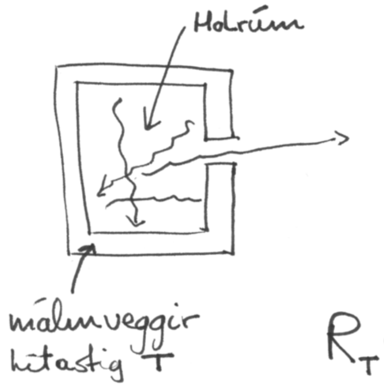
Skammtafræði

Upphaf skammtafræðinnar

Geislunarlögmál Plancks

svarthlutargeislun ⟷ óháð efni



Styrkur ljóss út um gatið sem fall af ν og T

$$R_T(\nu) = \frac{\text{Orka út um gat}}{\text{flatar-tíma og tíðni-eining}}$$

$$\longrightarrow \quad R_T(\nu)d\nu = \frac{\text{Afl}}{\text{flatarein.}}$$

fyrir ljós á bilinu $[\nu, \nu + d\nu]$

$$\rho_T(\nu)d\nu = \frac{\text{Orkan í holrúminu á } [\nu, \nu+d\nu]}{\text{Rúmmál holrúms}}.$$

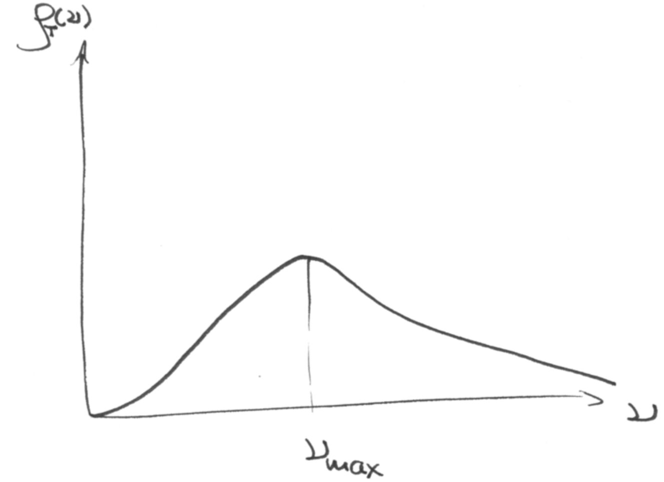
er orku þéttleiki

þessar tvær stærðir eru tengdar

$$R_T(\nu) = \frac{c}{4}\rho_T(\nu)$$

Staðreyndir

Geislunin var mæld 1899



mælingar sýndu einnig

$$\nu_{max} \sim T \qquad \text{lögmál Wiens}$$

$$\frac{\text{Heildarafl}}{\text{flatarein}} = \int_0^\infty R_T(\nu)\,d\nu = \sigma T^4 \quad \text{mælt 1879}$$

Stefan-Bolzmanns lögmálið

Klassísk eðlisfræði ⟺ tilraun

Rayleigh Jeans 1900

$$\rho_T(\nu) = \text{fasti} \cdot T \nu^2 \qquad \text{fyrir öll } \nu$$

$$\rightarrow \int_0^\infty \rho_T(\nu)\,d\nu = \infty$$

ultraviolet Catastrophy

í mótsögn við tilraunir

Planck (okt 1900)

leiddi út

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

h: plancks fasti $\quad [h] = \text{orka} \cdot \text{tími}$

k: Bolzmanns fasti $\quad [k] \quad \text{orka}/\text{hitastig}$

$\boxed{\text{Samrýmist tilrauna niðurstöðum}}$

(óútskýrðar)

notaði forsendur um orku rafsegulbylgna sem ekki voru samkvæmt sígildri eðlisfræði t.þ.a. fá réttar niðurstöður

upphafið af skammtafr.

Útleiðsla á $\rho_T(\nu)$

Í holrúminu eru standandi rafsegulbylgjur, sem skiptast á orku við veggina

Viljum finna meðalorku bylgna af ýmsum tíðnum með aðferðum safneðlisfræði

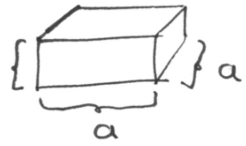
$$\rho_T(\nu) = \underbrace{D(\nu)}_{\text{þéttleiki sveiflumáta með } \nu} \cdot \underbrace{\langle E(\nu,T)\rangle}_{\text{meðalorka hvers sveiflumáta}}$$

þ.s. fyrir jöfnu Plancks gilti:

$$D(\nu) = \frac{\text{fjöldi hátta}}{\text{tíðni og rúmein.}} \sim \nu^2$$

$$\langle E(\nu,T)\rangle = \text{meðalorka} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1}$$

D(ν) fundið

teningsholrúm 

Verðum að leysa bylgjujöfnuna

$$\Box \vec{E}(\vec{r},t) = 0$$

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2} - \nabla^2\right)\vec{E}(\vec{r},t) = 0$$

með jaðarskilyrðunum:

$\bar{E}$ hornrétt á yfirborðið

$\dot{\vec{B}} = -\vec{\nabla}\times\vec{E}$ samsíða yfirborði

+ engar hleðslur í holrúmi $\rightarrow$ $\vec{\nabla}\cdot\vec{E} = 0$

Lausnir

$$E_x(\vec{r}) = E_{x0}\cos\left(n_x\pi\frac{x}{a}\right)\sin\left(n_y\pi\frac{y}{a}\right)\sin\left(n_z\pi\frac{z}{a}\right)$$
$$E_y(\vec{r}) = E_{y0}\sin(\quad)\cos(\quad)\sin(\quad)$$
$$E_z(\vec{r}) = E_{z0}\sin(\quad)\sin(\quad)\cos(\quad)$$

$$n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2 \ldots$$

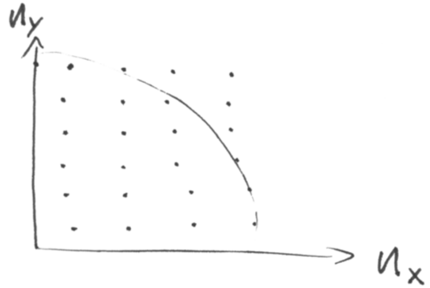
og $$n_x E_{x0} + n_y E_{y0} + n_z E_{z0} = 0 \quad , (\bar{\nabla} \cdot \bar{E} = 0)$$

og $$\nu^2 = \frac{c^2}{4a^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (\Box E = 0)$$

fjöldi hátta að tíðni ν

$\equiv$ vídd lausnarrúmsins (fjöldi línulega óháðra lausna) með gefið ν

Háttur ákvarðast af (n_x, n_y, n_z) og skautunarstefnu



Hættir með tíðni $\leq \nu$ liggja innan kúlu með geisla

$$\frac{2a}{c}\nu$$

því $$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{2a\nu}{c}\right)^2$$

Þessi fjöldi er

tökum einungis $(n_x, n_y, n_z) \geq 0$

$$f(\nu) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3}\left(\frac{\nu \cdot 2a}{c}\right)^3 = V\frac{8\pi}{3c^3}\nu^3$$

Þ.s. $a^3 = V$ notum a stórt -> þéttar tíðnir

Þá er

$$D(\nu) = \frac{1}{V}\frac{d}{d\nu}f(\nu)$$

$$\longrightarrow \boxed{D(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2}$$

ástandsþéttleiki

Nú þarf að finna $\langle E(\nu,T)\rangle$

athugum frumatriði í safneðlisfræði

„lítið kerfi" sem getur verið í aðgreinanlegum ástöndum $\alpha = 1,2\ldots$ með orku E_α í tengslum við varmabað:

Viljum sýna:

líkindi fyrir því að kerfið sé í ástandi α:

ekki með orku E_α

$$\boxed{P(\alpha,T)=\frac{1}{Z(T)}e^{-E_\alpha/kT}}$$

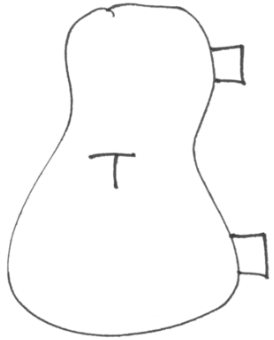
$$Z=\sum_\alpha e^{-E_\alpha/kT}$$

Boltzmanns dreyfing

t.þ.a. $\sum_\alpha P(\alpha,T)=1$

forsenda

fyrir fast T eru líkindin $P(\alpha,T)$ eingöngu háð E_α $\to$ $P(\alpha,T)=f(E_\alpha)$



Kerfi 1 $\{\alpha_i^{(1)} \mid i=1,2\ldots\}$

kerfi 2 $\{\alpha_i^{(2)} \mid i=1,2,\ldots\}$

Kerfin eru óháð því eru líkindin fyrir því að K1 sé í $\alpha_i^{(1)}$ og K2 í $\alpha_j^{(2)}$

$$f_1(E_{\alpha_i^{(1)}})\cdot f_2(E_{\alpha_j^{(2)}})$$

hinsvegar má líta á kerfin sem eitt samsett kerfi

$$\to f_{12}(E_{\alpha_i^{(1)}}+E_{\alpha_j^{(2)}})$$

þ.a.

$$f_1(E)\cdot f_2(E') = f_{12}(E+E')$$

samfelld föll og E_α liggja þétt

$$\longrightarrow \begin{cases} f_1(E) = \dfrac{1}{f_2(0)}\, f_{12}(E) \\[2ex] f_2(E') = \dfrac{1}{f_1(0)}\, f_{12}(E') \end{cases}$$

$$\longrightarrow \begin{cases} f_1(E) = C_1\, f(E) \\ f_2(E) = C_2\, f(E) \\ f_{12}(E) = C_{12}\, f(E) \end{cases}$$

sama fallið

$$\longrightarrow f(E)f(E') = f(0)\cdot f(E+E')$$

fasti

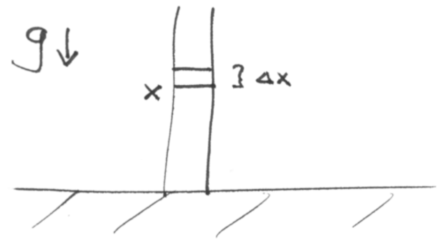
$$\longrightarrow f(E) = A\, e^{-\beta(T)E}$$

þ.s. $\beta(T)$ er óháð kerfinu

Viljum sýna:

$$\beta(T) = \frac{1}{kT}$$

Notum sértilfelli: kjörgas í þyngdarsviði



ástandsjafna

$$pV = nRT$$

$$\longrightarrow p = \rho kT$$

þ.s. notað var $k = \dfrac{R}{N_A}$, $\rho = \dfrac{nN_A}{V}\left[\dfrac{\text{gassameindir}}{\text{rúmmál}}\right]$

$$\longrightarrow p(x+\Delta x) = p(x) - \Delta x\cdot\rho(x)\cdot mg$$

$$\longrightarrow \frac{dp}{dx} = -\rho(x)mg$$

notum ástandsjöfnuna $p = \rho kT$

$$\longrightarrow \quad \frac{dp}{dx} = kT\frac{d\rho}{dx} = -\rho(x)mg$$

$$\longrightarrow \quad \frac{d\rho(x)}{dx} = -\frac{mg}{kT}\rho(x)$$

$$\longrightarrow \rho(x) = \rho(0)\, e^{-mgx/kT} = \rho(0)\, e^{-E(x)/kT}$$

sem bera má saman við

$$f(E) = A\, e^{-\beta(T)E(x)}$$

$$\longrightarrow \quad \beta(T) = \frac{1}{kT}$$

Lítum á rafsegulsvið í holrúmi

$$\vec{E} = \sum_{\text{hættir}} \vec{E}^{(i)}, \quad \vec{B} = \sum_{\text{hættir}} \vec{B}^{(i)}$$

Orkan er

$$W = \sum_i w_i$$

~~með~~

$$W^{(i)} = \frac{1}{2}\int \left(\epsilon_0 |\vec{E}_i|^2 + \frac{1}{\mu_0}|\vec{B}_i|^2\right) d\vec{r}$$

hægt er að sýna að

$$\longrightarrow \quad W^{(i)} = \frac{1}{2}\left(\dot{X}_i + \omega_i X_i^2\right)$$

þar sem X_i mælir styrk sviðsins í sveifluhætti i

<u>þetta er eins og orka hreintóna sveifils!</u>

meðalorka hreintóna sveifils í tengslum við varmabað

$$\langle E \rangle = \frac{\int W(\dot{x},x)\, e^{-W(\dot{x},x)/kT}\, dx\, d\dot{x}}{\int e^{-W(\dot{x},x)/kT}\, dx\, d\dot{x}}$$

$$= kT$$

þ.s. $W(\dot{x},x) = \text{fasti}\,(\dot{x}^2 + \omega^2 x^2)$ er orkan í ástandi $(\dot{x},x)$

$$\longrightarrow \langle E \rangle = kT$$

$$\longrightarrow \rho_T(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2 \cdot kT$$

Sem er niðurstaða Rayleigh og Jeans sem er ekki rétt því

$$\int_0^\infty \rho_T(\nu)\, d\nu = \infty$$

Hvað er rangt í útleiðslunni?

Planck sá að eftirfarandi tilgáta (órökstudd) (bragð) gæti rétta lausn

---

Ef sveifillinn getur ekki haft hvaða orkugildi sem er heldur eingöngu:

$$n \cdot \varepsilon_1 \;,\quad n = 0, 1, 2 \ldots\ldots$$

með ε_1 = fasti sem auðkennir sveifilinn þá fæst

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (n\varepsilon_1)\, e^{-n\varepsilon_1/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon_1/kT}}$$

notum $\sum_{n=0}^{\infty} n q^n = \frac{q}{(1-q)^2}$

þá fæst

$$\langle E \rangle = \frac{\varepsilon_1 e^{-\varepsilon_1/kT}}{1-e^{-\varepsilon_1/kT}}$$

$$= \frac{\varepsilon_1}{e^{\varepsilon_1/kT}-1}$$

<u>Ath</u> ef $\varepsilon_1 << kT$ þ.e. $e^{\varepsilon_1/kT} - 1 \simeq \varepsilon_1/kT$

og því $\langle E \rangle \simeq kT$

eins og áður

Planck setur $\boxed{\varepsilon_1 = h\nu}$ h: fasti

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

og því

$$\boxed{\rho_T(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1}}$$

mælingar á $\rho_T(\nu)$ geta því gildin fyrir h og k

$$h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}$$

$$k = 1{,}381 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{J/K}$$

---

hversvegna er orka sveifilins skömmtuð ?

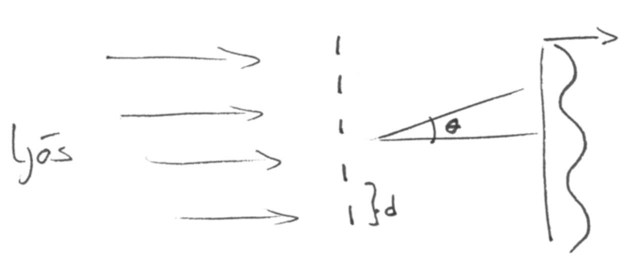
og hversvegna fæst $\varepsilon_1 = h\nu$

Ljóseindir

Nokkur dæmi um eiginleika ljóss

ljós kemur fram sem → bylgjur
→ straumur agna

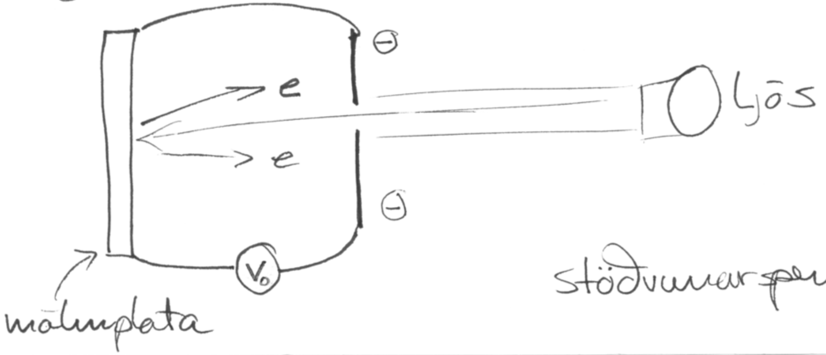
bylgjuvixl



toppar við
$n\lambda = d \sin\theta$

Ljós hagar sér sem bylgjur

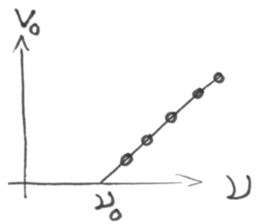
Ljósröfun



stöðvunarspenna V_0

Til er V_0 þ.a. fyrir $V > V_0$ ná engar rafeindir til plötunnar

V_0 er háð ν og óháð styrk þess I



fyrir $\nu < \nu_0$ flýtur enginn straumur óháð I.

tilraunir gefa

vinnufall

$$eV_0 = h\nu - W_0 \quad , \quad W_0 = h\nu_0$$

Einstein 1905:

Hér hegðar ljósið sér sem straumur agna þ.s. hver ögn fyrir sig hefur orkuna

$$\boxed{E = h\nu}$$

Orku þéttleikinn

$$\epsilon_0|\bar{E}|^2 + \frac{1}{\mu_0}|\bar{B}|^2$$

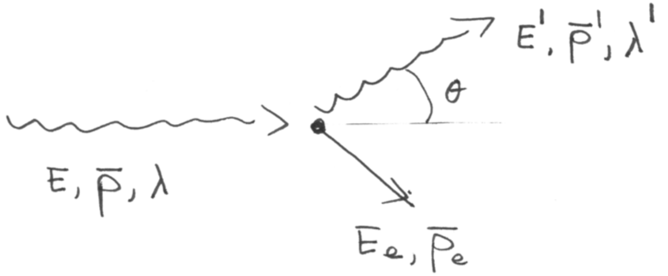
segir ekkert um orku einstakrar agnar, heldur aðeins fjölda þeirra

Compton hrif

Árekstur ljóseindar og rafeindar

Ljós $\Leftrightarrow$ eind

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{með orku} \quad E = h\nu \\ \text{og skriðþ.} \quad |\bar{p}| = \dfrac{E}{c} = \dfrac{h}{\lambda} \end{array}}$$



ef ljós er bylgja krefst klassískt eðlisfr.

$\lambda' = \lambda$ (tvípólsgeislun)

Orka

$$E + m_e c^2 = E' + E_e$$

skriðþ. $\bar{p} = \bar{p}' + \bar{p}_e$

$$\bar{p} - \bar{p}' = \bar{p}_e \qquad \frac{E}{c} - \frac{E'}{c} + m_e c = \frac{E_e}{c}$$

notum 4-vektorana

$$\left(\frac{E_e}{c}\right)^2 - |\bar{p}_e|^2 = m_e^2 c^2 \quad \text{rafeind}$$

og

$$\left.\begin{array}{l} \left(\dfrac{E}{c}\right)^2 - |\bar{p}|^2 = 0 \\ \left(\dfrac{E'}{c}\right)^2 - |\bar{p}'|^2 = 0 \end{array}\right\} \text{ljóseindir}$$

og $\boxed{E = h\nu \ , \ E' = h\nu'}$ $\qquad \bar{p}\cdot\bar{p}' = pp'\cos\theta$

Þ. má fá

$$\nu' = \frac{\nu}{1+\frac{h\nu}{m_e c^2}(1-\cos\theta)}$$

eða með $c = \lambda\nu = \lambda'\nu'$

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

$$\longrightarrow \Delta\lambda = \lambda_c(1-\cos\theta)$$

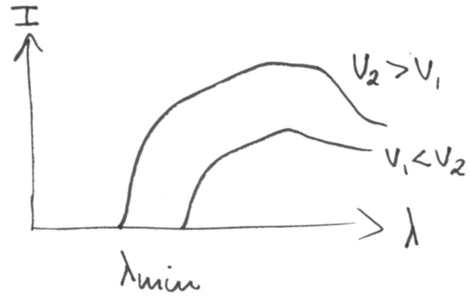
með $\lambda_c \equiv \frac{h}{m_e c} \simeq 2\cdot 10^{-2}$ Å

sem Compton-bylgjulengd rafeindar

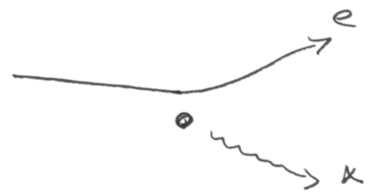
Kemur saman við mælingar

$$\longrightarrow \boxed{\begin{array}{l} E = h\nu \\ p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda} \end{array}}$$

Hemlunar geislun (Bremsstrahlung)

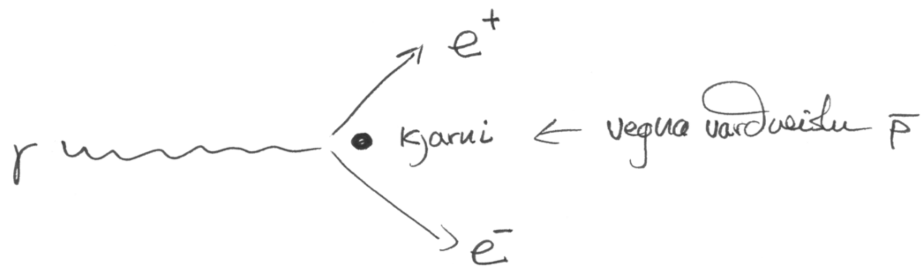


$$eV = \frac{hc}{\lambda_{min}}$$



λ_{min} : bylgjulengd geisla sem kemur frá rafeind sem hefur misst alla orku sína eV í eina ljóseind.

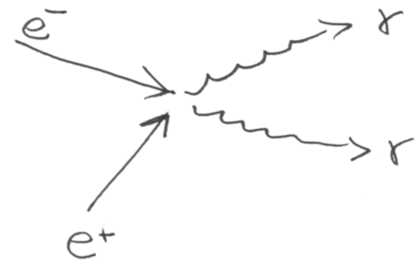
Sköpun og Eyðing rafeinda



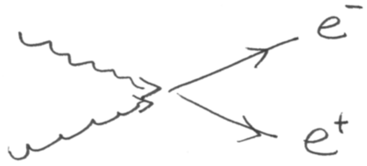
gerist ef $h\nu > 2m_e c^2$

getur ekki gerst án kjarnans

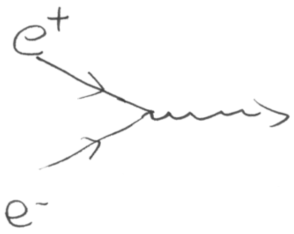
Í tómarúmi



minnst 2γ



sjaldgæft en mögulegt



ekki mögulegt í tómarúmi

Bæði eindir eða bylgjur
$\longleftrightarrow$
Mótsögn leyst með nýjum myndum í QM

Fourier greining

liðum $\psi(x) \in \mathbb{C}$ eftir $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ (planbylgjum). $\psi(x) \to 0$ ef $x \to \pm\infty$ nógu hratt.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \phi(k)\, dk$$

þá er $\phi = \mathcal{F}^{-1}[\psi]$ og

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \psi(x)\, dx$$

(nema ósamhverfa möguleikann $\frac{1}{2\pi}, 1$)

Á blöðunum er sýnt fram á

að ef $\psi = \mathcal{F}[\phi]$ þá sé $\phi = \mathcal{F}^{-1}[\psi]$

eftir venjum stærðfræðinnar

Notum aðra aðferð hér

Dirac δ-fallið

$$\boxed{\delta(x) \equiv \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx-\epsilon|k|}}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\left\{\frac{1}{2\pi}\int_{0}^{\infty} dk\, e^{ikx-\epsilon k} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{0} dk\, e^{ikx+\epsilon k}\right\}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{2\pi}\left\{\frac{-1}{ix-\epsilon} + \frac{1}{ix+\epsilon}\right\}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\,\frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2}$$

$$\longrightarrow \begin{cases} \delta(x) = 0 & \text{ef } x \neq 0 \\ \delta(x) = \infty & \text{ef } x = 0 \end{cases}$$

---

oft skrifað sem:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-ikx}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) f(x) \equiv \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2} f(x)$$

ef $f(x)$ hefur engar misfellur um $x=0$ þá gildir

ef $x \neq 0$ er hægt að setja $\epsilon = 0$
því skiptir aðeins gildi f um $x=0$
máli

$$\longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) f(x) \simeq f(0) \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2}$$

$$= f(0) \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\pi}\, \epsilon^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \frac{1}{\left(\frac{x}{\epsilon}\right)^2\epsilon^2+\epsilon^2}$$

$$= f(0)\, \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, \frac{1}{t^2+1}$$

$$= \frac{f(0)}{\pi}\, \arctan t \Big|_{-\infty}^{\infty} = f(0)$$

$$\boxed{\longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x-x_0)\, f(x) = f(x_0)}$$

Í raun er $\delta(x)$ ekki fall heldur deilifall (generalized function, distribution)

Athugum nú andhverfuna

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \phi(k)\, dk$$

$$\psi = \mathfrak{F}[\phi]$$

athugum

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \psi(x)\, dx$$

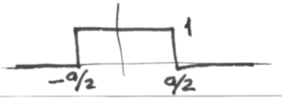
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, dq\, e^{-ikx+iqx} \phi(q)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq\, dx\, e^{ix(q-k)} \phi(q)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \delta(q-k)\, \phi(q) = \phi(k)$$

$$\longrightarrow \quad \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \psi(x)\, dx$$

Dæmi

$\psi(x)$		$\phi(k)$
e^{-x^2/a^2}	$\longleftrightarrow$	$\frac{a}{\sqrt{2}} e^{-\frac{k^2 a^2}{4}}$
$e^{-\lvert x\rvert/a}$	$\longleftrightarrow$	$\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{1/a}{k^2 + 1/a^2}$
1	$\longleftrightarrow$	$\delta(k)$
$\delta(x)$	$\longleftrightarrow$	1
	$\longleftrightarrow$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \frac{\sin(\frac{ka}{2})}{(\frac{ka}{2})}$

Reiknireglur

$$\left.\begin{array}{l}\mathcal{F}(\phi_1+\phi_2) = \mathcal{F}\phi_1 + \mathcal{F}\phi_2 \\ \mathcal{F}\lambda\phi = \lambda\mathcal{F}\phi\end{array}\right\}$$ samsvarar fyrir $\mathcal{F}^{-1}$

Hliðrun

$$\phi(k+k_0) \rightleftarrows e^{ik_0x}\psi(x)$$

$$\psi(x+x_0) \rightleftarrows e^{-ikx_0}\phi(k)$$

afleiður

$$\phi'(k) \longleftrightarrow -ix\psi(x)$$

$$\psi'(x) \longleftrightarrow ik\phi(k)$$

$$\psi(x) \in \mathbb{R} \longleftrightarrow \phi^*(k) = \phi(-k)$$

Parseval

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk\, |\phi(k)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2$$

Sönnun

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(k)|^2 dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx}\psi(x)dx\right\}\phi^*(k)dk$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x)\left\{\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}\phi(k)\right\}^*$$

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

Breiddar lögmál

$$\text{Mjótt fall} \overset{\mathcal{F}}{\longleftrightarrow} \text{breitt fall}$$

$\phi(k)$ og $\psi(x)$ normuð $\longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

Skilgreinum :

$$\langle x\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x)|^2 dx \quad \text{meðalgildi } x$$

$$\langle k\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} k\,|\phi(k)|^2 dk \quad \text{—||— } k$$

Þā er breiddin

$$(\Delta x)^2 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\,(x-\langle x\rangle)^2\,|\psi(x)|^2$$

$$= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

$$(\Delta k)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dk\,(k-\langle k\rangle)^2\,|\phi(k)|^2$$

Viljum sanna

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{Ef } \psi = \mathfrak{F}\phi \\ \longrightarrow (\Delta x)_\psi \cdot (\Delta k)_\phi \geq \frac{1}{2}\end{array}}$$

---

hliðrun á ψ $\rightarrow$ engin áhrif á $|\phi|^2$

gerum ráð fyrir að $\langle x\rangle = \langle k\rangle = 0$

$\rightarrow$ sanna þarf

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} k^2 |\phi(k)|^2 dk \geq \frac{1}{4}$$

Skilgr. fyrir $\lambda \in \mathbb{R}$

$$P(\lambda) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \left|\lambda x \psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx}\right|^2 dx$$

$$= \lambda^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx - \lambda + \int_{-\infty}^{\infty} k^2 |\phi(k)|^2 dk$$

og $P(\lambda) \geq 0$

$$P(\lambda) = \lambda^2 (\Delta x)^2 - \lambda + (\Delta k)^2 \geq 0$$

veljum $\lambda = \frac{1}{2}(\Delta x)^{-2}$

$$\longrightarrow \frac{1}{4}(\Delta x)^{-2} - \frac{1}{2}(\Delta x)^{-2} + (\Delta k)^2 \geq 0$$

$$\longrightarrow -\frac{1}{4}(\Delta x)^{-2} + (\Delta k)^2 \geq 0$$

$$\longrightarrow -\frac{1}{4} + (\Delta x)^2 (\Delta k)^2 \geq 0$$

$$\longrightarrow (\Delta x)^2 (\Delta k)^2 \geq \frac{1}{4}$$

3 Efnisbylgjur (de Broglies)

Ljós: Virðist koma fram sem annaðhvort bylgjur eða agnir

þessar tvær myndir tengjast með:

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

Efni: (de Broglie 1924)

Allt efni sýnir þetta tvíeðli

þar sem E og p eru tengd

ν og λ eins og fyrir ljós.

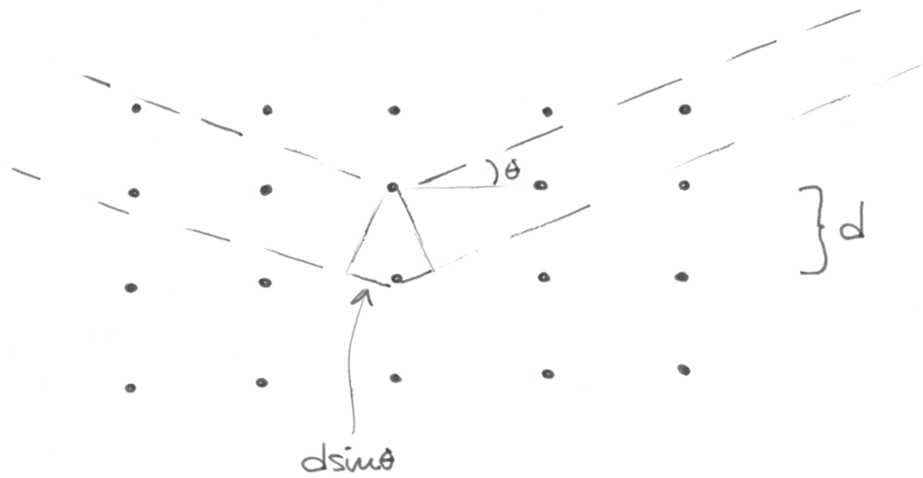
$$E = h\nu = \hbar\omega$$
$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

með

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad \omega = 2\pi\nu, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Bylgjueiginleikar efnis koma fram sem bylgjuvíxl

t.d. sem Braggs endurkast frá kristöllum:



Bylgjan frá neðra planinu fer lengri vegalengd $2d\sin\theta$

þar verða í fasa ef

$$\boxed{n\lambda = 2d\sin\theta \qquad n \in \mathbb{N}}$$

þ.e. ef munurinn er heil tala λ

Braggs skilyrði

Sannreynt af

Davison og Germer (1927)

Geisli rafeinda með mism. orku
fastur kristall, (fast d)

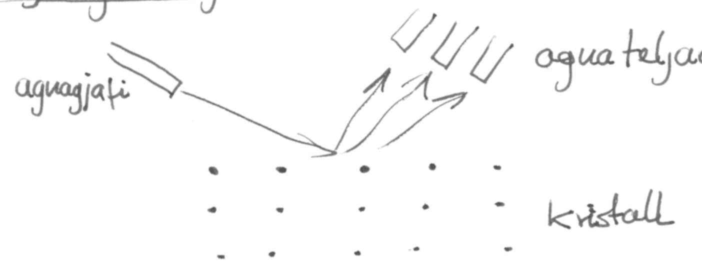
Thomson (1927)

rafeindageisli með fast λ
kristalladuft → mism. d

faðir ↔ ögn
Nóbel: 1906

sonur bylgja
Nóbel: 1937

Ef agnateljari er notaður



Þá fer saman

toppur í bylgjustyrkleika

↕

flestar agnir taldar

Staðreyndir

1) Smásæjar agnir sýna bylgjuvíxl og λ og p eru tengd

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

2) Efnisagnir koma ávallt í heilu lagi í teljara

Ef straumur agna er veikur
→ aðeins ein ögn í einu

→ þá myndast víxlmynstrið smám saman úr handahófskenndum merkjum einstakra heilla agna.

Drög að kenningu

(1)

Ástandi öguakerfis er lýst ~~með~~ að fullu falli $\psi(\bar{r}) \in \mathbb{C}$ (bylgjufall)

(2)

Hægt er að lýsa ástandi agnar með skriðþunga p með

$$\psi(\bar{r}) = \text{fasti} \cdot e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$$

þ.s. $\bar{k} = \bar{p}/\hbar$

(3)

Ef ψ_1 og ψ_2 lýsa mögulegum ástöndum agnar, þá er

$$\alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \qquad \alpha,\beta \in \mathbb{C}$$

einnig mögulegt ástand agnar

(4) Til að reikna endurkast og beygju slíkra bylgna eru notaðar svipaðar reglur og fyrir ljós og hljóð bylgjur.

(5)

Styrkur bylgjunnar í $\bar{r}$

$$I \equiv |\psi(\bar{r})|^2$$

segir til um líkindi þess að ögnin finnist við $\bar{r}$

líkindatúlkun

Líkindi þess að finna ögn sem lýst er með ψ í V er

$$P(V) \equiv \frac{\int_V d\bar{r}\, |\psi(\bar{r})|^2}{\int_{\mathbb{R}^3} d\bar{r}\, |\psi(\bar{r})|^2}$$

Fourier ummyndanir bylgjufalla

$$\phi(\bar{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\bar{r}\, e^{-i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, \psi(\bar{r})$$

$$\psi(\bar{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\bar{k}\, e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, \phi(\bar{k})$$

$|\psi(\bar{r})|^2$: líkindadreifing í staðarrúmi

$|\phi(\bar{k})|^2$: vegna $\bar{p} = \hbar\bar{k}$
líkindadreifing
í skriðþungarúminu

---

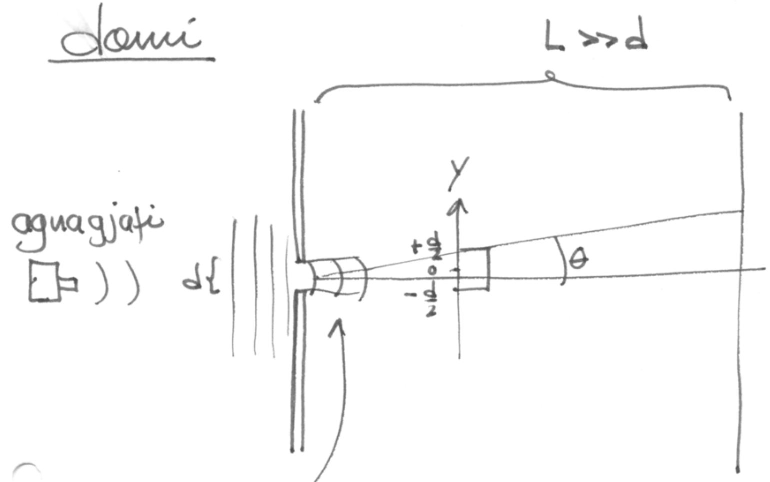
hvað gildir um breidd falla?

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

$$\longrightarrow \quad \boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

óvissulögmál sjá síðar

dæmi



agnir vel staðsettar í y-stefnu

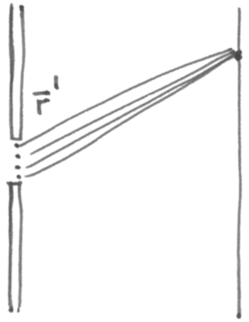
$$\longrightarrow \psi(x=0,y) = \frac{1}{\sqrt{d}} \chi_{[-\frac{d}{2},\frac{d}{2}]}(y) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d}} & \text{ef } -\frac{d}{2} \leq y \leq \frac{d}{2} \\ 0 & \text{annars} \end{cases}$$

Ef merki sést fyrir θ
þá er $p_y = p \sin\theta$

líkindadreifing fyrir þessi merki er

$$|\psi(x=L,y)|^2 \quad , \quad \frac{y}{L} = \tan\theta$$

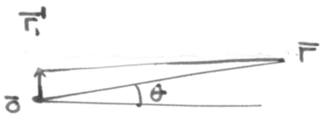
Reikna $|\psi(x=L,y)|^2$ samkvæmt venjulegri bylgjufræði.



Bylgja í $\vec r$ er samantekt af kúlubylgjum með upphafspunkt $\vec r' \in$ rifu

kúlubylgja (einstök)

$$\frac{e^{ik|\vec r-\vec r'|}}{|\vec r-\vec r'|} \quad \text{með } k=\frac{p}{\hbar} \quad \to \frac{e^{iL}}{L} e^{-ik\sin\theta\cdot r'}$$



ef $\theta \ll 1$

$$\to |\vec r-\vec r'| \simeq r - r'\sin\theta$$

Svo heildarbylgja í stefnu θ er

$$\sim \int_{-d/2}^{d/2} e^{-ik\sin\theta\cdot y}\,dy = \frac{\sin\left(\frac{k\sin\theta\cdot d}{2}\right)}{\left(\frac{k\sin\theta\cdot d}{2}\right)} \sim \phi(k\sin\theta)$$

þar sem $\phi(k_y)$ er Fourier ummyndun

$$\chi_{[-\frac{d}{2},\frac{d}{2}]}(y) = \psi(x=0,y)$$

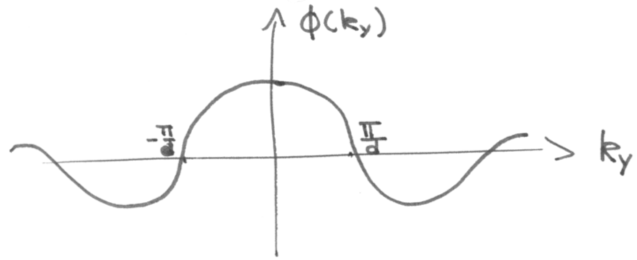
$\to$ líkindadreifing $p_y = \hbar k_y$ er

$$\sim |\phi(k_y)|^2 = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{\sin\frac{k_y d}{2}}{\frac{k_y d}{2}}\right)^2$$

breiddin er $\quad \Delta y = \frac{d}{2}$

$\Delta k_y = \infty$ ef reiknað samkv. stdgr.

en metum



$$\Delta k_y \sim \frac{2\pi}{d}$$

$$\rightarrow \Delta y \cdot \Delta k_y = \pi$$

eða

$$\Delta y \cdot \Delta p_y = \pi \hbar$$

Sem sé einfallt dæmi um

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Ath.

Í raun er krafist að ψ uppfylli $\int |\psi|^2 dx$ til þess að geta lýst ástandi

→ planbylgjur eru þægileg stærðfræðileg tól en ekki eðlisfræðileg ástönd

Óvissulögmál Heisenbergs

Ef

$$(\Delta x)^2 = \frac{\int (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(\bar{r})|^2 d\bar{r}}{\int |\psi(\bar{r})|^2 d\bar{r}}$$

$$(\Delta k_x)^2 = \frac{\int (k_x - \langle k_x \rangle)^2 |\phi(\bar{k})|^2 d\bar{k}}{\int |\phi(\bar{k})|^2 d\bar{k}}$$

þá gildir

$$\Delta x \cdot \Delta k_x \geq \frac{1}{2}$$

og vegna $\bar{p} = \hbar \bar{k}$

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Einnig er til

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

líftími ⟺ breidd forsluðinu

5. Mælistærðir og línulegir virkjar

Dæmi um mælistærðir

staður $\bar{x}$, skriðþungi $\bar{p}$, orka.....
hverfiþungi ...

Í sígildri eðlisfræði eru þessar stærðir föll af $\bar{r}, \bar{p}$, ótvírætt ákvörðuð

Í skammtafræði er ástand lýst með $\Psi(\bar{r})$ (bylgjufallið)

→ aðeins er hægt að segja til um líkindadreifingu mæligilda

t.d.

$$\mathcal{P}_{\bar{r}}(V) = \int_V d\bar{r}\, |\Psi(\bar{r})|^2$$

eru líkindin fyrir því að mæla $\bar{r} \in V$ ef ástand er lýst með φ (:normað)

Á sama hátt

$$\mathcal{P}_{\bar{p}}(W) = \int_W d\bar{k}\, |\phi(\bar{k})|^2$$

eru líkindi þess að mæla $\bar{p} \in W$

Hægt er að skilgreina, væntingargildi $\langle \bar{r} \rangle$, $\langle \bar{p} \rangle$ og óvissur Δr, Δp

Má alhæfa

Ef f er fall af $\bar{r}$

$$\longrightarrow \langle f(\bar{r}) \rangle_\Psi = \int f(\bar{r})\, |\Psi|^2 d\bar{r}$$

með ávissu

$$\Delta f(\bar{r}) = \left\{ \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \right\}$$

og á sama hátt fyrir $g(\bar{p})$

$$\langle g(\bar{p}) \rangle_\phi = \int g(\hbar \bar{k}) |\phi(\bar{k})|^2 d\bar{k}$$

Ein vídd

munum
$$\boxed{\begin{array}{c} d_x \psi \longleftrightarrow ik\phi(k) \\ \mathcal{F} \\ \frac{1}{i} d_x \psi \longleftrightarrow k\phi(k) \end{array}}$$

líka
$$\boxed{\int \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx = \int \phi_1^*(k)\phi_2(k)dk}$$

með
$$\phi_i \overset{\mathcal{F}}{\Longleftrightarrow} \psi_i$$

Ef nú

$$\psi_1 \to \psi \qquad \phi_1 \to \phi$$
$$\psi_2 \to \frac{\hbar}{i} d_x \psi \; : \; \phi_2 \to \hbar k \phi = p\phi$$

þá fæst:

$$\langle p \rangle = \int dk\, (\hbar k) |\phi(k)|^2$$

$$= \int dx\, \psi^*(x) \left\{ \frac{\hbar}{i} d_x \psi(x) \right\}$$

$$\longrightarrow \mathbb{P} = \begin{cases} \hbar k & \text{í } k\text{-rúmi} \\ \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} & \text{í } x\text{-rúmi} \end{cases}$$

skriðþungavirki

Þægilegar rithættur

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle \equiv \int dx \; \psi_1^*(x)\, \psi_2(x)$$

$$\longrightarrow \quad \langle \psi, \psi \rangle \equiv \|\psi\|^2 \; (=1)$$

$$\langle g(p) \rangle_\psi = \langle \psi, g(\mathbb{P})\psi \rangle$$

skilgreinum staðarvirkja

$$\mathbb{X}\,\psi(x) = x\,\psi(x) \qquad \text{í } x\text{-rúmi}$$

$$\longrightarrow \quad \langle f(x) \rangle = \langle \psi, f(\mathbb{X})\psi \rangle$$

$f(\mathbb{X})$ og $g(\mathbb{P})$ eru línulegir virkjar

$$g(\mathbb{P})\,\lambda\psi = \lambda\, g(\mathbb{P})\psi$$

$$g(\mathbb{P})(\psi_1 + \psi_2) = g(\mathbb{P})\psi_1 + g(\mathbb{P})\psi_2$$

Línulegir virkjar

samlagning

$$(\mathbb{A} + \mathbb{B})\psi \equiv \mathbb{A}\psi + \mathbb{B}\psi$$

margföldun

$$(\mathbb{A}\cdot\mathbb{B})\psi \equiv \mathbb{A}\{\mathbb{B}\psi\}$$

athugið:

$$\mathbb{A}\cdot\mathbb{B} \neq \mathbb{B}\cdot\mathbb{A}$$

dæmi

$$(\mathbb{X}\cdot\mathbb{P})\psi(x) = -i\hbar\, x\, d_x \psi(x)$$

en

$$(\mathbb{P}\cdot\mathbb{X})\psi(x) = -i\hbar\, d_x\{x\psi(x)\}$$

$$= -i\hbar\{\psi(x) + x\, d_x\psi(x)\}$$

$$\longrightarrow \boxed{\mathbb{X}\mathbb{P}\psi - \mathbb{P}\mathbb{X}\psi = i\hbar\psi}$$

sem ritað er:

$$[\mathbb{X},\mathbb{P}] = i\hbar\mathbb{I} = i\hbar$$

þ.s. $\mathbb{I}$ er hlutlaus virkinn (einingarv.)

og

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

víxlvensl víxill

almennt gildir

$$[\alpha\mathbb{A},\mathbb{B}] = [\mathbb{A},\alpha\mathbb{B}] = \alpha[\mathbb{A},\mathbb{B}]$$

$$[\mathbb{A}+\mathbb{B},\mathbb{C}] = [\mathbb{A},\mathbb{C}] + [\mathbb{B},\mathbb{C}]$$

$$[\mathbb{A}\mathbb{B},\mathbb{C}] = \mathbb{A}[\mathbb{B},\mathbb{C}] + [\mathbb{A},\mathbb{C}]\mathbb{B}$$

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

$$[\mathbb{A},\mathbb{I}] = 0$$

Innfeldi á rúmi bylgjufalla

$$\langle\psi,\varphi\rangle = \langle\varphi,\psi\rangle^*$$

$$\langle\psi+\varphi,\xi\rangle = \langle\psi,\xi\rangle + \langle\varphi,\xi\rangle$$

$$\langle\psi,\alpha\varphi\rangle = \alpha\langle\psi,\varphi\rangle$$

$$\langle\alpha\psi,\varphi\rangle = \alpha^*\langle\psi,\varphi\rangle$$

Cauchy-Schwarz

$$|\langle\psi,\varphi\rangle|^2 \leq \langle\psi,\psi\rangle\langle\varphi,\varphi\rangle$$

Hermite Virkjar

Í skammtafræði er sérhver mælistærð sam svarandi virkja

væntingargildi $\langle\mathbb{A}\rangle_\psi = \langle\psi,\mathbb{A}\psi\rangle$

miðalgild : raun tala

$\longrightarrow$ krøvjunst $\langle \psi, A\psi \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle^*$

$\longrightarrow$ $\langle \psi, A\psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle$

- Javngildir ~~at~~ krafist sé

$$\langle \psi, A\varphi \rangle = \langle A\psi, \varphi \rangle$$

slíkir virkjar eru Hermite virkjar

- <u>dømi um Hermite virkja</u>

tøkum $P = -i\hbar d_x$

$$\langle \psi, P\psi \rangle = \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x)\right) dx$$

$$= -i\hbar \int dx\, \psi^*(x)\, \partial_x \varphi(x)$$

$$= -i\hbar \left\{ \psi^*(x)\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int dx\, (\partial_x \psi^*(x))\, \varphi(x) \right\}$$

$$= i\hbar \int dx\, (\partial_x \psi^*(x))\, \varphi(x)$$

$$= \int dx \left\{ -i\hbar \partial_x \psi(x) \right\}^* \varphi(x) = \langle P\psi(x), \varphi(x) \rangle$$

$\boxed{\longrightarrow \partial_x \text{ er ikki Hermite virki}}$

- Hreyfiorku virki $K = \frac{P^2}{2m}$

Mattisorku virki $V = V(x)$

ef A er Hermitvirki $\longrightarrow$ αA er líka
ef $\alpha \in \mathbb{R}$ og ef B er líka

$\longrightarrow$ $A + B$ er Hermitvirki

$\longrightarrow$ $\boxed{H = K + V \text{ er Hermit virki}}$

AB er Hermitvirki ef A og B eru það og ef $[A, B] = 0$

(t.d. er xp ekki Hermite v.)

$AB + BA$ er Hermitev ef A og B eru

Óvissa

Óvissa mælistærðar í ástandinu ψ er

$$(\Delta A)^2_\psi \equiv \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

$$\rightarrow (\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

$$= \langle \psi, (A - \langle A \rangle \mathbb{I})^2 \psi \rangle$$

$$\rightarrow \Delta A = 0$$

$$\text{ef} \quad A\psi = \langle A \rangle \psi$$

þá er bylgjufallið ψ eiginfall A með eigingildi $\langle A \rangle$

ψ er eiginfall A með eigingildi a ef

(1) $\psi \neq 0$

(2) $A\psi = a\psi$

Hermitevirkjar hafa aðeins rauntölu eigingildi!

Ef tvær mælistærðir svara til víxlinna Hermite virkja A og B þá má finna fjölda bylgjufalla þ.a.

$$(\Delta A)_\psi = 0 \quad \text{og} \quad (\Delta B)_\psi = 0$$

Við erum í raun samleiginlegir eigin v.

Ef A og B víxlast ekki

$$\rightarrow (\Delta A)_\psi \cdot (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle i[A, B] \rangle_\psi|$$

sértilfelli

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

$$\Delta x_j \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{jk}$$

Viðbætur

Ef A er Hermítavirki
með a_n eigingildi og
ψ_n : eiginvektora

þá má skrifa ástönd kerfisins
sem $\Psi = \sum_n^\infty c_n \psi_n$, $c_n \in \mathbb{C}$

mælingar á A fyrir Ψ
geta sérhvert a_n

og mælingin neyðir kerfið
í ástand ψ_n .
$\rightarrow$ endurteknar mælingar
geta a_n

líkindi þess að mæla a_n
eru $|c_n|^2$

Síendurteknar mælingar
á A fyrir Ψ geta $\begin{array}{ccc} a_1, & a_2, & \dots \\ \updownarrow & \updownarrow & \\ |c_1|^2 & |c_2|^2 & \dots \end{array}$

$$\rightarrow \langle A \rangle = \langle \Psi, A\Psi \rangle$$
$$= \sum_n^\infty |c_n|^2 a_n$$

Athugasemd um fasastuðul

Ef Ψ er bylgjufall

og $e^{i\alpha} \in \mathbb{C}$, $|e^{i\alpha}| = 1$

þá gildir

$$\int |\Psi(x)|^2 dx = \int |e^{i\alpha}\Psi(x)|^2 dx$$

og

$$\int (e^{i\alpha}\Psi)^* \mathbb{A} (e^{i\alpha}\Psi) dx = \int \Psi^* \mathbb{A} \Psi \, dx$$

$$\longrightarrow \langle A \rangle_\Psi = \langle A \rangle_{e^{i\alpha}\Psi}$$

$$\rightarrow \boxed{e^{i\alpha}\Psi \text{ er jafngilt } \Psi}$$

Allt framansagt má alhæfa fyrir 3-víddir

$$P_j \iff -i\hbar\partial_{x_j} \equiv \mathbb{P}_j \qquad j = 1, 2, 3$$

$$x_j \iff \mathbb{X}_j$$

$$\vec{\mathbb{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

$$V(\vec{r}) \iff \mathbb{V} = V(\mathbb{X}_1, \mathbb{X}_2, \mathbb{X}_3)$$

6 Schrödingerjafnan

Hvernig þróast ástönd?

þurfum hreyfingarjöfnu

- Frjálsar agnir (engar víxlverkanir)

De Broglie: ögn með E og p er lýst
s planbylgju

$$\psi(x,t) \sim e^{i(kx-\omega t)}$$

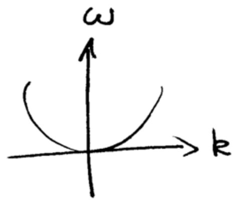
- þar sem:

$$p = \hbar k \quad , \quad E = \hbar \omega$$

notum

$$\underbrace{E = \frac{p^2}{2m}}$$

$$\downarrow$$



$$\omega = \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$: tvístrunarsamband
tvístursvensl

$\psi(x,t)$ uppfyllir

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi$$

fyrir planbylgjur eru diffurjafnan og tvísturvenslin jafngild

- Almennt ψ má skrifa sem:

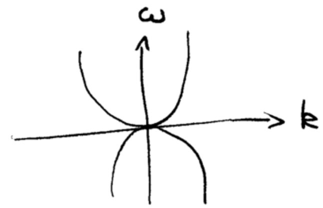
$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{i(kx-\omega(k)t)} \phi(k)$$

- diffurjafnan er línuleg og gildir því líka fyrir almennt $\psi(x,t)$

Ath

sin$(kx-\omega t)$ uppfyllir ekki jöfnuna heldur

$$\partial_t^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{4m^2} \partial_x^4 \psi$$



$$\longrightarrow \omega^2 = \left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)^2$$

Lausnir

Almennt fyrir línulegar hlutafleiðujöfnur með föstum stuðlum

Vitum $\Psi(x,0)$

viljum finna $\Psi(x,t)$, $t>0$

þá er

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

þarsem

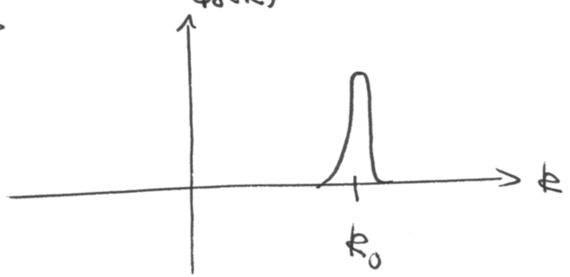
$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} \Psi(x,0)$$

$\omega(k)$: ákvarðast af jöfnunni

Hraðahugtök fyrir bylgjur og agnir

Athugum „næstum flata bylgju" í x-rúmi

$\longrightarrow$



$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{i(kx-\omega(k)t)} \phi_0(k)$$

$\omega(k)$ er hér næstum fasti , nota Taylor

$$\longrightarrow \omega(k) = \omega(k_0) + \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_0} (k-k_0) + O((k-k_0)^2)$$

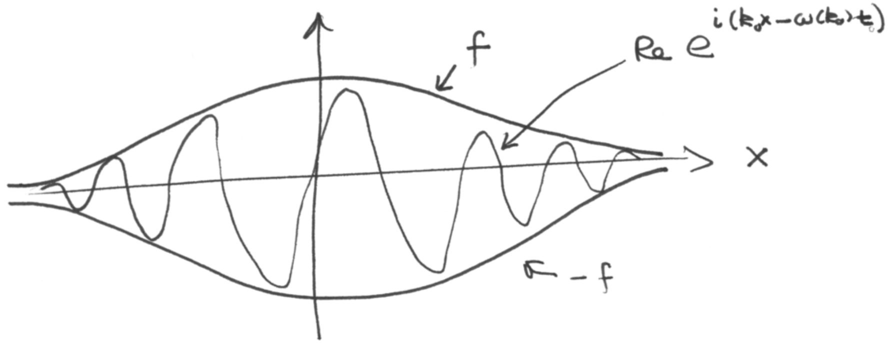
því fæst

$$\Psi(x,t) \simeq e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dq\, e^{i(qx - \left.\frac{d\omega}{dq}\right|_{q=k_0} t)} \phi_0(q+k_0)$$

$$\psi(x,t) \simeq e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \, f\left(x - \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0} t\right)$$

$\phi(k+k_0)$: „mjótt" fall $\longrightarrow$ f : „breitt" fall

f mótar planbylgjuna



mótunin hreyfist með:

$$V_g = \frac{d\omega}{dk}(k_0)$$

<u>V_g : grúpuhraði</u>

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

$$\longrightarrow \quad d_k\omega(k) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$$

$$\longrightarrow \quad V_g = \frac{p_0}{m}$$

sem er hraði agnar með skriðþunga samkvæmt sígildri aflfræði

<u>Fasahraði</u>

bylgjan sjálf ferðast með

$$V_f = \frac{\omega(k_0)}{k_0} = \frac{\hbar k_0}{2m} = \frac{1}{2} V_g$$

V_f : fasahraði

(7)

3-vídd

$$\Psi(\bar{r},t) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3}\int e^{i(\bar{k}\cdot\bar{r}-\omega(\bar{k})t)}\,\phi_0(\bar{k})\,d\bar{k}$$

með

$$\omega(\bar{k}) = \frac{\hbar|\bar{k}|^2}{2m}$$

uppfylla

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi$$

Þurfum bylgjujöfnu fyrir agnir í ytra kraftsviði !

$$P_i = -i\hbar\partial_i$$

$$\rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{P_1^2+P_2^2+P_3^2}{2m} = \mathbb{K}$$

hreyfiorkuvirkinn

(8)

Því fæst

$$i\hbar\partial_t\Psi = \mathbb{K}\Psi$$

Ytra kraftsvið $\rightarrow$ heildarorka

$$E = K+V$$

Heildarorku virki $\leftrightarrow$ Hamiltonvirki

$$\mathbb{H} = \mathbb{K}+\mathbb{V}$$

Því mætti ætla

$$\boxed{i\hbar\partial_t\Psi = \mathbb{H}\Psi}$$

tímaháða Schrödingerjöfnuna

eða á forminu

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

Afleiðing af Schrödingerjöfnunni

$$d_t \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{r}\, |\psi(\bar{r},t)|^2 = 0$$

ef $\psi(\bar{r},0)$ er normað : $\int d\bar{r}\, |\psi(r,0)|^2 = 1$

þá verður engin tímabreyting á norminni

$$\longrightarrow \int d\bar{r}\, |\psi(\bar{r},t)|^2 = 1$$

(skilyrði fyrir líkindatúlkun)

Hvernig lausnir á Schrödingerjöfnunni eru eðlisfræðilega áhugaverðar?

líkindatúlkun

$$\longrightarrow \int |\psi|^2 d\bar{r} < \infty$$

virðist eðlileg krafa

Krefjumst normanleika fyrir öll eðlisfræðileg ástönd

þægilegt einnig að nota ónormanleg bylgjuföll : planbylgjur t.d.

$$\int |\psi|^2 dx \leq \infty \quad \text{, en} \quad \sup_x |\psi(x,t)| < \infty$$

V er ekki alltaf samfellt

$$\longrightarrow \text{ekki} \qquad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

- ψ og $\partial_x \psi$: samfelld
- $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi$: skilgreint allstaðar nema í endanlega mörgum punktum

tímaháðar lausnir

Gefið $\psi(x,t_0)$

ef $V=0$ -> lausn með Fourierqr.

ef $V \neq 0$, -> Fourier, Greens f, ...

Sístæðar lausnir

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V\psi$$

V óháð t

leitum að sístæðum lausnum

$$\psi(x,t) = e^{i\alpha(t)}\psi_0(x)$$

$|\psi|^2$ breytist ekki hér

og föll með fasamismun

eru jafngild.

Sett inn

$$i\hbar\partial_t\psi = i\hbar\alpha'(t)e^{i\alpha(t)}\psi_0(x)$$

$$= e^{i\alpha(t)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right\}\psi_0(x)$$

$$\rightarrow \quad -\hbar\alpha'(t) = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_0 + V\psi_0}{\psi_0}$$

-> báðar hliðar verða að vera fasti

$$\alpha'(t) = -\frac{E}{\hbar}$$

$$\rightarrow \quad \alpha(t) = -\frac{E}{\hbar}t + \alpha_0$$

og

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_0 + V\psi_0 = E\psi_0$$

og $\quad \psi(x,t) = e^{-i\omega t}\psi_0(x), \quad \omega = \frac{E}{\hbar}$

tímaóháða Schrödinger jafnan

má skrifa sem

$$\mathbb{H}\Psi = E\Psi \qquad (*)$$

Vegna „jaðarskilyrða" fyrir Ψ eru oft aðeins til sundurlaus E_n sem leiða til lausnar fyrir $(*)$

$$\mathbb{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

E_n, Ψ_n : eigingildi og eiginvektorar $\mathbb{H}$

$$\langle H\rangle_\Psi = E$$

$$(\Delta H)_\Psi = 0$$

$\longrightarrow$ E er orka agnarinnar sem lýst er með sístæða bylgjufallinu Ψ

Bundin ástönd og orkuskömmtun

Ein vídd

Bundið ástand $\equiv$ Eiginfall $\mathbb{H}$ með $\int |\Psi|^2 dx < \infty$

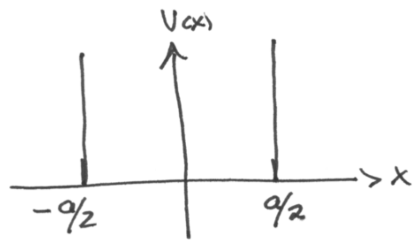
Viljum sýna að þá geti E aðeins tekið eitt af teljanlega mörgum sundurlægum gildum

$$E_0, E_1, E_2, \ldots$$

Einfalt dæmi

Leysum jöfnuna fyrir:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ef } \frac{a}{2} \geq |x| \\ \infty & \text{ef } |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$



Óendanlega djúpur mættisbrunnur
kassamætti

Ögnin er ávallt lokuð í brunninum

$\longrightarrow$ gilda þarf $\psi(x) = 0$ ef $|x| \geq \frac{a}{2}$

þurfum því að leysa

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi \quad , \quad x \in \left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right]$$

með jaðarskilyrðum

$$\psi\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi\left(\frac{a}{2}\right) = 0$$

Almenna lausnin á

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

er

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

með $\quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar}$

Jaðarskilyrði

$$-A\sin\frac{ka}{2} + B\cos\frac{ka}{2} = 0$$

$$A\sin\frac{ka}{2} + B\cos\frac{ka}{2} = 0$$

$$\longrightarrow \begin{pmatrix} -\sin\frac{ka}{2} & \cos\frac{ka}{2} \\ \sin\frac{ka}{2} & \cos\frac{ka}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

skilyrði fyrir lausnum er

$$\det(\ ) = 0$$

$$\longrightarrow \sin\frac{ka}{2}\cdot\cos\frac{ka}{2} = \frac{1}{2}\sin ka = 0$$

$$\longrightarrow ka = n\pi \quad , \quad n \in \mathbb{Z}$$

eða $\quad k^2 = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \quad , \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

$n = 0$ ekki mögulegt því þá er $\psi = 0$

$\longrightarrow$ engin ögn

$$\rightarrow k^2 = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \quad , \; n = 1, 2, 3, \ldots$$

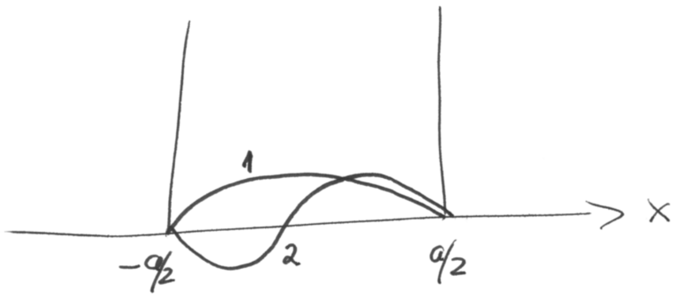
$$\rightarrow E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2$$

þ.e. orkan er skömmtuð

$$\psi_1(x) = B\cos\frac{\pi}{a}x$$

$$\psi_2(x) = A\sin\frac{2\pi}{a}x$$

$$\vdots$$



$\psi_1, \psi_2, \ldots$ eru sístæð því

$$\psi_1(x,t) = \psi_1(x)\, e^{-iE_1 t/\hbar} \rightarrow |\psi_1|^2 \text{ tímaóháð}$$

$$\psi_2(x,t) = \psi_2(x)\, e^{-iE_2 t/\hbar} \qquad -\,||\,-$$

Eiginföllinn (eiginástöndin) eru sístæð

Hvað með $\psi(x,0) = \alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x)$

$$\psi(x,t) = \alpha\psi_1(x)\, e^{-i\omega_1 t} + \beta\,\psi_2(x)\, e^{-i\omega_2 t}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = |\alpha\psi_1(x)|^2 + |\beta\psi_2(x)|^2$$
$$+ \alpha\beta^*\psi_1\psi_2\, e^{-i(\omega_1-\omega_2)t}$$
$$+ \alpha^*\beta\,\psi_1\psi_2\, e^{i(\omega_1-\omega_2)t}$$

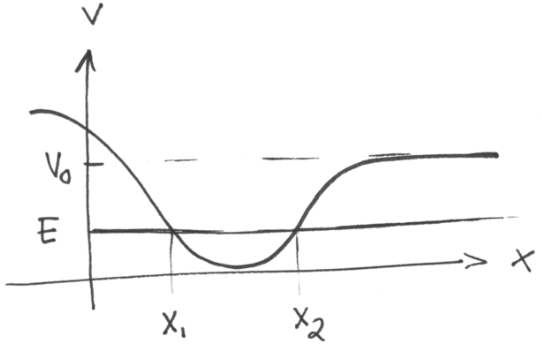
ef $\alpha, \beta \in R$

$$= |\alpha\psi_1(x)|^2 + |\beta\psi_2(x)|^2 + 2\alpha\beta\psi_1\psi_2\cos\{(\omega_1-\omega_2)t\}$$

háð tíma.

Almennar aðstæður fyrir orkustöðunum

Ath. mætti



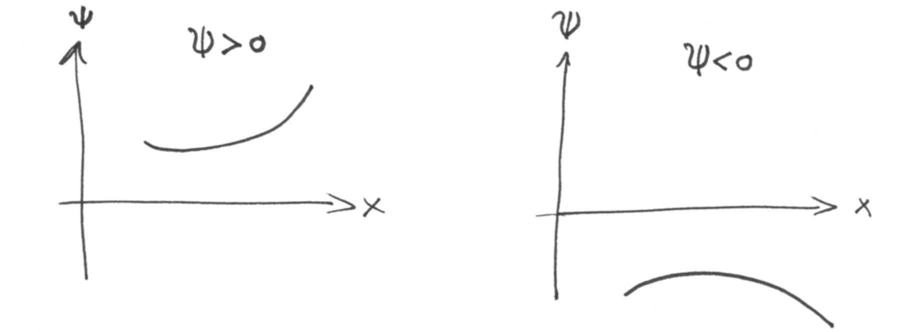
Schrödinger jafnan

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

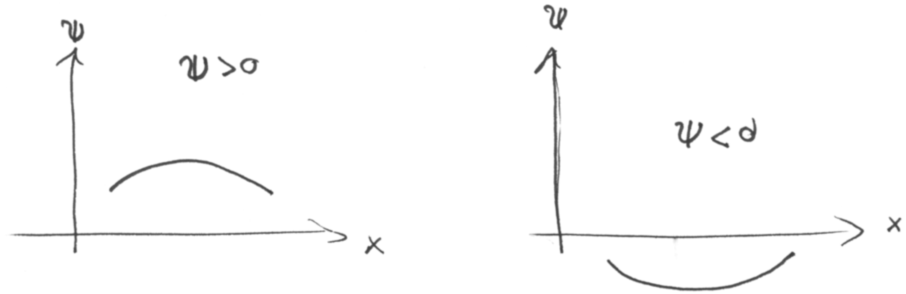
fyrir hvert E eru til tvær línulega óháðar lausnir

útlit ψ fer eftir formerki $\{V(x)-E\}$ og ψ!

$V(x) - E > 0$



$V(x) - E < 0$



Beygjuskil þar sem $V(x) - E = 0$ eða $\psi = 0$

Gerum ráð fyrir $V(x) \to \infty$ ef $x \to -\infty$.

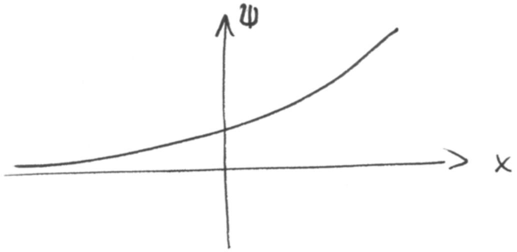
Nothæf lausn $\to 0$ þegar $-x \to$

$\to$ einungis ein lausn eftir

Ef $E < V_{min}$

$(\psi > 0)$

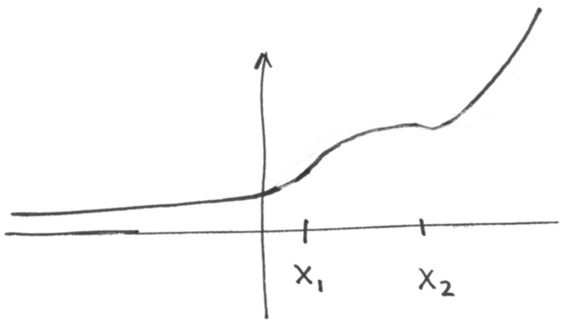
$\longrightarrow \psi'' > 0 \quad \forall x$



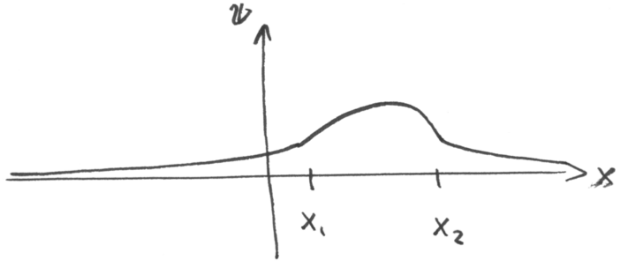
ónothæft í $x \to \infty$

Ef E er örlítið stærra en V_{min}

$\longrightarrow \psi'' < 0 \quad x \in (x_1, x_2)$

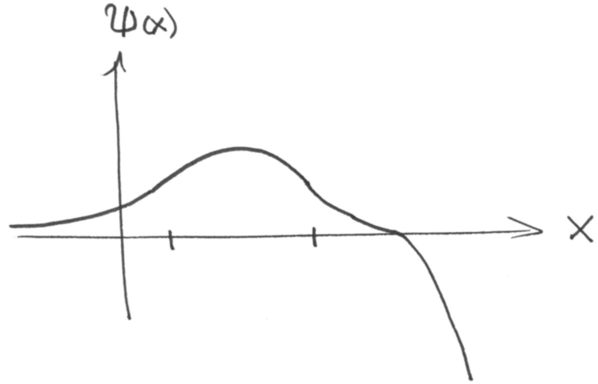


Ef E stækkar $\longrightarrow$ fallið nær að snerta 0 í $x \to \infty$

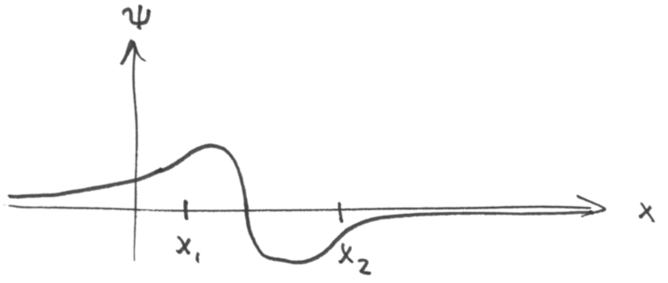


Þetta gildi á $E = E_1$ er eigingildi H

Ef E vex upp fyrir E_1 þá myndast núllstöð þar sem ψ'' skiptir um formerki



Ef E vex enn þá kemur að



Lausnin svarar til nýs eigingildis $E = E_2$

Niðurstaða

Lausnir með

$$\int dx\, |\psi|^2 < \infty$$

eru eingöngu til fyrir strjál gildi $E = E_1, E_2, \ldots\ E_n < V_0 \quad n = 1, 2, \ldots$

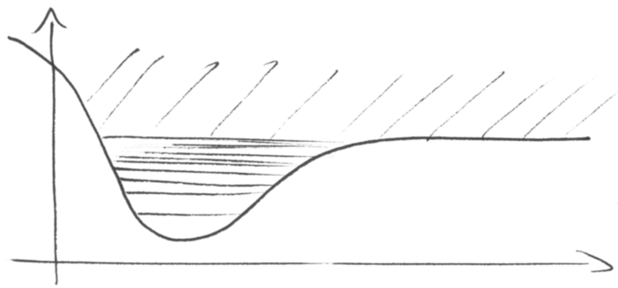
Hugsanlega endanlega mörg!

Lausn sem svarar til E_n hefur $n-1$ núllstöð

(því oft vani að telja frá $n = 0, 1, \ldots$)

Ef $E > V_0$ eru til takmarkaðar (...) lausnir þ.a.

$$\psi \xrightarrow[x \to \infty]{} \ldots \sin kx$$



róf ≡ möguleg gildi á E, þ.a. $H\psi = E\psi$ hafi takmarkaðar lausnir

Samanburður við sígilda eðlisfr.

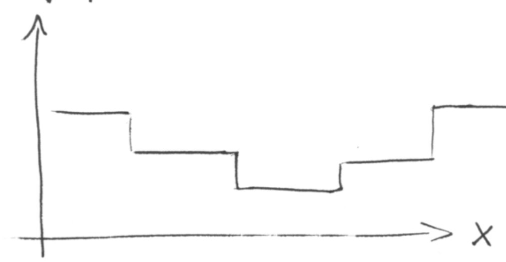
$E - V(x) \equiv K(x)$ er sígilda hreyfiorkan

Í skammtafræði er $|\psi|^2 \neq 0$ fyrir $x \notin [x_1, x_2]$ þó svo að í sígildri eðlisfræði gildi þá $K(x) \leq 0$

7.2 Einvíður mættisbrunnur

Ef $V(x) = $ fasti á köflum er hægt að leysa Schrödinger jöfnuna beint (explicit)

t.d.



Lítum á bil með $V(x) = V_1 = $ fasti

Jafnan er á bilinu

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}\{V_1 - E\}\psi = \alpha^2 \psi$$

þar sem $\alpha^2 = $ fasti

Lausnir eru $e^{\pm \alpha x}$ (ef $\alpha \neq 0$)

en $ax+b$ ef $\alpha = 0$

athugum þrjú tilfelli

i) $E > V_1$

$$k \equiv \frac{\sqrt{2m(E-V_1)}}{\hbar} \in \mathbb{R}$$

með lausn

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

eða $\psi(x) = A'\cos kx + B'\sin kx$

ii) $E < V_1$

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{2m(V_1-E)}}{\hbar} \in \mathbb{R}$$

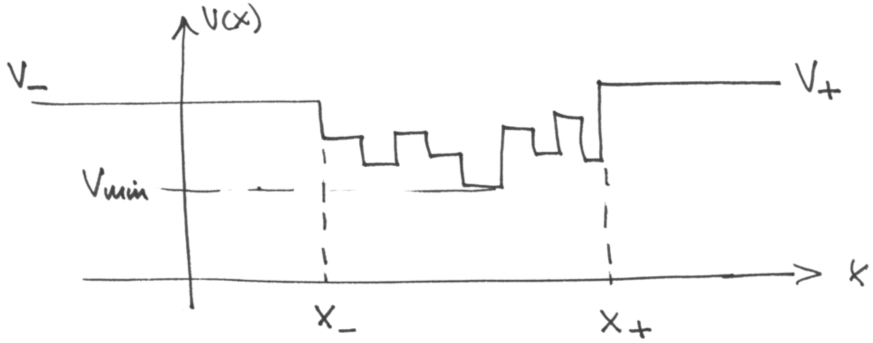
með lausn

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

iii) $E = V_1$

$$\psi(x) = ax + b$$

Gerum ráð fyrir V :



möguleg gildi á E fyrir bundin ástönd eru þá

$$V_{min} < E < \min\{V_+, V_-\}$$

Ef $x > x_+$ höfum við tilfelli ii) en aðeins

$$\psi(x) = D e^{-\kappa_+ x} \qquad \kappa_+ =$$

kemur til greina $\left(\psi \underset{x \to \infty}{\longrightarrow} 0\right)$

$x < x_-$ aðeins $\psi(x) = C e^{-\kappa_- x}$ kemur til greina.

Síðan þarf að kretjast

$$\psi(x_-^-) = \psi(x_-^+)$$
$$\psi(x_+^-) = \psi(x_+^+)$$
$$\vdots$$

$$\psi'(x_-^-) = \psi'(x_-^+)$$
$$\psi'(x_+^-) = \psi'(x_+^+)$$
$$\vdots$$

og ákvarða þannig stuðlana

A, B, C, D, ...

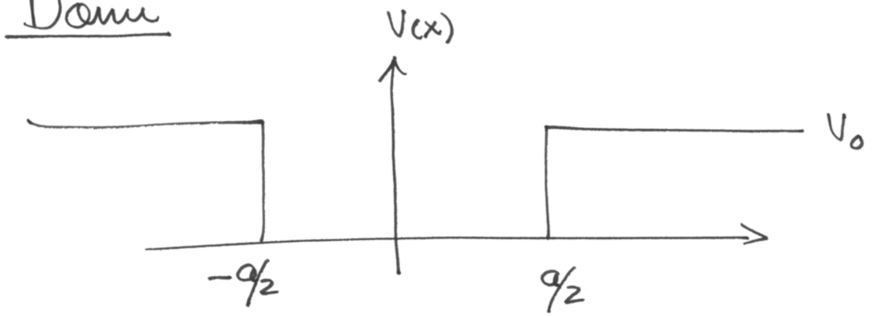
og eigingildin $E_0, \dots E_n$

Í raun nægir að kretjast þess að

$\frac{\psi'}{\psi}$ (logarithmísku afleiðan) sé samfellt

til þess að finna ... E_n ....

Dæmi



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ef } |x| > \frac{a}{2} \\ 0 & \text{ef } |x| < \frac{a}{2} \end{cases}$$

---

ekki bara kennslubókardæmi

Gróf nálgun á mætti kjarna eða atóms

til í hálfleiðurum

mættið sem rafeindir sjá

$V(x) = V(-x)$ Samhverft (speglun)

Schrödinger jafnan sýnir því að ef $\psi(x)$ er lausn þá er $\psi(-x)$ það líka

Þar með eru

$$\psi_e(x) = \psi(x) + \psi(-x) \; : \text{ jafnstæð}$$

og

$$\psi_o(x) = \psi(x) - \psi(-x) \; : \text{ oddstæð}$$

líka eiginlausnir jöfnunnar

→ notum spegilsamhverfuna til þess að leita aðeins að jafnstæðum og oddstæðum lausnum

Vitum $0 < E < V_0$

Jafnstæðar lausnir

$x < -\frac{a}{2}$ $\psi(x) = e^{\kappa x}$

$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

$x > \frac{a}{2}$ $\psi(x) = e^{-\kappa x}$

$-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ $\psi(x) = A\cos kx$

$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Skilyrði $\frac{\psi'}{\psi}$ samfellt í $x = \pm a$

nægir að athuga $x = -\frac{a}{2}$, því $\psi(x) = \psi(-x)$

$$\frac{\kappa e^{\kappa x}}{e^{\kappa x}} = -\frac{Ak\sin kx}{A\cos kx}, \quad x = \pm\frac{a}{2}$$

$$\longrightarrow \kappa = k\tan\left(\frac{ka}{2}\right)$$

sem ákvarðar E-gildin

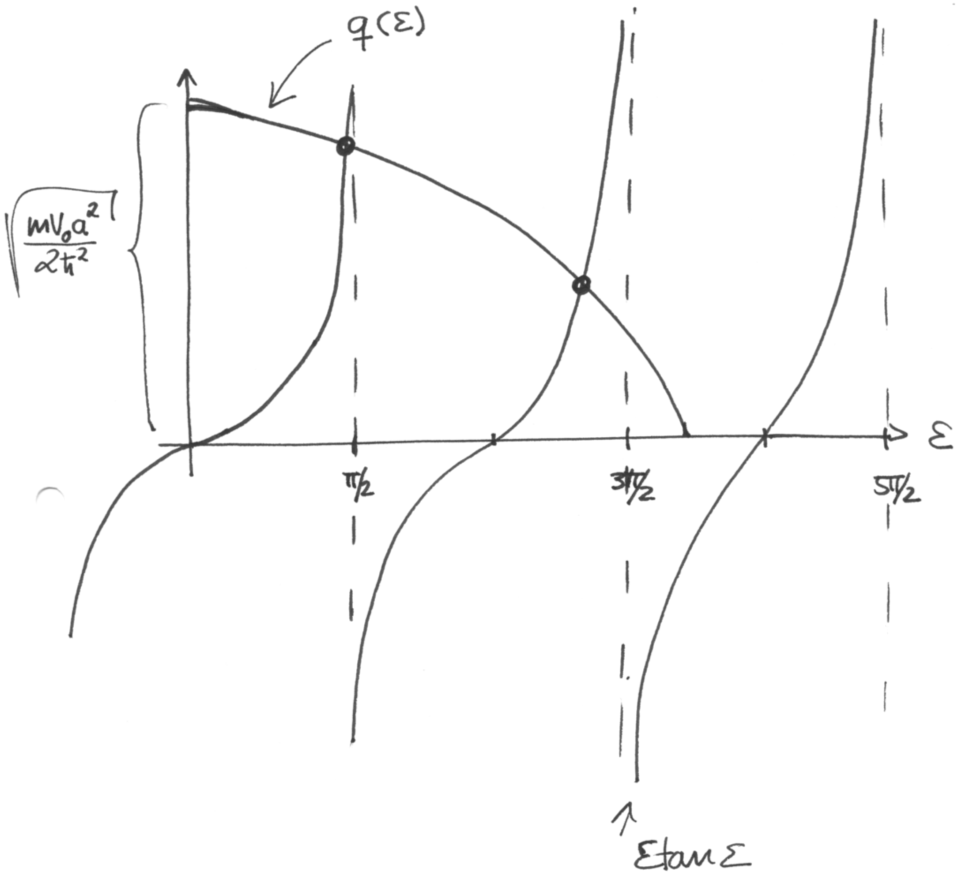
$$\varepsilon \equiv \frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}$$

þá er

$$\frac{\kappa a}{2} = \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2} \equiv q(\varepsilon)$$

Jafnan verður

$$q(\varepsilon) = \varepsilon \tan \varepsilon$$



Ef $\quad (n-1)\pi \leq \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}} < n\pi$

þá eru til nákvæmlega n jafnstæðar lausnir á Schrödinger jöfnunni

Oddstæðar lausnir

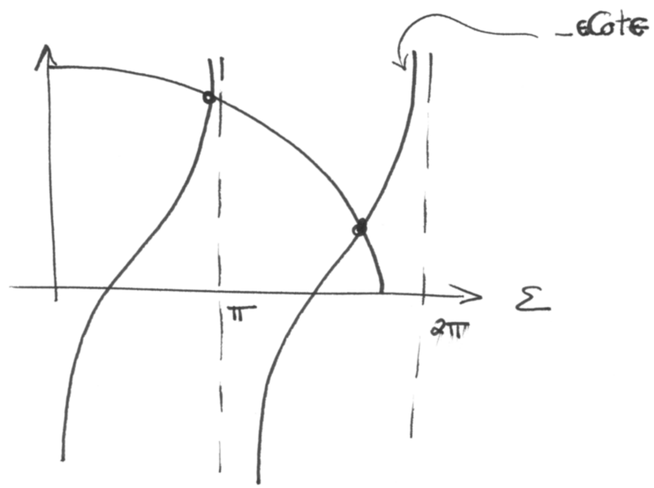
$$x < -\frac{a}{2}, \quad \psi(x) = e^{\kappa x}$$

$$x > \frac{a}{2}, \quad \psi(x) = -e^{-\kappa x}$$

$$-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}, \quad \psi(x) = B\sin kx$$

Skilyrðið að ψ'/ψ sé samfellt gefur

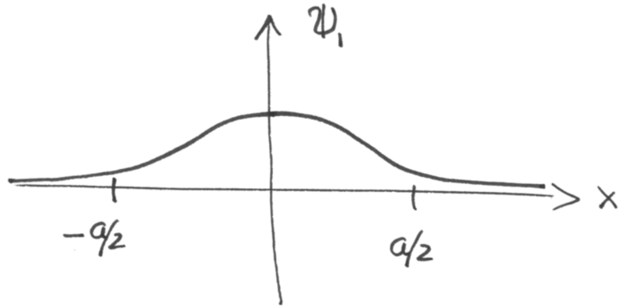
$$q(\varepsilon) = -\varepsilon \cot \varepsilon$$

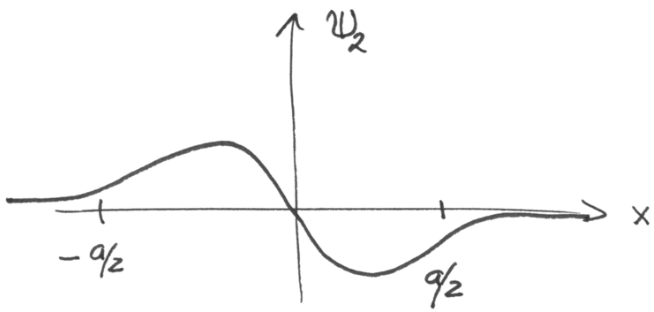


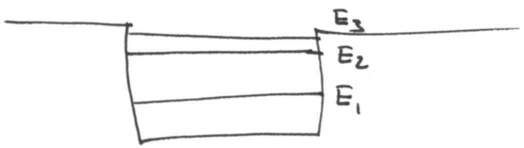
Ef $\quad (n-\tfrac{1}{2})\pi \leq \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}} < (n+\tfrac{1}{2})\pi$

þá eru til n lausnir

Eiginföll







endanlega mörg orkustig

óendanlega mörg

Hreintóna sveifill

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

Viljum finna lausnir (normanlegar) á

$$H\psi = E\psi$$

þ.e.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2 \psi = E\psi$$

Skipta um breytistærð

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}, \quad y = \left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^{1/2} x$$

$$\longrightarrow \quad \psi'' + (\varepsilon - y^2)\psi = 0$$

Eina normanlega lausnin er

$$\psi_n(y) \sim e^{-y^2/2} H_n(y)$$

með

$$\varepsilon = 2n+1 \quad , n = 0,1,2 \ldots$$

$$\rightarrow \quad \psi_n(x) = 2^{-n/2}(n!)^{-1/2}\left(\frac{\mu\omega_0}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\mu\omega_0}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\, x\right)$$

og

$$E_n = \hbar\omega_0(n+1/2) \qquad n = 0,1,2 \ldots$$

H_n : Hermite fleirliður

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$H_0(x) = 1$

$H_1(x) = 2x$

$H_2(x) = 4x^2 - 2$

$\vdots$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n(x)\psi_m(x) = \delta_{n,m}$$

"Önnur aðferð til lausnar

$$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2}$$

notum virkjana

$$a = \alpha x + i\beta p \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}$$

$$a^+ = \alpha x - i\beta p \qquad \beta = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}$$

þá má sýna að

$$\boxed{H = \hbar\omega_0\left\{a^+a + \frac{1}{2}\right\}}$$

skilgreinum $N = a^+a$

$$\rightarrow \quad H = \hbar\omega_0\left\{N + \frac{1}{2}I\right\}$$

Af $[x,p] = i\hbar$ leiðir $[a,a^+] = \mathbb{I}$

notað til þess að fá

$$\mathbb{N}a = a^+aa = aa^+a - \mathbb{I}a = a(\mathbb{N}-\mathbb{I})$$
$$\mathbb{N}a^+ - a^+aa^+ = a^+a^+a + a^+\mathbb{I} = a^+(\quad +\mathbb{I})$$

ef ψ er eiginfall $\mathbb{N}$: $\mathbb{N}\psi = \lambda\psi$

þá eru $a\psi$ og $a^+\psi$ það líka, því:

$$\mathbb{N}(a\psi) = (\lambda-1)(a\psi)$$
$$\mathbb{N}(a^+\psi) = (\lambda+1)(a^+\psi)$$

$\mathbb{N}$: telur orkustammta

a : eyðingar virki

a^+ : sköpunar —‖—

Alhæfing

$$\mathbb{N}(a^n\psi) = (\lambda-n)(a^n\psi)$$
$$\mathbb{N}(a^{+n}\psi) = (\lambda+n)(a^{+n}\psi)$$

Fullyrðing

Einu möguleikarnir á λ eru $0, 1, 2, \ldots$

Sönnun

gerum ráð fyrir $\mathbb{N}\psi = \lambda\psi$

Veljum $n = 0, 1, 2, \ldots$ og lítum á

$$0 \leq \langle a^n\psi, a^n\psi\rangle = \langle a^{n-1}\psi, a^+aa^{n-1}\psi\rangle$$

$$\left(\text{þ.s. } \langle a\varphi, \xi\rangle = \langle\varphi, a^+\xi\rangle\right)$$

$$= (\lambda-(n-1))\langle a^{n-1}\psi, a^{n-1}\psi\rangle$$

$$= (\lambda-(n-1))\cdots(\lambda-1)\lambda\langle\psi,\psi\rangle$$

6

Ef $\lambda \neq 0, 1, 2, \ldots$

$\longrightarrow$ til er nógu stórt n þ.a.
hægri hliðin < 0 ! mótsögn

ath $\lambda = 0$

$$N\psi = a^{\dagger}a\psi = 0$$

$$\Updownarrow$$

$$\langle \psi_0, N\psi_0 \rangle = 0$$

$$\Updownarrow$$

$$\langle a\psi_0, a\psi_0 \rangle = 0$$

$$\Updownarrow$$

$$\boxed{a\psi_0 = 0}$$

þ.e.

$$d_x \psi_0 + \frac{m\omega_0}{\hbar} x \psi_0 = 0$$

$$d_x \psi_0 + \frac{\alpha^2}{2} x \psi_0 = 0$$

7

$$\longrightarrow \quad \psi_0 = \text{fasti}\; e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\psi_n \equiv (a^{+})^n \psi_0$$

$$= \text{fasti}\left(\frac{d}{dx} - \alpha^2 x\right)^n e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

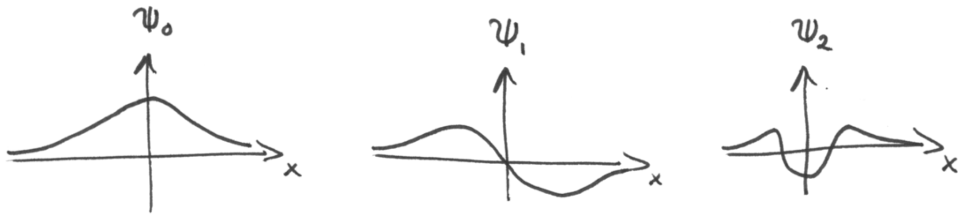
$$= (\text{margliða í } x)\, e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

$$\psi_n(x) = \text{fasti}\; H_n(\alpha x)\, e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

H_n : Hermite margliða

$$N\psi_n = n\psi_n$$

$$\longrightarrow \quad \boxed{H\psi_n = \hbar\omega_0\left(n + \tfrac{1}{2}\right)\psi_n}$$



Orka grunnástandsins $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$

núllpunkts orka

Einkvæmni má sýna með því að sanna að sérhver lausn á

$$\mathbb{N}\psi = n\psi$$

er af gerðinni

$$\psi = \text{fasti}\,\psi_n$$

Frumatriði truflanareiknings

Gefum okkur að lausnir á

$$\mathbb{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \qquad (1)$$

séu þekktar og ekki margfaldar, þ.e. fyrir hvert $E_n^{(0)}$ er aðeins eitt $\psi_n^{(0)}$ til

Lausnin á

$$\left\{\mathbb{H}_0 + \epsilon\,\mathbb{H}_{int}\right\}\psi = E\psi \qquad (2)$$

er ekki þekkt

spurning

Er hægt að finna nálgunarlausnir fyrir (2) sem samantekt á lausnunum fyrir (1) fyrir lítið ϵ

þ.a.

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \epsilon\,\psi_n^{(1)} + \epsilon^2\,\psi_n^{(2)} + O(\epsilon^3)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \epsilon\,E_n^{(1)} + \epsilon^2\,E_n^{(2)} + O(\epsilon^3)$$

<u>finnum fyrst $\psi_n^{(1)}$ og $E_n^{(1)}$</u>

Setja $\psi = \psi^{(0)} + \epsilon\psi^{(1)}$ og $E = E^{(0)} + \epsilon E^{(1)}$

inn í (2)

$$\to \left\{H_0 + \epsilon H_{int}\right\}\left(\psi_n^{(0)} + \epsilon\,\psi_n^{(1)}\right)$$

$$\approx \left(E_n^{(0)} + \epsilon\,E_n^{(1)}\right)\left(\psi_n^{(0)} + \epsilon\,\psi_n^{(1)}\right)$$

1. stigs í ϵ

$$\to \quad H_0\,\epsilon\,\psi_n^{(1)} + \epsilon\,H_{int}\,\psi_n^{(0)}$$

$$= \epsilon\,E^{(1)}\psi_n^{(0)} + E^{(0)}\epsilon\,\psi_n^{(1)}$$

margfalda með $\psi_n^{*(0)}$ og heilda

$$\underbrace{\langle \psi_n^{(0)}, H_0\,\psi_n^{(1)}\rangle} + \langle \psi_n^{(0)}, H_{int}\,\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$= E_n^{(1)} + E_n^{(0)}\langle \psi_n^{(0)}, \psi_n^{(1)}\rangle$$

$$\to \; = \langle H_0\psi_n^{(0)}, \psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}\langle \psi_n^{(0)}, \psi_n^{(1)}\rangle$$

$$\to \quad \boxed{E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)}, H_{int}\,\psi_n^{(0)}\rangle}$$

Einnig má finna

$$\boxed{\psi_n^{(1)} = \sum_{l \neq n} \psi_l^{(0)}\,\frac{\langle \psi_l^{(0)}, H_{int}\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}}$$

2. stigs truflunar reikn gefur fyrir orkuna

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{l \neq n} \frac{|\langle \Psi_n^{(0)}, H_{int} \Psi_l^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}}$$

Dæmi

Ef við Hreintóna sveifilinn bætist liður

$$H_{int} = \epsilon x^4$$

Hvernig breytist orka grunnástandsins

{fyrir hátt n er liðurinn væntanlega ekki smár}

$$E_0 \simeq E_0^{(0)} + \epsilon \langle \Psi_0^{(0)}, \epsilon x^4 \Psi_0^{(0)} \rangle$$

$$\simeq \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \epsilon \frac{3}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^2$$

$$\simeq \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \left(1 + \frac{3\epsilon}{2} \frac{\hbar}{m^2\omega_0^3}\right)$$ hliðrun á tíðni

Athugasemdir

$$\boxed{\text{Ekki er hægt að finna bundin ástönd sem væga truflun á frjáls ástönd}}$$

margskonar truflana aðferðir til

Margskonar Nálgunareikn.

Truflana reikn

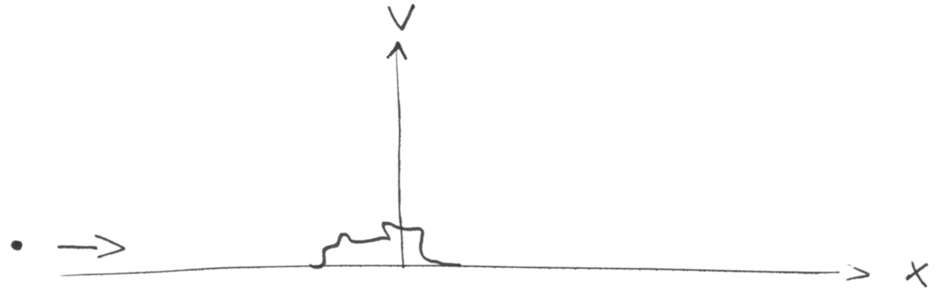
Hnika reikn

Hálf klassískar WKB

⋮

Dreifing

Einföld atvidi um dreifingu í einni vídd



„frjáls ögn" með orkuna E kemur eftir x ásinum og „rekst á" mótisturflum við $x \approx 0$.

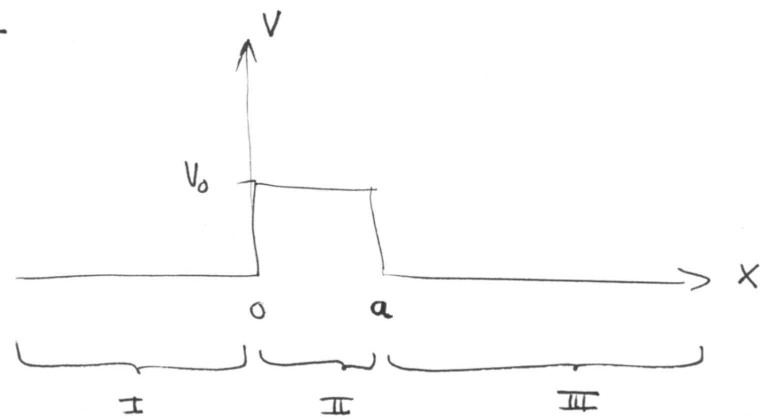
Hvørjir eru líkindini fyri

- speglun ?
- framferð ?

Athugum ikki hvat gerist sum fall av t

Athugum støðugt ástand

T.d.



Ögn (ella agnastreymur) kemur frá vinstri

Hluti speglast við $x=0$ og hluti sleppur í gegn

$E < V_0$

I

$$\psi(x) = \overbrace{e^{ikx}}^{\text{straumur inn}} + \overbrace{B e^{-ikx}}^{\text{speglun}}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

③

II

$$\psi(x) = Ce^{+kx} + De^{-kx}$$

$$K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

III

$$\psi(x) = Fe^{ikx}$$

Nú þarf að krefjast að

ψ og ψ' séu samfelld í $x=0$, $x=a$

$\longrightarrow$ 4 jöfnur 4 óþekktarst. $\underline{B, C, D, F}$

Líkindi f. speglun

$$R = \lim_{x \to -\infty} \left| \left\{ \psi(x) - e^{ikx} \right\} \right|^2 = |B|^2$$

④

Líkindi fyrir framferð

$$T = \lim_{x \to \infty} |\psi|^2 = |F|^2$$

Líkindin eru varðveitt (fjöldi agna)

$$\longrightarrow \boxed{T + R = 1}$$

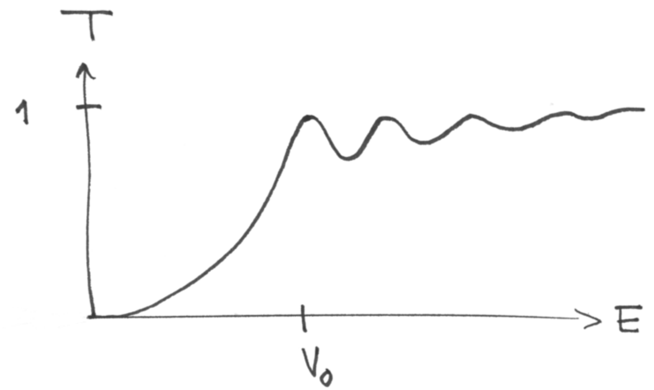
$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(ka)} \qquad E < V_0$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sin^2(k_1 a)}$$

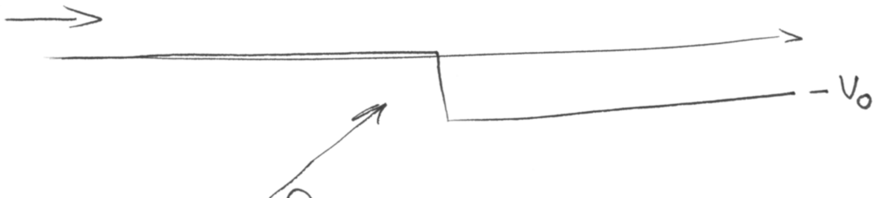
$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$$

(5)

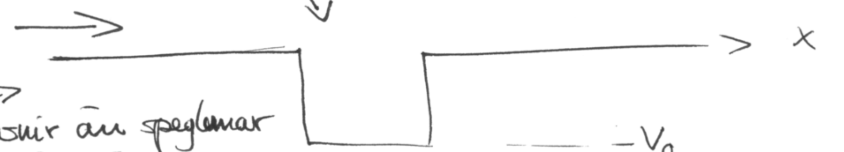
Smug



fleiri dæmi



hér verður speglun



til lausnir án speglunar
fyrir viss E $\Leftrightarrow$ gegnsæi

Dæmi um tímaháða dreifingu

(6)

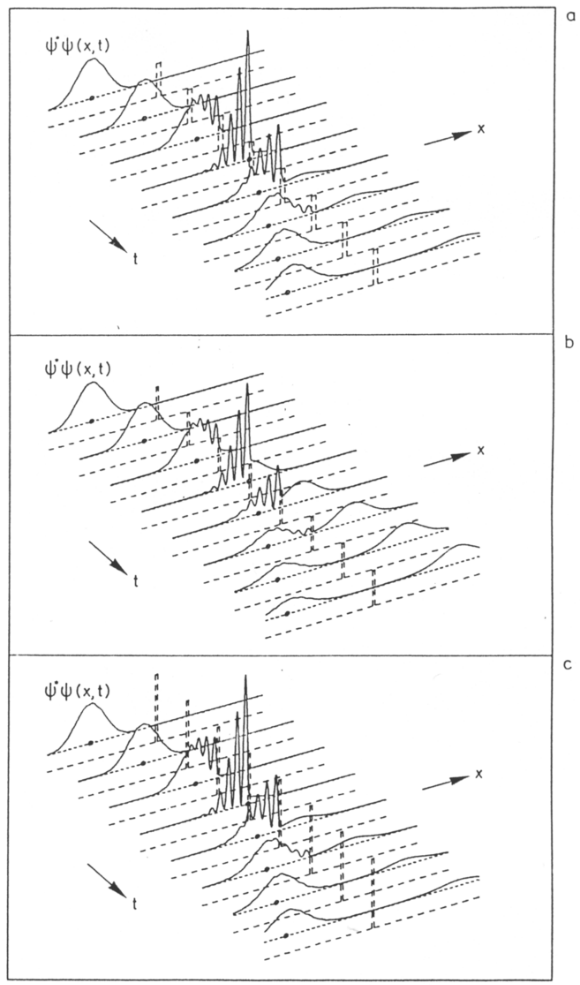
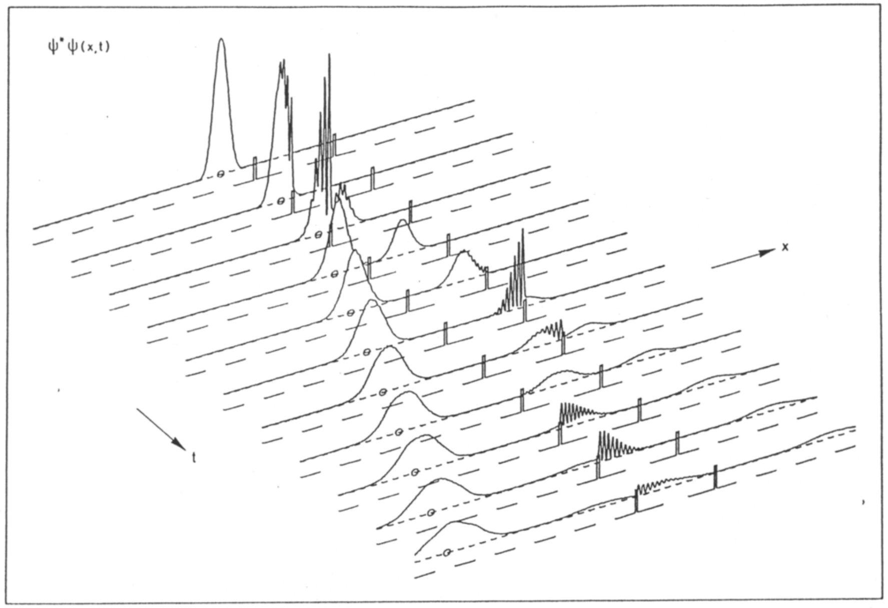


Figure 5.5 **Tunnel effect. (a) Time development of the probability density for a wave packet incident from the left onto a potential barrier of height V_0. The small circles indicate the positions of a classical particle incident onto the same potential barrier. (b) Same as for part a, but for a barrier of half the width. (c) Same as for part b, but for a barrier of double the height.**

5.3 Excitation and Decay of Metastable States

The scattering of a wave packet on two repulsive barriers that are far apart compared to the spatial width of the wave packet is a very interesting phenomenon. The width of the two barriers is chosen so that the tunnel effect allows a sizable fraction of the probability to pass through the two barriers. Figure 5.6 shows the time development of the packet entering from the left. We observe that although the major part of the probability is reflected at the first barrier, another part enters the region between the barriers and retains its bell shape at least while distant from the barriers. At a later moment in time the injected packet hits the barrier on the right, and again there is partial reflection and transmission. Later on in the process the particle is with a certain probability confined between the two walls, continuously bouncing back and forth and each time losing part of the probability to the outside region. Except for the continuous broadening of the particle wave packet, this situation is very similar to the analogous process in optics, namely a light wave packet falling onto a glass plate, which was shown in Figure 2.12.

Figure 5.6 **Time development of the probability density for a wave packet incident from the left onto a double potential barrier. The small circles indicate the positions of a classical particle incident onto the same barrier.**



(8)

Tenging við líkinda þéttleika og straum

skilgreinum líkinda þéttleika $\rho(x) = |\psi(x)|^2$

$\psi(x)$ getur þróast í tíma $\rightarrow$ ρ líka

$$i\hbar \partial_t \psi = H\psi$$

$$\rightarrow \partial_t \rho(x,t) = (\partial_t \psi)^* \psi + \psi^* \partial_t \psi$$

ef $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ þá fæst

$$\partial_t \rho(x,t) + \partial_x j(x,t) = 0 \quad \text{(varðveislujafna)}$$

með

$$j(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left\{\psi^* \partial_x \psi - \partial_x \psi^* \cdot \psi\right\}$$

ath. líkindastraumurinn $j(x,t)$ hverfur fyrir bundin ástönd því þau hafa rauntölu bylgjuföll

Líkindastraumurinn og smugið

I $\quad \psi = e^{ikx} + Be^{-ikx}$

II $\quad \psi = Ce^{kx} + De^{-kx}$

III $\quad \psi = Fe^{ikx}$

$$\text{I} \rightarrow \quad j(x) = \frac{\hbar k}{m}\left(1-|B|^2\right) = \frac{\hbar k}{m}(1-R)$$

inn $\quad$ speglun

$$\text{II} \rightarrow \quad j(x) = 0$$

$$\text{III} \rightarrow \quad j(x) = \frac{\hbar k}{m}|F|^2 = \frac{\hbar k}{m}T$$

framferð

Kúlusamhverft mætti og hverfiþungi

Sígild aflfræði

Tveggja agna kerfi.
Víxlverkun aðeins háð fjarlægð milli agna

$$V(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|)$$

Ef notuð eru í staðinn f. r_1 og r_2

$$\bar{r} = \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \quad : \text{ innbyrðis hnit}$$

$$\bar{R} = \frac{m\bar{r}_1 + M\bar{r}_2}{m+M} \quad : \text{ massamiðjuhnit}$$

Þá verður Hamilton virkinn aðgreinanlegur í tvo hluta:

Annar lýsir hreyfingum frjálsrar massamiðju

Kúlusamhverft mætti og hverfiþungi

Sígild aflfræði

Tveggja agna kerfi.

Víxlverkun aðeins háð fjarlægð milli agna

$$V(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|)$$

Ef notuð eru í staðinn f. r_1 og r_2

$$\bar{r} = \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \quad : \text{umbyrðis hnit}$$

$$\bar{R} = \frac{m\bar{r}_1 + M\bar{r}_2}{m+M} : \quad \text{massamiðjuhnit}$$

þá verður Hamilton virkinn aðgreinanlegur í tvo hluta:

Annar lýsir hreyfingum frjálsrar massamiðju

Hinn lýsir innbyrðis hreyfingum, sem hreyfingu einnar eindar með massa

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \qquad \text{(skertur massi)}$$

í miðlæga mættinu $V(r)$

Í miðlægu mætti er hverfiþunginn hreyfingarfasti. $\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p}$

Hamilton virkinn

Í skammtafræði er Hamiltonvirkinn fyrir hreyfingu agnar í miðlægu mætti í 3-vídd

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$$

Í kúluhnitum er

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

Sem rita má á einfaldari hátt með því að nota $\mathbb{L}$

$$\mathbb{L} = \bar{r} \times \bar{p} \to \begin{cases} \mathbb{L}_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) \\ \mathbb{L}_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z) \\ \mathbb{L}_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \end{cases}$$

og því

$$\mathbb{L}_x = i\hbar\left\{\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right\}$$

$$\mathbb{L}_y = i\hbar\left\{\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right\}$$

$$\mathbb{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

og

$$\mathbb{L}^2 = \mathbb{L}_x^2 + \mathbb{L}_y^2 + \mathbb{L}_z^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$

sjá app. M í bók um hnitaskiptin

$$\to \nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\mathbb{L}^2}{r^2\hbar^2}$$

og

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\mathbb{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

<u>Athugum hverfiþungann betur</u>

$$\mathbb{L} = \mathbb{r} \times \mathbb{p} \to \begin{cases} \mathbb{L}_x = yp_z - zp_y \\ \mathbb{L}_y = zp_x - xp_z \\ \mathbb{L}_z = xp_y - yp_x \end{cases}$$

notum $[\mathbb{r}_i, \mathbb{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ (hnitin eru óháð)

$$\to \begin{cases} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] = i\hbar L_y \end{cases}$$

→ Ekki er hægt að mæla samtímis öll hnit $\mathbb{L}$ án óvissu

Það gildir því:

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle|$$

Sýna má að

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

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

$$[\mathbb{L}_z, \mathbb{H}] = 0$$

$$[\mathbb{L}^2, \mathbb{L}] = 0$$

Þ.a. þó ekki sé hægt að mæla samtímis $\mathbb{H}$ og $\mathbb{L}$ án óvissu

$\boxed{\text{þá má mæla samtímis } \mathbb{H}, \mathbb{L}^2, \mathbb{L}_z}$

$\boxed{\text{því er til ástand sem er sameiginlegt eiginástand } \mathbb{H}, \mathbb{L}^2 \text{ og } \mathbb{L}_z}$

bendir á

Aðskilnaður breytistærða

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

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r$$

með

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cancel{\nabla^2} + \frac{\mathbb{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

reynum lausn á forminu

$$\psi(\bar{r}) = R(r)\, Y(\theta, \varphi)$$

greinilega fæst

$$\mathbb{L}^2 \psi(\bar{r}) = R(r)\, \mathbb{L}^2 Y(\theta, \varphi)$$

setja inn í $H\Psi = E\Psi$, deila með RY

og margfalda með $2\mu r^2$

$\longrightarrow$

$$\frac{-\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) R(r)}{R(r)} + 2\mu r^2 (V(r) - E) = -\frac{\mathbb{L}^2 Y(\theta,\varphi)}{Y(\theta,\varphi)}$$

v.h. háð r h.l. háð θ, φ

$\longrightarrow$ báðar eru fasti $= \lambda$

$$\boxed{\longrightarrow -\frac{\hbar}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R + \frac{\lambda}{2\mu r^2} R + V(r) R = E R \quad \text{og} \quad \mathbb{L}^2 Y = \lambda Y}$$

leysum síðari jöfnuna

$$\mathbb{L}^2 Y = \lambda Y$$

aðgreining φ og θ, reynum $Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$

$\longrightarrow$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = \text{fasti} = -m_\ell^2$$

$$\hbar^2 \left\{ -\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d}{d\theta}\right) + \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta} \right\} \Theta = \lambda \Theta$$

fyrri jafnan hefur lausnina

$$\Phi(\varphi) = e^{\pm i m_\ell \varphi}$$

þá síðari má umrita

með $\lambda = \hbar \ell(\ell+1)$, $z = \cos\theta$

í

$$\frac{d}{dz}\left((1-z^2)\frac{d\Theta}{dz}\right) + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m_\ell^2}{1-z^2}\right)\Theta = 0$$

(3)

Lausnin er takmarkað fall á $z \in [-1,1]$

$\rightarrow \quad l \in \mathbb{N}_0 \,, \quad m_l \in \mathbb{Z}$

$|m_l| \leq l$

Lausnin Θ er tengd legendre fleirliðum í $z = \cos\theta$

Heildar lausnin eru kúluföll

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$$

með

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-x^2)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l$$

þ.a.

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

$$Y_{10}(\theta,\varphi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta$$

$$Y_{1\pm1}(\theta,\varphi) = \pm\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{20}(\theta,\varphi) = \left(\frac{5}{10\pi}\right)^{1/2}(3\cos^2\theta - 1)$$

(4)

Þau mynda staðlaðann grunn í (φ,θ) þ.a.

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$= \int d\Omega\, Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)\, Y_{lm}(\theta,\varphi) = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$$

Kúluföllin eru eiginföll $\mathbb{L}^2$ og $\mathbb{L}_z$

$$\mathbb{L}^2\, Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)\, Y_{lm}$$

$$\mathbb{L}_z\, Y_{lm} = \hbar m\, Y_{lm}$$

Því er sérhvert fall af gerðinni

$$\psi(\vec{r}) = R(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

eiginfall $\mathbb{L}^2$ og $\mathbb{L}_z$

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ lýsir ástandi þar sem lengd hverfiþungans og z-hnit hans eru ákvörðuð án óvissu

Radial jafnan var

$$-\frac{\hbar}{2\mu}\underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}}_{=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r}R+\frac{\lambda}{2\mu r^2}R+V(r)R=ER$$

setjum $u=rR$ þá fæst:

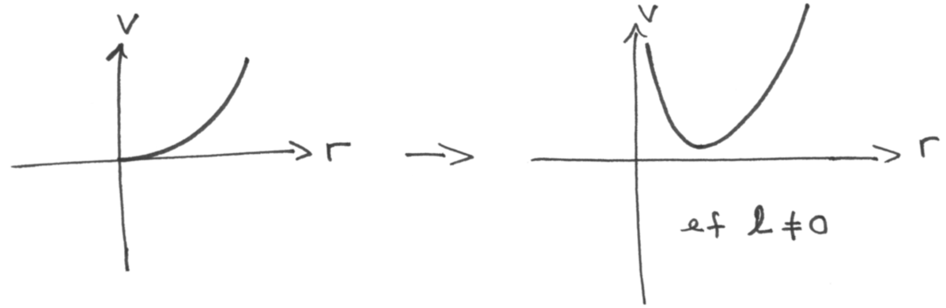
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+V(r)\right\}u(r)=E\,u(r)$$

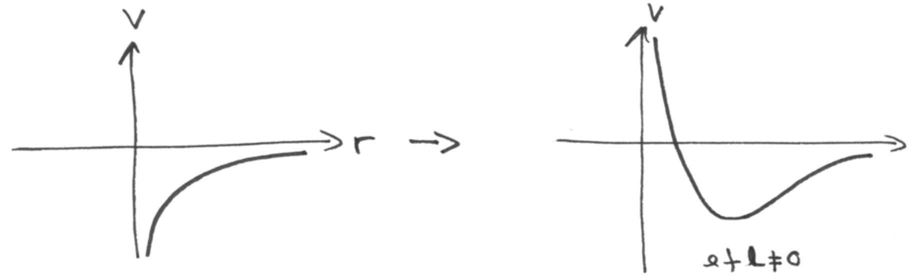
Einvíð Schrödinger jafna með

$$\boxed{\begin{gathered}V(r)\longrightarrow V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\\ r\geq 0\end{gathered}}$$

Við mættið bætist fráhrindiliður

t.d.





fyrir nógu stórt l er heildarmættið fráhr.

Eins og einvíð Schrödinger jafna fyrir $x\geq 0$

Jafngildir jöfnunni f. $x\in(-\infty,\infty)$

með $V(x)=\infty$ ef $x<0$

$$\longrightarrow \underline{\underline{u(0)=0}}$$

ef mættið er kúlusamhverft

$\longrightarrow$ E_{nl} er margfallt m.t.t. m

Atóm með einni rafeind

hleðsla $\begin{cases} \text{rafeind: } & -e \\ \text{kjarni: } & Ze \end{cases}$

$Z = 1 \longrightarrow H$

$Z = 2 \longrightarrow He^+$

$Z = 3 \longrightarrow Li^{++}$

Örvuð atóm senda frá sér ljós í litrófslínum,

$$\nu_{nm} = \frac{fasti}{\hbar} \cdot Z^2 \left\{ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

með $n, m \in \mathbb{N}$

Radial jafnan er

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right\} U(r) = E U(r)$$

þessa jöfnu þarf að leysa með

$$\int |R(r)|^2 r^2 dr < \infty$$

leitum bundinna ástanda

$$\longrightarrow \qquad K \equiv \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$x = 2Kr \, , \quad U(r) = y(x)$$

$$\nu = \frac{me^2}{K\hbar^2} \frac{Z}{4\pi\epsilon_0}$$

$$\longrightarrow$$

$$y'' - \left\{ \frac{l(l+1)}{x^2} - \frac{\nu}{x} + \frac{1}{4} \right\} y = 0$$

E kemur aðeins fyrir í ν

Skoða aðfellulausnir

$x \to \infty$

$\to y'' - \frac{1}{4} y \simeq 0$

$\to y \sim e^{\pm x/2}$ ← velja mínus

$x \to 0$

$\to y'' - \frac{l(l+1)}{x^2} y \simeq 0$

$\to \begin{cases} y \simeq x^{l+1} & \leftarrow \text{velja vegna } y(0)=0 \\ y \simeq x^{-l} \end{cases}$

reyna því lausn

$$y(x) = e^{-x/2} x^{l+1} v(x)$$

innsetning $\to$

$$x v'' + (2l+2-x) v' + (\nu - l - 1) v = 0$$

Eina normanlegalausnin er Laguerre marglíða

$$L^{2l+1}_{n-l-1}(x)$$

þegar

$$\nu - l - 1 \in \mathbb{N}_0$$

$$\to u_{nl}(r) \sim e^{-x/2} x^{l+1} L^{2l+1}_{n-l-1}(x)$$

með

$n = 1, 2, 3, \ldots$

$l = 0, 1, 2, \ldots (n-1)$

$$E_n = -\frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 \frac{Z^2}{n^2}$$

þ.s.

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

normuðu eiginföllin eru

$$\psi_{n\ell m}(\vec{r}) = \left\{ \left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3} \right\}^{1/2} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell \exp\left\{-\frac{r}{na_0}\right\}$$

$$\cdot L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

með

$$a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{\mu e^2 Z} = \text{Bohr geisli}$$

Ekki fullkomið mengi lausna, það sem lausnir fyrir $E>0$ vantar

---

$$L^\alpha_n(x) = e^x \frac{x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x} x^{n+\alpha}\right)$$

ef $Z=1 \;\rightarrow\; E_n \simeq -\dfrac{13{,}6\ \text{eV}}{n^2}$

fyrir gefið n hafa öll ástöndin með mism. ℓ og m sömu orku

margfeldni E_n er því

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n^2$$

margfeldni m.t.t. m varðveist við

— || — ℓ er séreinkenni Coulomb mættisins

$\updownarrow$

borið saman við önnur 3D mætti

líkindi þess að rafeind finnist á milli r og $r+dr$:

$$\left\{ \int |\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)|^2 d\Omega \right\} r^2 dr$$

$$= |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr$$

Rithättur

$\ell = 0$ s-ástönd

$\ell = 1$ p- ....

$\ell = 2$ d- ....

$\ell = 3$ f- ....

athuga vel myndir 7-10 bls 251
og 7-5 bls 245
í ER

Segulvægi og spuni

brautar

samband hverfiþunga og segulvægis skv sígildri eðlisfr.

straumur $I = \frac{qv}{2\pi r}$

$A = \pi r^2$

Segulvægi

$$\mu_\ell = I \cdot A = \frac{qv}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{qvr}{2}$$

hverfiþungi

$$L = |\bar{L}| = mvr$$

$$\longrightarrow \quad \frac{\mu_\ell}{L} = \frac{q}{2m}$$

fyrir rafeind með $q = -e$

$$\frac{\mu_\ell}{L} = -\frac{e}{2m}$$

Venja er að skrifa

$$\frac{\mu_e}{L} = -\frac{g_\ell}{2}\cdot\frac{e}{m} \quad , \; \underline{g_\ell = 1 \text{ hér}}$$

Skilgreinum segulvægis einingu Bohrs

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{segulvægi á sígildri braut með} \\ L = \hbar \end{array} \right\}$$

og fáum þá

$$\frac{\mu_e}{L} = -\frac{g_e \mu_B}{\hbar}$$

Í rúmi er segulvægið vektor rétt eins og $\bar{L}$

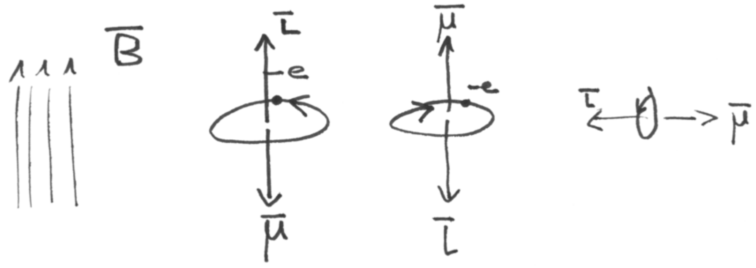
$\longrightarrow$

$$\vec{\mu}_e = -\frac{g_e \mu_B}{\hbar}\vec{L}$$

Í ytra segulsviði $\bar{B}$ er orkan vegna þess

$$E_{segul} = -\bar{\mu}_e \cdot \bar{B}$$

þ.e. ef $g_\ell = 1 > 0$



E_{segul}	$+\lvert\bar{\mu}_e\rvert\lvert\bar{B}\rvert$	$-\lvert\bar{\mu}_e\rvert\lvert\bar{B}\rvert$	0

$\longrightarrow$ Kerfið lágmarkar orku m.þ.a. velta $\bar{\mu} \parallel \bar{B}$
(í rúmi er vægi $\tau = \bar{\mu}\times\bar{B}$, sem hverfur þá)

Í skammtafræði verður vektor virkja þannig

$$\to \quad \vec{\mu}_l = -\frac{g_e \mu_B}{\hbar}\vec{L}$$

og Hamilton virkinn fyrir rafeind í einsleitu segulsviði verður

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) - \vec{\mu}_l \cdot \vec{B}$$

ef $\vec{B} = (0,0,B)$

$$\to \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \frac{g_e \mu_B}{\hbar} B L_3$$

$$= H_0 + \frac{g_e \mu_B}{\hbar} B L_3$$

Eiginföll H_0 eru

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Sem eru líka eiginföll L_z

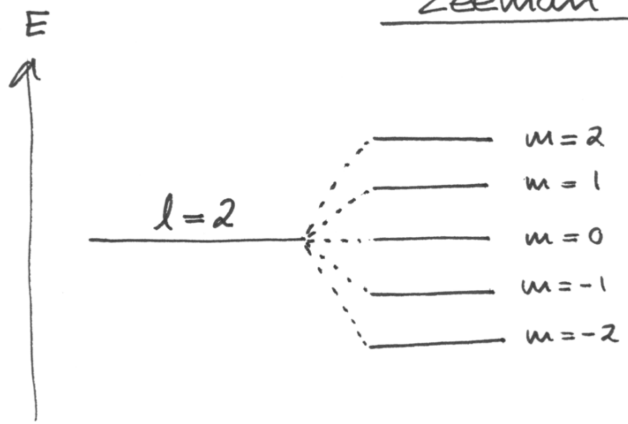
$$\to \quad H\psi_{nlm} = \left(E_{nl} + \frac{g_e \mu_B}{\hbar} B \hbar m\right)\psi_{nlm}$$

ef

$$H_0 \psi_{nlm} = E_{nl}\psi_{nlm}$$

→ orkustig með hverfiþunga-skammtatölu l klofna í $2l+1$ stig með mismunandi orku í segulsviði

<u>Zeeman hrif</u>



B eyðir m-margfeldninni

Misleitt segulsvið

samkvæmt sígildri eðlisfræði
verkar kraftur á segulvægið
í misleitu B

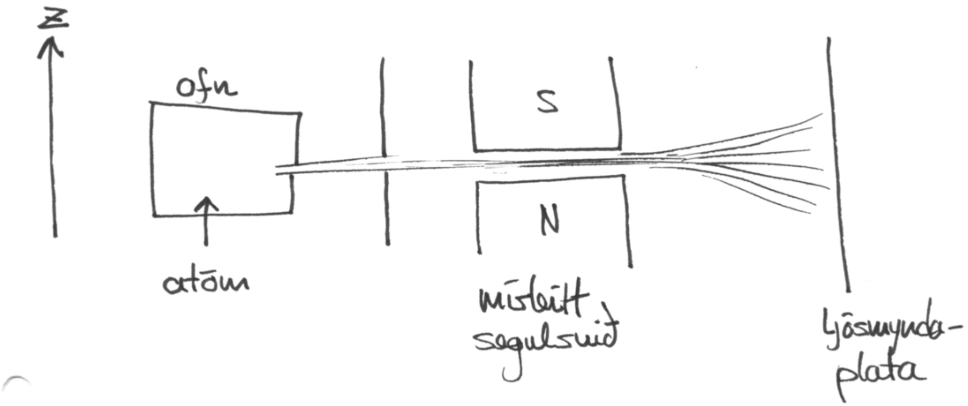
$$\bar{F} = (\bar{\mu}_\ell \cdot \bar{\nabla})\bar{B}$$

veljum
$$\bar{B} = (0,0,B(z))$$

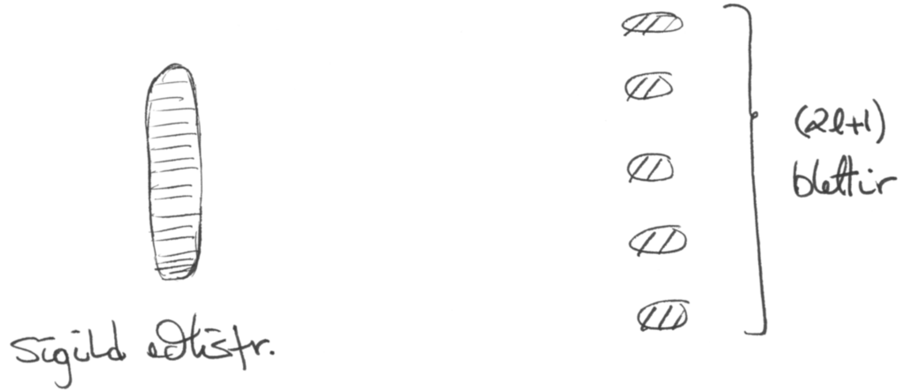
$$\longrightarrow \quad \bar{F} = \left(0,0,\mu_z \frac{dB}{dz}\right)$$

gildir líka í skammtafræði, en
μ_z hefur aðeins stjál gildi.

Tilraun Sterns og Gerlachs



Mynd á plötu — skammtafr



1922 voru notuð silfuratóm
með $l = 0$

þvi var búist við einum bletti

en tveir sáust

↑ jöfn tala

Hér er um eitthvert auka segulvægi að ræða

Segulvægi $\longleftrightarrow$ hverfiþungi

Ekki til neinn hverfiþungi sem tengist p og r (brautarhverfiþungi) og leiðir til jafns fjölda m- ástanda

$\longrightarrow$ innri hverfiþungi spuni

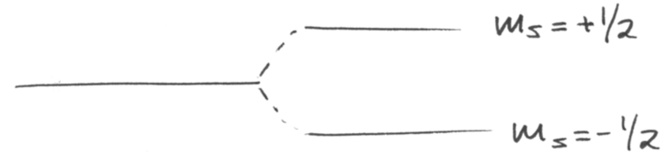
$$\vec{\mu}_s \equiv -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

Hverfiþungi $\longrightarrow$ $\vec{S}^2$ hefur eigingildin $\hbar s(s+1)$

S_z hefur $-s\hbar, \dots, s\hbar$

Ef $2s+1 = 2 \longrightarrow s = 1/2$

Vegna $\vec{\mu}_s$ (og $\vec{S}$) klofna orkustigin í tvennt þótt $l=0$



eigingildi S_z eru tvö $\quad \Delta E_s = g_s \mu_B B$

$$\boxed{\text{Tilraunir gefa } g_s = 2\,!}$$

Lýsing á spuna í skammtafræði

spuna er ekki hægt að tengja sígildum hugmyndum um hringsnúning agna

Spuni er skammtafyrirbrigði

Notum virkjaþrend

$$\bar{\mathbb{S}} = (\mathbb{S}_x, \mathbb{S}_y, \mathbb{S}_z)$$

Spuni er hverfiþungi

$$\longrightarrow [\mathbb{S}_x, \mathbb{S}_y] = i\hbar \mathbb{S}_z \quad \text{o.s.fr.}$$

því eru lítil

eigingildi $\mathbb{S}_z$: $\hbar s$

$s = \pm 1/2$

$\mathbb{S}^2$: $s(s+1)\hbar^2$

Ein möguleg framsetning þessara virkja, er sem fylki

$$\mathbb{S}_i = \frac{1}{2}\hbar \sigma_i \qquad \text{(Pauli fylki)}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\mathbb{S}$ er þá línulegur virki á $\mathbb{C}^2$

$\mathbb{S}^2 = \hbar \frac{3}{4} \mathbb{I}$ og $\mathbb{S}_z$ hefur eiginvektora

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ og } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

því verður að líta á bylgjuföllin ψ með gildi í $\mathbb{C}^2$ í stað $\mathbb{C}$

$$\psi(\bar{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\bar{r}) \\ \psi_-(\bar{r}) \end{pmatrix} = \psi_+(\bar{r})\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_-(\bar{r})\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

fylkin verka á $\binom{1}{0}$ og $\binom{0}{1}$

$$\boxed{\mathbb{S} \text{ víxlast við alla virkja sem eru föll og } \bar{r} \text{ og } \mathbb{P} \rightarrow \underline{\underline{\mathbb{L}}}}$$

Athugum

Innfeldi $\langle \psi, \varphi \rangle \equiv \langle \psi_+, \varphi_+ \rangle + \langle \psi_-, \varphi_- \rangle$

meðalg. $\langle A \rangle_\psi = \langle \psi_+, (A\psi)_+ \rangle + \langle \psi_-, (A\psi)_- \rangle$

Almennar athugasemdir

hér virðist sem spunanum sé komið fyrir í skammtafræðinni „með höndunum"

Afstæðiskenning
+
skammtafræði

Dirac jafna
1. stigs jafna
spuni ½
sjálfkrafa

Klein Gordon jafna
2. stigs jafna
spuni 0

→ mönnum hættir til að álíta að spuni sé tilkominn vegna afstæðiskenningar

Hugmyndin styrkist þegar sést að þegar rafsegulsviðið er tekið með

$$\bar{p} \to \bar{p} - q\bar{A}$$ minimal coupling

þá fæst $g_s = 2$

Slíkt var aðeins hægt að finna út frá tilraunum fyrir Schrödinger jöfnuna (Pauli jöfnuna)

Í Raun (Levy Leblond, Comm. Math. Physics. 6 (1967) 286)

má skrifa Schrödinger jöfnuna sem 1. stigs jöfnu og setja inn rafsegulsvið

$$\bar{p} \to \bar{p} - q\bar{A}$$

og þá fæst

$$g_s = 2$$

Spuninn er því ekki vegna Lorentz óbreytileikans, heldur vegna dýpri sameiginlegrar samhverfu Lorentz og Galilei ummyndana + skammtafræði

---

skammtasviðsfræði QED

skammtað rafsegulsvið

+ efnissvið

$$\left.\begin{array}{l} \langle E\rangle = \langle B\rangle = 0 \\ \langle E^2\rangle \neq 0 \quad \langle B^2\rangle \neq 0 \end{array}\right\} \text{ í tómarúmi}$$

$$\to \quad g = 2.0023193048 \pm 0.000\,000\,000\,8$$

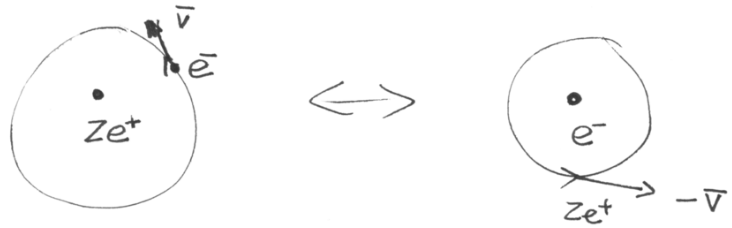
$$g_{mælt} = 2.0023193048 \pm 0.000\,000\,000\,4 \; !$$

(1982)

Spuna-Brautarvíxlverkun

Spuninn var „settur inn" í Schrödingerjöfnuna

→ eftir er að taka tillit til þess að á $\bar{\mu}_s$ verkar segulsvið sem rafeindin sér vegna hreyfingar kjarnans (í kerfi þ.s. rafeindin er kyrr)



Biot-Savart

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\vec{J}\times\vec{r}}{r^3} = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi}\frac{\vec{v}\times\vec{r}}{r^3}$$

$$\vec{J} = -Ze\vec{v}$$

$$\vec{B} = -\frac{1}{ec^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}(\vec{v}\times\vec{r})$$

með

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \qquad \epsilon_0\mu_0 = c^2$$

en

$$\vec{v}\times\vec{r} = \frac{1}{m_e}\vec{L}$$

$$\rightarrow \vec{B} = -\frac{1}{em_ec^2}\frac{1}{r}\left(\frac{dV}{dr}\right)\vec{L}$$

$$\rightarrow -\vec{\mu}_s\cdot\vec{B} = \frac{g_s\mu_B}{\hbar}\frac{1}{em_ec^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{S}\cdot\vec{L}$$

í kerfi kyrrs kjarna

Rafeindin hefur spuna og á boginni braut verður að taka tillit til Thomas pólveltu (viðbótur O í bók)

→ í tregðukerfi massamiðju

$$E_{sb} = \frac{g_s\mu_B}{2\hbar em_ec^2}\frac{1}{r}\left(\frac{dV}{dr}\right)\vec{S}\cdot\vec{L}$$

því kemur viðbót við Hamiltonvirkjann

$$\mathbb{H}_{sb} = \frac{g\mu_B}{2\hbar em_ec^2}\frac{1}{r}\left(\frac{dV}{dr}\right)\vec{\mathbb{S}}\cdot\vec{\mathbb{L}}$$

spuna brautar víxlverkun

Samkvæmt truflanareikning (Examp 8-3, bls 280)

er $\langle H_{s.b}\rangle_\psi \sim 10^{-4}\,\text{eV}$

meðan bilið á milli þrepa ~ eV

Vegna spunabrautarvíxlverkunar eru hvorki L né S fastar einir sér.

Heildarhverfiþunginn $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ er fasti

<u>Hvernig leggst hverfiþungi saman í skammtafr.?</u>

Heildarhverfiþungi

$$\vec{J} \equiv \vec{L} + \vec{S}$$

$\vec{J}$ er striðþungi

$\rightarrow$ $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ o.s.fr.

$\vec{J}$ er vigurvirki

$\rightarrow$ eigingildi J^2 eru $j(j+1)\hbar^2$ með $j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$

eigingildi J_z eru $m_j = \underbrace{-j, -j+1, \dots j}_{2j+1 \text{ gildi}}$

<u>dæmi</u>

Úr ástandi með l og $s = 1/2$ verða ástönd $j = l + 1/2$, $j = l - 1/2$

þ.a. ef $l=2$, $s=1/2$

$\rightarrow j = 3/2$ og $j = 5/2$

$m_j = 3/2$	$5/2 = m_j$
$1/2$	$3/2$
$-1/2$	$1/2$
$-3/2$	$-1/2$
	$-3/2$
	$-5/2$

<u>athugum $\mathbb{S}\cdot\mathbb{L}$ liðinn</u>

$\mathbb{S}$ og $\mathbb{L}$ víxlast

$$\rightarrow \vec{\mathbb{S}}\cdot\vec{\mathbb{L}} = \frac{1}{2}\left[(\vec{\mathbb{L}}+\vec{\mathbb{S}})^2 - \mathbb{L}^2 - \mathbb{S}^2\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\mathbb{J}^2 - \mathbb{L}^2 - \mathbb{S}^2\right\}$$

því fæst, ef ψ er ástand með skörp gildi á j, l, s þá er

$$\langle \mathbb{H}_{s-b}\rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right\}\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\right\rangle$$

fyrir vetnisatómið er $\langle \mathbb{H}_{s-b}\rangle$ af sömu stærðargráðu og leiðréttingar afstæðiskenningarinnar

fyrir þung atóm verður $\langle \mathbb{H}_{sb}\rangle$ mikilu mikilvægara $\rightarrow$ <u>sbr. fyr. IV</u>

Afstæðisk. + skammtafræði (og spuna 1/2) $\rightarrow$ Dirac jafnan

$$\rightarrow E_{nj} = \frac{\mu e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2}\left\{1 + \frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right)\right\}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

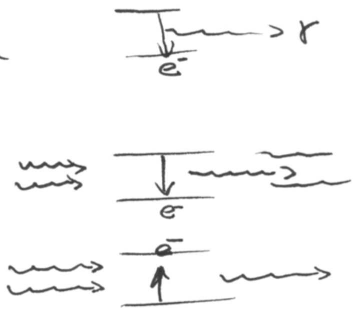
Valreglur

færslur rafeinda á milli orkustiga (eða ástanda í atómi) geta verið

Sjálfgeislun

Örvuð geislun

Ísog



sem tengjast rafsegul geislun

færslurnar fylgja (þar sem sjást vel) allar reglunum

$$\boxed{\begin{aligned}\Delta l &= \pm 1\\ \Delta j &= 0, \pm 1\end{aligned}}$$

$$\Delta S = 0$$

Δ speglunartala $\neq 0$

og orka ljóseindar er

$$\hbar\omega = E_i - E_f \qquad \text{ef } E_i > E_f$$

$$\hbar\omega = E_f - E_i \qquad \text{ef } E_f > E_i$$

Ljóseindin ber hverfiþunga $\hbar$ og heildar hverfiþunginn er varðveittur

$$\vec{J}_f = \vec{J}_i + \vec{1}$$

$\Delta j = 0$ → stefna hverfiþunga atómsins breytist þegar færslan á sér stað

$\Delta S = 0$: víxlverkunin sem veldur færslunni er fall af $\mathbf{p}, \mathbf{r}$ og tengist því ekki spuna

⑥

Valreglurnar hér eru ekki algildar

Varðveisla hverfiþungans er algild

en valreglurnar hér eru gildar
fyrir tvípóls nálgun víxlverkunarinnar

til eru hærri nálganir; segultvípóls
rafsfjórpóls, en færslur þeirra vegna
eru mikið ólíklegri

líftíma örvaðra ástanda og valreglur
má finna með tímaháðum
truflanareikningi

⑦

færsluhraðinn er (sjálfgeislun)

$$R = \frac{16\pi^3 \nu^3 P_{fi}^2}{3\epsilon_0 h c^3}$$

[líkindi útgeislunar ljóseindar] / sekúndu

P_{fi} : fylkisstak tvípólsvigursins $-e\vec{r}$

$$P_{fi} = |\langle \varphi_f, -e\bar{r}\varphi_i\rangle|$$

$$= \left|e\int d\bar{r}\, \varphi_f^* \bar{r} \varphi_i\right|$$

---

truflunin við sjálfgeislun er flökt
rafsegulsviðsins

$$\langle E\rangle = \langle B\rangle = 0$$

$$\langle E^2\rangle \neq 0 \quad \langle B^2\rangle \neq 0$$

kemur fyrst fram
við skömmtun
rafsegulsv.

{ örvaðarførslur verða litlegri í sterkara rafsegulsviði en ella }

Eiginástönd H_0 (atómsins) hafa hleðsludreifingu
$\rho(\bar{r}) = -e|\psi_n|^2$ sem er óháð tíma

þegar „kveikt" er á tímaháðri truflun
eru eiginástönd H_0 ekki lengur eiginástönd
kerfisins → tímaháð

tímaháð hleðsludreif. → útgeislun

Fyrir Vetnisatómið $2p \to 1s$ $R \sim 10^8 s^{-1}$

$\to$ líftími $\tau \sim \frac{1}{R} \simeq 10^{-8} s$

Valreglur fyrir tvípóls geislun róðastaf

$$P_{fi} = e \left| \int d\bar{r}\, \psi_f^* \bar{r}\, \psi_i \right|$$

athugum spegil samhverfuna

ef $(x, y, z) \to (-x, -y, -z)$

$\to$ $\bar{r} = -\bar{r}$ spegiltala -1

$$\left. \begin{cases} r \to r \\ \theta = \pi - \theta \\ \varphi \to \pi + \varphi \end{cases} \right\}$$ athuga áhrifin á Y_{lm}

$\to$ $\psi_{nlm}(r, \pi-\theta, \pi+\varphi) = (-1)^l \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$

spegiltala $(-1)^l$

$$p_{fi} = e \left| \int d\bar{r}\, \psi_f\, \bar{r}\, \psi_i \right|$$

ef spegiltölur ψ_f og ψ_i eru jafnar

$\rightarrow$ $p_{fi} = 0$ (því spegiltala $\bar{r}$: -1)

$\rightarrow$ <u>valregla</u>: spegiltölur ψ_i og ψ_f geta ekki verið jafnar

$\rightarrow$ $\Delta l = \pm 1$

---

færslur sem brjóta þessar valreglur (notast við hærri pöla) taka miklu lengri tíma