. To operatorer som ikke kommuterer kan ikke bestemmes skarpt samtidig. Kalles ikke-kompatible. Det finnes en uskarphetsrelasjon for hvert par av ikke-kompatible variable. Har nemlig den nære sammenhengen:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \left\langle [\hat{A}, \hat{B}] \right\rangle \right)^2$$

Vi stiller følgende matematiske krav til ψ :

- Når man skal “skjote sammen” bølgefunksjoner, det vil si løsninger av Schrödingerligningen for forskjellige potensial, må $\psi(x)$ være kontinuerlig i skjøtepunktet.
- Tilsvarende som over må $d\psi/dx$ være kontinuerlig i dette punktet. Dette kravet gjelder ikke dersom det ene potensialet i skjøten går mot uendelig.
- Bølgefunksjonen må være normerbar, det vil si at den må gå mot 0 i grensene når $x \rightarrow \pm\infty$.

3.4 Løste problemer

3.4.1 Uendelig brønn

Har definert potensialet:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dersom } 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{ellers} \end{cases}$$

Dette gir løsningene:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{N}$$

De har følgende egenskaper:

- De er vekslende odde og like med hensyn på senteret av brønnen: ψ_1 er lik, ψ_2 er odde og så videre.
- Når man går opp i energi har hver tilstand en mer node: ψ_1 har ingen, ψ_2 har 1 og så videre.

- De er ortogonale, det vil si:

$$\int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{dersom } m \neq n \\ 1, & \text{dersom } m = n \end{cases}$$

3.4.2 Harmonisk oscillator

Har definert potensialet:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Grunntilstanden er gitt ved:

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

De resterende er gitt ved heve- og senkeoperatorer definert ved:

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} (\mp i p + m \omega x)$$

Slik at:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_+)^n \psi_0$$

De tilhørende energinivåene er gitt ved:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

3.4.3 Fri partikkel

Ved innsetting $V(x) = 0$ i Schrödingerligningen fåes en planbølge med skarp k :

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Denne er slik den står ikke normaliserbar. Triks: Putt partikkelen på en sirkel slik at $\psi(0) = \psi(a)$. Den er da normaliserbar og vi kan la $a \rightarrow \infty$.

3.4.4 Partikkel i endelig boks

Har nå definert potensialet:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{dersom } -a \leq x \leq a \\ 0, & \text{dersom } |x| > a \end{cases}$$

V_0 er her en definert positiv størrelse. Deler så inn området i 3 suksessivt, Det gir:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A e^{\kappa x}, \quad x \leq -a \\ \psi_{II}(x) &= C \sin(lx) + D \cos(lx) \\ \psi_{III}(x) &= B e^{-\kappa x}, \quad x \geq a \end{aligned}$$

Her er:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m|E_n|}}{\hbar}$$

Må så ta hensyn til kontinuitetskravene (både at $\psi(x)$ og $d\psi/dx$ skal være kontinuert). For like (symmetriske) løsninger: $C = 0$, $D \neq 0$. Dette gir ligningen:

$$\kappa = l \tan(la)$$

Her er:

$$l = \frac{\sqrt{2m(V_0 - |E_n|)}}{\hbar}$$

De odde (antisymmetriske) løsningen gir tilsvarende betingelsen:

$$l \cot(la) = -\kappa$$

Dette er transcendentale ligninger og må løses numerisk eller grafisk. Ut fra disse ligningene kommer de tillatte energinivåene.

3.4.5 Potensialbarriere (tunnelering)

Definerer potensialet:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{dersom } 0 \leq x \leq L \text{ (område I og III)} \\ 0, & \text{ellers (område II)} \end{cases}$$

Antar så $0 < E < V_0$. Schrödingerligningen gir da:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x} \\ \psi_{III}(x) &= F e^{ikx} + G e^{-ikx} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \kappa &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \end{aligned}$$

Antar ingen innkommende bølge fra høyre ($G = 0$). Definerer så refleksjonskoeffisienten R og transmisjonskoeffisienten T :

$$\begin{aligned} R &= \left| \frac{B}{A} \right|^2 \\ T &= \left| \frac{F}{A} \right|^2 \end{aligned}$$

Ved kontinuitetskrav får man:

$$T = \left[\cosh^2(\kappa L) + \frac{(k^2 - \kappa^2)^2}{4\kappa^2 k^2} \sinh^2(\kappa L) \right]^{-1}$$

Det betyr at $T > 0$ for $E < V_0$, som betyr at tunnelering forekommer.

3.4.6 Hydrogenatomet

Har nå Coulombpotensialet:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Setter denne inn i radalligningen. Løsningene klassifiseres av et tredje kvantetall, n , hovedkvantetallet, med føringene $n \in \mathbb{N}$, $l < n$. Energispekteret får følgende form:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2}$$

Her er det mange tilstander med samme energi (ulike l og m for gitt n). Finner så degenerasjonsgraden: For hver l er det $2l + 1$ muligheter for hva kvantetallet m kan være. Det gir:

$$\begin{aligned} d(n) &= \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 2 \sum_{l=0}^{n-1} l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 \\ &= 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \end{aligned}$$

$l = 0$ gir kulesymmetrisk elektronsky, $l > 0$ gir ikke en kulesymmetrisk elektronsky. Vi har også operatører for angulærmoment:

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

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} = m\hbar$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Hva kan kvantetallene være?

$$n \in \mathbb{N}, \quad l \in \{\mathbb{N}_0 \mid l < n\}, \quad -l \leq m \leq l$$

3.4.7 Stern-Gerlach-eksperimentet

Et hydrogenatom i et inhomogent \vec{B} -felt forventer man avbøyning grunnet hydrogenatomets dipolmoment:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \hat{L}$$

Dette fordi en dipol vil påvirkes av en kraft som er proporsjonal med $L_z = m\hbar$. Forventer da én linje på skjermen ved $l = m = 0$. Det ble derimot observert to linjer. Forklaring: Elektronets egenspinn.

3.4.8 Zeemaneffekt

Dersom et hydrogenatom beveger seg i et homogent \vec{B} -felt får Hamiltonoperatoren et tilleggsled grunnet hydrogenets dipolmoment. Velger B -feltet til å være i z -retningen. Da blir den nye Hamiltonoperatoren:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + \frac{eB}{2m_e} L_z$$

Det gir at energispekteret endres:

$$E_{ny} = E_{gammel} + \frac{eB}{2m_e} L_z = E_{gammel} + \frac{eB}{2m_e} m\hbar$$

Den normale Zeemaneffekten er nettopp at energien ikke lenger bare er avhengig av n , men også av m slik at degenerasjonen splittes opp i B -feltet. Dette fører igjen til oppsplitting av spektrallinjene. Ved $l = 0$ er $m = 0$, så her skal det ikke bli noen oppsplitting av spektrallinjene. I praksis er oppsplittingen enda litt mer komplisert på grunn av spinn.

4 Faste stoffers fysikk

Ser på krystaller, noe som ofte er tilfelle. Bindingsmekanismene er de samme som i molekyler. Det er kvantemekanikken

som avgjør om et stoff er en leder, halvleder eller isolator. Har mange forskjellige krystallstrukturer, i 3D er det et begrenset antall. Eksempler: Kubisk, BCC (body-centered cubic) og FCC (face-centered cubic). Karakterisering av krystallstruktur skjer ved Braggspredning. Bindigstypene:

- Kovalent krystall: Hvert atom har sterke kovalente bindinger med sine naboer. Harde, dårlig ledningsevne (valenselektronene er "låst" i bindingene. Eks.: Diamant.
- Ionekrystall: For eksempel NaCl. Ingen frie valenselektroner fører til dårlig ledningsevne.
- Molekylkrystall (H_2 , N_2 , osv): Holdes sammen av permanente eller induserte dipolkrefter. Fluktuasjonsindusert dipolbinding er meget svak, som fører til lavt smeltepunkt.
- Metaller: Antall valenselektroner "matcher" ikke i forhold til rent kovalente bindinger. Valenselektroner "til overs", dvs kan bevege seg relativt fritt gjennom krystallen. Ledningselektroner: Deltar i elektrisk ledning siden de relativt lett kan reagere på et ytre elektrisk felt. Man kommer relativt langt med "fri-elektron-modellen" som beskriver ledningselektronene som en fri elektrongass.

4.1 Ledningsevne

Må ta hensyn til elektronenes bølgenatur. Ohms lov gjelder fortsatt, men større midlere tid mellom hver kollisjon (bølger kan gå uforstyrret gjennom periodisk krystall). Elektrosik motstand skyldes primært gittersvingninger (avhengig av temperaturen) og uregelmessigheter i krystallen ("urenheter").

4.2 Båndteori

Hva er energinivåene for elektronene i en krystall? a) Se på hva som skjer med enkeltatomers energinivåer når de kombineres til en krystall, b) Begynne med frie elektroner - hva er konsekvensen av ionegitteret.

- a) Hva skjer når enkeltatomer kommer sammen? Konkret: Ved to Na-atomer i stor avstand overlapper ikke bølgefunksjonene og det blir ingen tunnelering mellom atomene. Dersom de er litt nærmere hverandre overlapper bølgefunksjonene, og vi får to uavhengige lineærkombinasjoner av bølgefunksjonene (symmetrisk og antisymmetrisk omkring midtpunkt ("tunneleringsbariæren"). Disse to har ulik energi, som gjør at degenerasjonen splittes. $\psi_1 + \psi_2$ har lavest energi (tettst bundet, høy sannsynlighetstetthet mellom kjernene). N atomer gir N uavhengige lineærkombinasjoner med hver sin energi. De danner da et bånd dersom N er stor, energibånd. Dette båndet kalles et 3s-bånd. Bredden på dette båndet avhenger av avstanden mellom atomene, ikke antall atomer. Vi får da et kontinuum av tillatte egentilstander i båndet i en krystall bestående av mange atomer. En orbital i et atom med gitt l har plass til $2(2l + 1)$ elektroner (2 på grunn av spinn). Et bånd i en N -atomkrystall består av N slike tilstander som gjør at det er plass til $2N(2l + 1)$ elektroner i båndet.

Båndstrukturen (om det øverste båndet er fylt) og gapet opp til neste tomme bånd avgjør ledningsegenskapene til et stoff. For metaller er øverste bånd delvis fylt. Det krever lite energi å eksitere de øverste elektronene til nærmeste "ledige" tilstand. Kan derfor lett reagere på et elektrisk felt og delta i ladningstransport (strøm). Eks: Natrium: Øverste skall halvfull - mange ledige tilstander i nærheten av de besatte.

Isolatorer: Ledningsbåndet tomt, valensbåndet fylt, gjør at gapet blir stort så nesten ingen termisk eksiterte elektroner ved "normale" temperaturer fører til dårlig ledningsevne.

Halvledere: Som isolator, men mye mindre gap. Det gir dårlig ledningsevne ved lave temperaturer, men ved moderate/høye T vil en del elektroner være termisk eksitert til neste bånd og kan delta i ladningstransport. Det gir ledningsevnen øker med økende temperatur (i motsetning til metaller).

b Båndstruktur utledet fra "nesten frie elektroner". Elektroner beskrives som materiebølger; Braggspredning mot ionene i krystallen. Ser på 1D. Frie elektroner (palnbølger): $\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$, $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Braggspredning: $2a \sin \theta = n\lambda$. I vårt tilfelle er $\theta = 90^\circ$, som gir $2a = n\lambda = \frac{2\pi n}{|k|}$. For $2a = n\lambda$ er innkommende og reflektert bølge i fase, som gir stående bølger. To kombinasjoner:

$$\begin{aligned}\psi^+ &= e^{ikx} + e^{-ikx} = 2 \cos(kx) \\ \psi^- &= e^{ikx} - e^{-ikx} = 2i \sin(kx)\end{aligned}$$

Det gir $k = \frac{n\pi}{a}$. Ved andre verdier på k midles refleksjonen fra krystallen til 0. Hvorfor gap? Første refleksjonsmaksimum: $k = \pm \frac{\pi}{a}$. Ser på denne:

$$\begin{aligned}|\psi^+|^2 &\propto \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \text{ max ved } x = 0, a, \dots \\ |\psi^-|^2 &\propto \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \text{ min ved samme}\end{aligned}$$

$|\psi^+|^2$ har lavest elektrostatisk energi.

4.3 Halvledere

Termisk eksitasjon: Elektroner i ledningsbåndet. Hull i valensbåndet. Med E -felt: Elektronene i ledningsbåndet går mot feltretningen, hullene beveger seg med feltet. Det gir strøm. Like mange elektroner som hull. "Intrinsic" halvleder. Typisk Ge, Si. Kovalente, tetravalente, dvs fire valenselektroner.

Doping:

- n-type: Erstatte en liten del av atomene med pentavalente atomer, dvs fem valenselektroner. Valenselektroner blir da "til overs".
- p-type: Doper med trivalente atomer, dvs tre valenselektroner, som gir "hull til overs".

Dopede halvledere har mye større ledningsevne enn ikkedopede.

Dioder: Leder strøm bare en vei ("likeretter"). p-n-overgang. Elektroner i ledningsbånd "faller ned" i hull i valnes. Tømmes for ledningselektroner på et øyeblikk - ikke strøm.

Transistorer: Forsterker. pnp eller npn overganger. Basestrøm: Positivt ladningsoverskudd fra de rekombinerte hullene, "dras ut". Liten endring i basestrømmen gir da en stor endring i kollektorstrømmen.

5 Nyttige matematiske relasjoner

Sfæriske koordinater:

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \\ dx dy dz &= r^2 \sin \theta dr d\phi d\theta\end{aligned}$$

Naturlige tall:

$$\begin{aligned}\mathbb{N} &= \{1, 2, 3, \dots\} \\ \mathbb{N}_0 &= \{0, 1, 2, 3, \dots\}\end{aligned}$$

6 Nyttige fysiske konstanter

$$\begin{aligned}hc &= 1240 \text{ eVnm} \\ \hbar c &= 197.3 \text{ eVnm} \\ m_e &= 0.5110 \text{ MeV}/c^2\end{aligned}$$