(1)

Inngangur að skammtafræði

Bók: Introduction to QM, Griffiths

Kaflar: 1 – 4, hluti af 5.
6, 7 og 9

Fyrirlestrar, Dæmi (heima og tímadæmi)

Hvað er skammtafræði . . . . .

Hvað er hún ekki. . . .

(2)

Tilraunir 1880 – 1910

varmarýmd efna
Geislun svarthlutar
Ljósröfun
Hemlunargeislun
Compton dreifing
Orkuróf atóma

$\boxed{\text{fyrirbæri sem ekki er hægt að lýsa með sígildri eðlisfræði}}$

Fyrstu tilraunir til líkanagerðar bentu til þess að atóm í grúnd hefðu strjált orkuróf

$$E_n \sim h\nu \cdot n$$

með n sem heiltölu

(3)

Orku ljóss virtist tengjast tíðni

$$E = h\nu$$

í andstöðu við sígildu niðurstöðuna

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

$\boxed{\text{Planck setur fram skammta skilyrði 1900}}$

fullbúin Skammtafræði 1926 – 1928

Mismunandi jafngildar framsetningar, sleppum sögunni hér

$\boxed{\text{Vel heppnuð og óhemju hagnýt lýsing eða fræði, notuð vítt og breytt um eðlis-, efna-, verkfræði}}$

(4)

Ekki flóknari eða erfiðari en sígild eðlisfræði

Skammtafræðin er óvenjuleg m.v. sígilda eðlisfræði
Við munum leggja áherslu á að skilja eiginleika skammta kerfa

Skammtafræðin, er ekki stærðfræði, en við þurfum stærðfræði t.þ.a. skilja heppilega lýsingu hennar línulega algebru

Skammtafræði er notuð til þess að skilja og reikna eiginleika fjölda mismunandi kerfa

Hún er mikil að umfangi þess vegna

Við sett byrjum að skoða lýsingu einnar-einda-kerfa, teygjum okkur aðeins í áttina að fjöleinda kerfum

5

"Öll „skólabókadæmin"
sem við glímum við
koma mjög nærri manngerðum
og náttúrulegum kerfum sem
vísindamenn eru að kljást
við um þessar mundir

Í sígildri aflfræði eru notaðar
hreyfijöfnur, eins og t.d.

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l}\sin\theta = 0$$

sem segir til um hreyfingu
einfalds sveifils

Sígild aflfræði hefur
verið rannsökuð með
almennum aðferðum sem
inn bíða

Lagrangian

$$L = T - V$$

eða Hamiltonian

$$H = T + V$$

Hreyfijöfnurnar og ýmsa
eiginleika má leiða út frá
L og H með almennum
aðferðum

6

Skammtafræðin er oft sett
fram með L eða H.

Skammtafræði byggir því
á grunni sígildrar aflfræði
en inn koma ný hugtök
eins og skömmtun, líkindi,
virkjar, víxl, ...

Líkindum fyrir að finna
eind er lýst með bylgjufalli
$\psi(\vec{r},t)$

Tímaþróun bylgjufallsins er
samkvæmt jöfnu Schrödingers

$$\boxed{i\hbar\partial_t \psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t)}$$

Við þekkjum sígilda Hamilton-
virkjann H, en þurfum að útbúa
skammta útgáfu hans, skömmtun
þ.a. niðurstöður verði í sam-
ræmi við tilraunir

7

Líkindin fyrir að finna
eind á bilinu $[a,b]$
eru (í einni vídd)

$$\boxed{\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx}$$

því er $|\psi|^2 \geq 0$

og normanlegt þ.a.

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

Allar stærðir í eðlisfræði má
gefa vídd í M (massa) L (lengd)
og T (tíma)

$$[x] \sim L \ , \quad [a] \sim L$$

$$[\hbar\omega] \sim ML^2T^{-2}$$

$$[H] \sim ML^2T^{-2}$$

og því $[\psi] \sim L^{-1/2}$

(víddargreining)

8

Seinna rekumst við á
bylgjufall

$$\psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{2}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar 2}x^2 - i\frac{3\omega t}{2}}$$

$$\left[\frac{m\omega}{\hbar}\right] \sim \frac{M}{T}\frac{T}{ML^2} \sim L^{-2}$$

því er eðlilegt að skilgreina lengd (náttúrulega lengd)

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = a \longleftarrow \text{fyrir þetta kerfi}$$

$$\rightarrow \psi(x,t) = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}\, a}\right)^{1/2} \left(\frac{x}{a}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2 - i\frac{3\omega t}{2}}$$

allt víddarlaust nema ↑ sem gefur ψ rétta vídd slík skölun er alltaf heppileg fyrir tölulega eða greini reikninga

Skoðum

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}\,a}\left(\frac{x}{a}\right)^2 e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} \qquad (\geq 0)$$

Normum

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{dx}{a}\right)\left\{a|\psi(x,t)|^2\right\}$$

t.d. (GR - 3.461.3)

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} du\; u^2 e^{-u^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\,\frac{\sqrt{\pi}}{2} = 1$$

Meðal gildi (væntigildi) x

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\,|\psi(x,t)|^2 = 0$$

því fallið er oddstætt um $x=0$

líklegast er að finna eindina í $x=0$

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\; x^2\,|\psi(x,t)|^2 = a^2\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{dx}{a}\right)\left(\frac{x}{a}\right)^2\left\{a|\psi(x,t)|^2\right\}$$

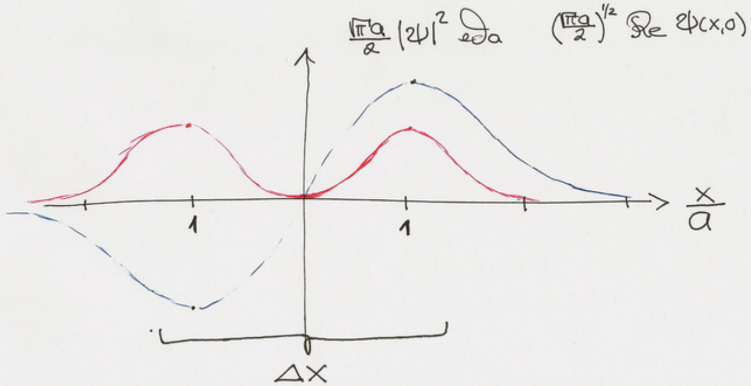
$= a^2 \cdot$ hreinvíddarlaus tala !

og $\langle x^2\rangle$ tengist náttúrulega lengdarskala kerfisins

$$\langle x^2\rangle = a^2\cdot\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} du\; u^4 e^{-u^2} = a^2\cdot\frac{2}{\sqrt{\pi}}\,\frac{3\sqrt{\pi}}{4} = a^2\,\frac{3}{2}$$

Óvissan í staðsetningu eindarinnar er því

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = a\cdot\sqrt{\frac{3}{2}} \sim 1{,}2\cdot a$$



Höfum jöfnu Schrödingers

$$\boxed{i\hbar\,\partial_t\psi(x,t) = H\,\psi(x,t)}$$

Viljum fyrst skoða kerfi með einni eind sem hafa sígilda Hamilton fallið

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

Skammta virkinn verður þá

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V}$$

í einni vídd

Við sjáum betur síðar hvernig og hvers vegna

Skoðum samt aðeins

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

hvernig er væntigildið á x háð tíma?

↑ hlýtur að tengjast straumþunga

2

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\cdot\left\{\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2\right\}$$

x er óháð tíma hér

verðum að nota jöfnu Schrödingers

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\left[x\left\{\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t)\right\}\psi(x,t) + x\psi^*(x,t)\cdot\left\{\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\right\}\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\left[\psi^*(x,t)\left\{H\psi(x,t)\right\} - \left\{H\psi^*(x,t)\right\}\psi(x,t)\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\left[-\psi^*(x,t)\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) + \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\partial_x^2\psi^*(x,t)\right\}\psi(x,t)\right]$$

3

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\; x\,\partial_x\left[\psi^*\{\partial_x\psi\} - \{\partial_x\psi^*\}\psi\right]$$

→ hlutheildun

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\left[\psi^*(\partial_x\psi) - (\partial_x\psi^*)\psi\right] + \underbrace{x\left[\psi^*(\partial_x\psi) - (\partial_x\psi^*)\psi\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0}$$

$$= -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\; \psi^*(x,t)\,\partial_x\psi(x,t)$$

aftur hlutheildun

$\frac{d}{dt}\langle x\rangle$ er meðalhraðinn $\langle v\rangle$

→ meðal skriðþunginn $\langle p\rangle = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dx\left(\psi^*\partial_x\psi\right)$

4

Við höfum því

$$\boxed{\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int \psi^*\, x\cdot\psi\; dx\\ \langle p\rangle &= \int \psi^*\,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi\; dx\end{aligned}}$$

í staðarrúminu (x,t)

x : staðsetningarvirkinn

$p = -i\hbar\partial_x$: skriðþungavirkinn

og þessvegna var skömmtunin

$$H = \frac{p^2}{2m} + V \longrightarrow -\frac{\hbar^2\partial^2}{m\partial x^2} + V$$

5

því lítur út fyrir að skömmtun felist í því að

$$\boxed{\langle Q(x,p)\rangle = \int dx\; \psi^*\, Q\left(x, -i\hbar\partial_x\right)\psi}$$

Við gerum þetta betur síðar og athugum viðbótar-skilyrði

Staðsetning og skriðþungi
eru reiknuð alveg sem
væntigildi eða meðaltöl
→ óvissa í staðsetningu og skriðþ.

(6)

Óvissa

Skoðum aftur bylgjufallið

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}a}\right)^{1/2} \left(\frac{x}{a}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

$$p\psi(x) = -i\hbar\partial_x\psi(x) = -i\hbar\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}a}\right)^{1/2}\left\{\frac{1}{a} - \frac{1}{a}\left(\frac{x}{a}\right)\left(\frac{x}{a}\right)\right\} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

$$= +\frac{i\hbar}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}a}\right)^{1/2}\left\{\left(\frac{x}{a}\right)^2 - 1\right\} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

og

$$p^2\psi(x) = -\hbar^2\partial_x^2\psi = +\frac{\hbar^2}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}a}\right)^{1/2}\left[2\frac{x}{a^2} + \left\{\left(\frac{x}{a}\right)^2 - 1\right\}\left(-\frac{x}{a^2}\right)\right] \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

(7)

$$\rightarrow p^2\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{a^2}\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}a}\right)^{1/2}\left\{\left(\frac{x}{a}\right)^3 - 3\left(\frac{x}{a}\right)\right\} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

Reiknum því

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* p\, \psi = \frac{i\hbar}{a}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} du\,\{u^3 - u\} e^{-u^2} = 0$$

oddstætt fall

$$\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* p^2 \psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{a^2}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} du\,\{u^4 - 3u^2\} e^{-u^2} = -\frac{\hbar^2}{a^2}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{3}{4}\sqrt{\pi} - \frac{3}{2}\sqrt{\pi}\right]$$

(8)

$$\rightarrow \langle p^2\rangle = +\frac{\hbar^2}{a^2}\frac{3}{2}$$

og því fæst að

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \sqrt{\frac{3}{2}}\frac{\hbar}{a}$$

og

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = \left\{a\sqrt{\frac{3}{2}}\right\}\left\{\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{3}{2}}\right\} = \hbar\frac{3}{2}}$$

Síðar sjáum við óvissulögmál Heisenbergs

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

sem við greinilega uppfyllum hér

(9)

Við eigum eftir að kanna eiginleika jöfnu Schrödingers betur

skoða afleiðingar hennar

Bæta við staðreyndum um mælingar og mælistærðir

Koma skammtafræðinni á meira almenna form

Munum notast við línulega virkja á fallarúm, Hilbert rúm (með vídd ∞)

Jafna Schrödingers birtist í ýmsum myndum
í staðarrúminu $(\bar{x},t)$, í skriðþungarúminu $(\bar{k},\omega)$
Eins getur hún verið í fallarúmi

línuleg afleiðujafna, heildisjafna, afleiðuheildisjafna
línulegar jöfnur . . . . .

Jafna Schrödingers

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$$

Athugum lausnir fyrir

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

þar sem V er ekki háð tíma og við notum

$$p \to -i\hbar\partial_x$$

Síðar sjáum við að þessar lausnir má nota á mism. hátt t.þ.a. fá lausnir fyrir tímaháð H

Uppbygging jöfnunar bendir til þess að við getum reynt lausn með aðskilnaði breyti-stærða: reynum

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$$

Fyrir ~~þessa~~ lausn fæst

$$i\hbar\,\psi(x)\big(d_t\varphi(t)\big) = -\frac{\hbar^2}{2m}\big(d_x^2\psi(x)\big)\varphi(t) + V(x)\psi(x)\varphi(t)$$

Deilum með $\psi\varphi$

$$i\hbar\,\frac{d_t\varphi(t)}{\varphi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d_x^2\psi(x)}{\psi(x)} + V(x)$$

Einungis háð t

Aðeins háð x

En verður að vera jafnt fyrir öll gildi á x og t
Aðeins hægt ef báðar hliðar eru sami fastinn, E

Þá fæst

$$i\hbar\,\frac{d_t\varphi}{\varphi} = E \;\to\; \boxed{d_t\varphi = -\frac{iE}{\hbar}\varphi}$$

og

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d_x^2\psi}{\psi} + V = E \;\to\; \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}d_x^2\psi + V\psi = E\psi}$$

Hlutafleiðujafnan er orðin að tveimur afleiðujöfnum

Sú fyrri hefur lausnina

$$\varphi(t) = \exp\left\{-i\frac{Et}{\hbar}\right\}$$

með stuðli sem við förum inn í ψ

Sú seinni er eigingildisjafna kölluð tím-óháða jafna Schrödingers, sem við þurfum að kanna betur

Við munum komast að því eigingildin E eru orka kerfisins, þau geta verið strjál eða samfelld, þ.e. lausnir finnast stundum aðeins fyrir strjál gildi, $E_1, E_2, \ldots\ldots$ endanlega mörg eða óendanlega mörg. Stundum eru eigingildin samfelld á endanlegu bili og stundum á óendanlegu bili

Eigingildi $\to$ orkuróf kerfisins

Skoðum betur

Sístæð ástönd

Lausnin fyrir visst gildi E er háð tíma

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

en líkindaþéttleikinn

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi$$

$$= \psi^*\psi \exp\{-i\tfrac{t}{\hbar}(E-E)\} = |\psi(x)|^2$$

er óháður tíma

Í þannig ástandi er væntigildi tímaóháðra virkja óháð tíma

$$\langle Q(x,p)\rangle = \int dx\, \psi\, Q\, \psi$$

fasaþátturinn $\varphi(t)$ styttist aftur út hér

Eiginástönd H með orku E

Tíma óháða jafna Schrödingers er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2\psi + V\psi = E\psi$$

eða

$$\left\{-\frac{\hbar}{2m} d_x^2 + V\right\}\psi = E\psi$$

eða

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

Eigingildi H er E

Væntigildi H:

$$\langle H\rangle = \int \psi^* H \psi\, dx = E\int dx\, |\psi|^2$$

$$= E$$

fáum því líka

$$\langle H^2\rangle = E^2$$

$$\to \Delta H = \sqrt{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2} = 0$$

> Sístæðu lausnirnar $\psi(x)$ eru bylgjuföll ástanda með fasta ákveðna orku

~~Hvernig er það mögulegt?~~

Seinna kynnumst við óvissulögmáli

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

> Sístætt ástand breytist ekki í tíma: $\Delta t \to \infty$
> og $\Delta E \to 0$

Liðun

Almenna lausn jöfnu Schrödingers

$$i\hbar\partial_t \Psi(x,t) = H\Psi(x,t)$$

er samantekt allra sístæðu lausnanna

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)\, e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}}$$

Hér gerum við ráð fyrir óendanlegu strjálu orkurófi $E_1 \ldots\ldots$ með eiginlausnum $\psi_1 \ldots\ldots$ Þetta verður að skrifa með heildi fyrir samfellt róf.

8

Jaðarskilyrði og tímaóháða Schrödinger jafnan ákvarða $\psi_n(x)$ og E_n

Upphafsskilyrði (t.d. við $t=0$) ákvarða líkunarstuðlana C_n

Takið sérstaklega eftir því að

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(x)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

gefur líkindaþéttleika $|\Psi(x,t)|^2$ sem er háður tíma ef minnst tvö C_n eru ekki jöfn 0

Eind í almennu ástandi $\Psi(x,t)$ er þá heldur ekki með fasta skarpa orku eða væntigildi virkja Q

sjáum síðar

Væntigildi H er fast

9

Þurfum að kynnast betur lausnum jöfnunar

Byrjum á tveimur sértilvikum:

Óendanlegum mættis brunni

og

Hreintónasveiflu

Bæði dæmin sýna sameiginlega eiginleika sem við munum finna fyrir önnur tilvik

Bæði dæmin eru góð nálgun fyrir kerfi sem finnast í náttúrunni og í manngerðum kerfum

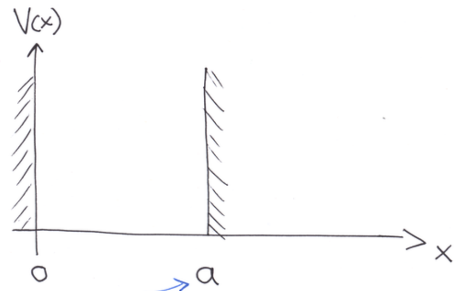
skammta brunnur í hálfleiðara

þversnið af skammtavír

10

Óendanlegur brunnur

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{ef } 0\le x<a\\ \infty & \text{annars}\end{cases}$$



eini náttúrulegi lengdarkvarðinn sem mun finnast hér

Jaðarskilyrði

Utan brunns gildir $\psi(x)=0$

Innan brunns gildir

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

með jaðarskilyrði $\psi(0)=0$, $\psi(a)=0$

til þess að tryggja samfellu

Óendanlega mættis þrepið í $x=0$ og a kemur í veg fyrir samfellu ψ'

skoðum síðar

11

Umritum jöfnuna innan brunnsins

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

$$\psi''(x)+k^2\psi(x)=0$$

sama jafnan og fyrir hreintóna sígildan sveifil.

Reynum lausn

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

$\cos(0)=1 \;\to\; B=0$

$$\psi(x)=A\sin(kx)$$

Jaðarskilyrði

$\sin(k\cdot 0)=0$

$\sin(ka)=0$

leysist sjálfkrafa

en hér fæst $ka=0$

eða líka $\pm\pi$, $\pm 2\pi$

Þ.a. öll k-gildi sem uppfylla jaðarskilyrðið eru

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 0, \pm1, \pm2, \pm3$$

$k_n = 0$ gefur ekki normanlegt fall

neikvæðu gildin gefa ekki nýtt bylgjufall því

$$\sin(-\theta) = -\sin\theta$$

og "−" getur farið inn í A

einkvæmar normanlegar lausnir fást því fyrir

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{N}$$

$$k_n = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}$$

eða

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$$

er orkuróf eindarinnar

strjált $\quad E_n \sim n^2$

Óendanlegur mættisbrunnur

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ef } 0 \le x \le a \\ \infty & \text{annars} \end{cases}$$

Höfum fundið lausnir

$$\psi_n(x) = A_n \sin(k_n x)$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{N}$$

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

Þurfum að norma lausnirnar

$$|A_n|^2 \int_0^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$= |A_n|^2 a \int_0^a \frac{dx}{a} \sin^2\left(n\pi \frac{x}{a}\right)$$

$$= |A_n|^2 a \int_0^1 du \sin^2(n\pi u)$$

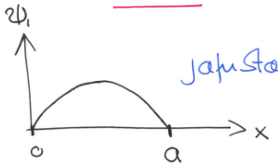
$$= |A_n|^2 \frac{a}{2} = 1$$

$$\to \quad A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

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

Grunnástand

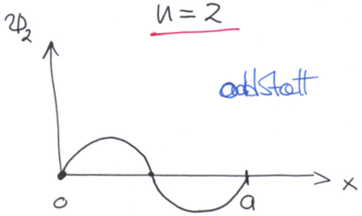
$n = 1$



jafnstætt

1. örvaða ástandið

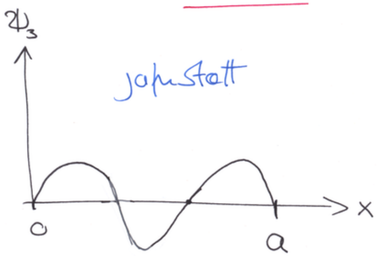
$n = 2$



oddstætt

2. örvaða ástandið

$n = 3$



jafnstætt

Örvuð ástönd fleiri núllstöðvar

Hærri orka → fleiri núllstöðvar og meiri sveigja

$H\psi = E\psi$

Eiginföllin lýsa sístæðum ástöndum

Eind í eiginástandi verður þar þangað til hún verður fyrir truflun

Eiginástöndin eru hornrétt (bylgjuföllin)

(sjá bók)

$$\int_0^a \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = \delta_{m,n}$$

Kronecker-delta

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 0 & \text{ef } m \ne n \\ 1 & \text{ef } m = n \end{cases}$$

Eiginföllin mynda fullkominn grunn

"Öll þjál föll með sömu jaðarst. á sama bili má liða í þeim

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

Skoðum betur síðar

4

þ.a.

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

$$\sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 = 1$$

fyrir almennu lausnina fáum við

$$\langle H \rangle = \int dx\, \Psi^* H \Psi$$

$$= \int dx \left\{ \sum_m C_m \psi_m \right\}^* H \left\{ \sum_n C_n \psi_n \right\}$$

$$= \sum_{nm} C_m^* C_n E_n \int dx\, \psi_m^* \psi_n$$

$$= \sum_n |C_n|^2 E_n$$

Meðalgildi orkunnar er fast

Sömu a batum við við að líkindin fyrir að mæling á orkunni í $\Psi(x,t)$ gefi E_n eru föst, $|C_n|^2$ óháð tíma

5

Hreintóna sveifillinn

Könnumst við sígilda kerfið lýst með lögmáli Hookes

$$\boxed{F = -kx = m d_t^2 x}$$

Sígilda hreyfijafnan með lausn

$$x(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t)$$

þ.s. $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

Mættis orkan er

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

munum mættiorkuna sem

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

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

Mjög oft er þetta mætti góð nálgun fyrir ýmis mætti nærri staðbundnu lágmarki

6

Jafna Schrödingers fyrir hreintóna sveifilinn

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\} \psi = E\psi$$

Lausnirnar eru mjög mikilvægar því svipuð mætti koma oft fyrir

Margar mismunandi lausnaraðferðir

Við munum kanna algebru lausn

og beina lausn afleiðujöfnunar

tengist síðari aðferða fræði til þess að lýsa fjöleinda kerfum

7

Algebru aðferð

sístæðu ástöndum hreintóna sveifilsins er lýst með

$$H\psi = E\psi$$

þ.s.

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

$$= \frac{1}{2m}\left(p^2 + (m\omega x)^2\right)$$

Reynum að þátta með

$$a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left\{ \mp ip + m\omega x \right\}$$

og munum að x og p eru virkjar hér

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} (ip + m\omega x)(-ip + m\omega x)$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega} \left\{ p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px) \right\}$$

$$xp - px \equiv [x, p]$$ víxl x og p

víxlin þurfa ekki að hverfa, ef ekki þá víxlast x og p ekki, virkjar

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} \left[p^2 + (m\omega x)^2 \right] - \frac{i}{2\hbar}[x, p]$$

8

athugum víxlin
virkjar verka á föll
í fallarúmi

$$[x,p]f = x(pf) - p(xf)$$

munum að $p = -i\hbar\partial_x$ hér

$$\to x(pf) - p(xf)$$
$$= x(pf) - x(pf)$$
$$-(px)f$$
$$= -(-i\hbar\partial_x x)f$$
$$= i\hbar f$$

óháð ástandi f
því er venjulega skrifað

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

þessi víxl verða síðar krafa okkar um skömmtun (kórskömmtun) lýsingar kerfa

víxlin

$$a_-a_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\left\{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right\} + \frac{1}{2}$$
$$= \frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2}$$
$$\to H = \hbar\omega\left\{a_-a_+ - \frac{1}{2}\right\}$$

9

Enn er ekki ljóst hvers vegna þessi þáttun hjálpi við lausn jöfnu Schrödingers

Nú er mikilvægt að sjá að

$$\underbrace{a_+a_-}_{\text{önnur röð}} = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}$$

$$\to H = \hbar\omega\left\{a_+a_- + \frac{1}{2}\right\}$$

og

$$[a_-, a_+] = 1$$

Virkjarnir a_+ og a_- víxlast ekki heldur

Gerum ráð fyrir að ψ sé lausn með orku E

skoðum þá hvað $(a_+\psi)$ er

$$H(a_+\psi) = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)(a_+\psi)$$
$$= \hbar\omega\left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+\right)\psi$$
$$= \hbar\omega a_+\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\right)\psi$$
$$= a_+\left\{\hbar\omega\left(\underbrace{a_+a_- + 1}_{= a_-a_+} + \frac{1}{2}\right)\psi\right\}$$

10

$$a_+(H+\hbar\omega)\psi = a_+\overbrace{(E+\hbar\omega)}^{\text{hreinar tölur}}\psi = (E+\hbar\omega)(a_+\psi)$$

$\to (a_+\psi)$ er lausn á Schrödinger jöfnunni með orku $E+\hbar\omega$

Eins má sýna að $(a_-\psi)$ er lausn á jöfnunni með orku $E-\hbar\omega$

$$H(a_-\psi) = (E-\hbar\omega)(a_-\psi)$$

Ef við þekkjum lausn ψ þá getum við fundið fleiri með hækkunarvirkjanum a_+ eða lækkunarvirkjanum a_-

Stundum nefndir sköpunar og eyðingarvirkjar
skapa eða eyða orku skammti

11

Við búumst ekki við óendanlega lágum orku gildum í þessu mætti

Til hlýtur að vera lægsta stigið, grunn-ástandið þ.a.

$$a_-\psi_0 = 0$$

Einmitt jafnan til þess að ákvarða það
því

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left\{\hbar d_x + m\omega x\right\}\psi_0 = 0$$

fyrsta stigs afl. j.

$$\to d_x\psi_0 = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

heildum

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\,dx$$

$$\to \ln(\psi_0) = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + C$$

$$\to \psi_0(x) = Ae^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

(12)

Normum

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi_0|^2 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} = a|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{a}\, e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2}$$

$$= a|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} du\, e^{-u^2} = a|A|^2 \sqrt{\pi} = 1$$

$$\to |A|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \quad \text{eða} \quad A = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$$

Orka ψ_0

$$H\psi_0 = E_0\psi$$

$$\hbar\omega\left\{a_+a_- + \tfrac{1}{2}\right\}\psi_0 = E_0\psi$$

$$a_-\psi_0 = 0 \longrightarrow E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega$$

(13)

Orkurófið verður því

$$E_n = \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

og ástöndin hafa bylgjuföllin

$$\psi_n(x) = A_n (a_+)^n \psi_0(x)$$

(1)

Hreintónasveifill

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

leysum tímaóháðu jöfnu Schrödingers

$$H\psi = E\psi$$

eða

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}d_x^2 + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right\}\psi = E\psi$$

Sem afleiðujöfnu

skölum jöfnuna með náttúrulegu lengd hreintóna sveifils

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

þ.a. $y = \left(\frac{x}{a}\right)$

þá verður jafnan

$$\boxed{d_y^2\psi = (y^2-K)\psi}$$

ef $K = \frac{2E}{\hbar\omega}$

Orkan skölluð í náttúrulega orkuskala hreintónasveifils

(2)

Þetta er eigingildisjafna

→ aðeins til staðlanlegar lausnir fyrir viss gildi á K

Skoðum aðfellulausn

þegar $y \to \infty$ er jafnan

$$d_y^2\psi \approx y^2\psi$$

með nálgunarlausnir

$$\psi(y) \approx Ae^{-\frac{y^2}{2}} + Be^{+\frac{y^2}{2}}$$

$B = 0$ til þess að lausnin verði normanleg

þá er líklegt að lausnin sé á forminu

$$\psi(y) = h(y)e^{-y^2/2}$$

með

$$d_y\psi = \{d_y h - yh\}e^{-y^2/2}$$

$$d_y^2\psi = \{d_y^2 h - 2y d_y h + (y^2-1)h\}e^{-\frac{y^2}{2}}$$

því verður Schrödinger jafnan

$$\boxed{d_y^2 h - 2y d_y h + (K-1)h = 0} \quad (*)$$

Reynum röðalausn (til að byrja með)

$$h(y) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j y^j = a_0 + a_1 y + a_2 y^2 + \cdots$$

$$d_y h(y) = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j y^{j-1} = a_1 + 2a_2 y + 3a_3 y^2 + \cdots$$

$$d_y^2 h(y) = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2) a_{j+2} y^j = 2a_2 + 2\cdot 3 a_3 y + 3\cdot 4 a_4 y^2 + \cdots$$

Í (*) verður þetta

$$\boxed{\sum_{j=0}^{\infty} \left\{ (j+1)(j+2) a_{j+2} - 2j a_j + (K-1) a_j \right\} y^j = 0}$$

stuðlarnir við hvert veldi á y verða að hverfa

$$\to (j+1)(j+2) a_{j+2} - 2j a_j + (K-1) a_j = 0$$

eða ítrunarsambandið

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1-K)}{(j+1)(j+2)} a_j$$

Ef a_0 er gefið $\longrightarrow a_2, a_4, \ldots a_{2n}$

a_1 –||– $\longrightarrow a_3, a_5, \ldots$

velja, því við leitum eftir að staðla lausnina

því er lausnin $h(y) = h_{even}(y) + h_{odd}(y)$

með

$$h_{even}(y) = a_0 + a_2 y^2 + a_4 y^2 + \cdots$$

$$h_{odd}(y) = a_1 y + a_3 y^3 + \cdots$$

En, smá varúð

þegar $j \to \infty$ fæst $a_{j+2} \simeq \frac{2j}{j^2} a_j = \frac{2}{j} a_j$

Berum saman við

$$e^{y^2} \simeq 1 + x^2 + \frac{x^4}{2} + \frac{x^6}{6} + \frac{x^8}{24} \cdots$$

með $a_{j+2} = \frac{2}{j} a_j$

þ.a. í ψ væru þá liðir með $e^{-\frac{y^2}{2}} e^{y^2} \to \infty$ þ. $y \to \infty$

ψ væri þá ekki staðlanlegt!

Aðeins ein lausn til

$\boxed{\text{Ítrunin verður að enda í } j=n \text{ þ.a. } a_{n+2} = 0}$

↳ önnur röðin endar, hin verður að vera 0 frá byrjun með a_1 eða $a_0 = 0$

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)} a_j$$

$K = 2n+1$ stöðvar ítrunina

En $K = \frac{2E}{\hbar\omega}$

$$\boxed{E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \ldots}$$

Eina staðlanlegu lausnirnar fást fyrir þessi gildi á orkunni

↓

Eigin ástönd með strjála orku

7

Eigin lausnirnar eru

$$\boxed{\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\, a}}\, H_n\!\left(\frac{x}{a}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2} \qquad \text{með} \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$$

og fleirliður Hermite $[\nu]$ er stærsta heila tala $\leq \nu$

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{[\frac{n}{2}]} \frac{(-1)^k n!}{k!\,(n-2k)!} (2x)^{n-2k}$$

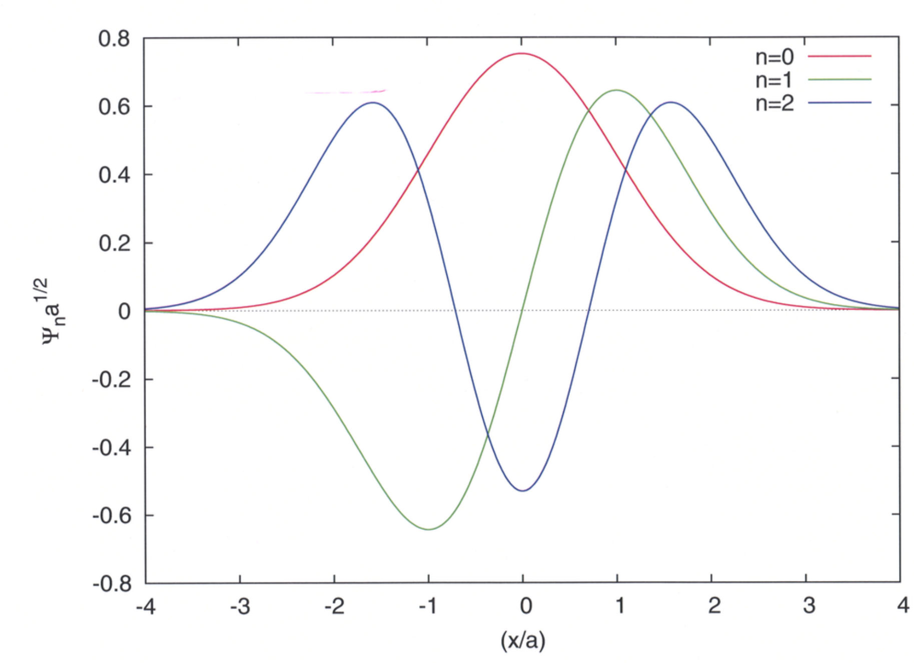
$$H_0(x) = 1 \qquad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n}$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2 \qquad e^{2xt - t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n, \quad |t| < \infty$$

$\vdots$

8



9

Frjáls eind

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad \text{fyrir frjálsa eind}$$

$\rightarrow$ $H\psi = E\psi$ verður

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 \psi = E\psi$$

Hér er heppilegt að stala til jöfnuna

$$d_x^2 \psi = -k^2 \psi, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$$

bundið við $E \geq 0$ fyrir frjálsa eind

Almenna lausnin er

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

Engin jaðarskilyrði takmarka k

Orkan er því

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

10

tímaháða bylgjufallið er því

$$\Psi(x,t) = A \exp\left\{ik\left(\underbrace{x - \frac{\hbar k}{2m}t}\right)\right\} + B\exp\left\{-ik\left(\underbrace{x + \frac{\hbar k}{2m}t}\right)\right\}$$

því tímalausnin er

$$\varphi(t) = \exp\left\{-i\frac{E}{\hbar}t\right\} = \exp\left\{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right\}$$

$x - vt$

$x + vt$

fastur punktur á bylgjunni uppfyllir

$$x \pm vt = \text{fasti}$$

$$x = \mp vt + \text{fasti}$$

bylgja ferðast til vinstri $\longleftarrow$

bylgja ferðast til hægri $\longrightarrow$

Því er hægast að setja

$$\Psi_k(x,t) = A\exp\left\{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right\}$$

og

$$k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \begin{cases} k>0 \longrightarrow \text{til hægri} \\ k<0 \longleftarrow \text{til vinstri}\end{cases}$$

Bylgjulengd $\lambda = \frac{2\pi}{|k|}$ k er bylgjutala „bylgjuvigur"

Skriðþunginn $p = \hbar k$

eigingildi skriðþungavirkjans $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$

$$\hat{p}\Psi_k(x,t) = p\Psi_k(x,t) = \hbar k\Psi_k(x,t)$$

En, eitthvað er einkennilegt við „hraða"

$$v_{quantum} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \frac{\hbar}{2m}\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

fyrir sígilda eind gildir $E = \frac{1}{2}mv^2$ ef $V=0$

$$v_{classical} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

$$\longrightarrow \quad v_{classical} = 2v_{quantum} \quad ! \quad ?$$

Frjálseind

Höfum fundið bylgjufallið

$$\Psi_k(x,t) = A\exp\left\{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right\}$$

$$k\in\mathbb{R}$$

bylgjufallið er ekki staðlanlegt

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\Psi_k^*\Psi_k = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty}dx = |A|^2\cdot\infty$$

Ástöndin sem lýst er með Ψ_k virðast ekki vera eðlisfræðileg, en þau má nota sem fallagrunn

Liðum þau saman til þess að finna bylgjupakka

Eru þá til frjálsástönd með fasta orku?

bylgjupakki: $$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\,\phi(k)\exp\left\{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right\}$$

Stuðull tekinn út fyrir heildi til þæginda

samfellt ástönd Ψ_k því er heildað yfir k í stað þess að summa yfir strjálar skammtatölur

Í stað tíðnar-stuðla kemur tíðnarfall. Bylgjupakkinn er settur saman úr bylgjum með mismunandi hraða og skriðþunga

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

Ef við þekkjum bylgjupakkann í upphafi

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

þá getum við ákvarðað $\phi(k)$ og þess vegna $\Psi(x,t)$ með notkun á Fourier greiningu

$$\boxed{f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, F(k) e^{ikx} \iff F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x) e^{-ikx}}$$

Andhverf Fourier ummyndun — Fourier ummyndun

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

Hraði frjálsrar eindar

Athugum bylgjupakka

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

tvístur sam bandið $\omega(k)$ skiptir ekki máli, en er $\hbar\omega(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ fyrir frjálsa eind

Við veljum þröngan pakka (auðvitað alls konar pakkar til)

$\phi(k) \simeq 0$, nema þegar $k \simeq k_0$ (þannig pakki tvístrast hægar því þættir hans hafa svipaðan hraða)

$$\omega(k) \simeq \omega_0 + d_k\omega(k)\Big|_{k=k_0}\cdot(k-k_0), \quad \omega_0 = \omega(k_0)$$

$$= \omega_0 + \omega_0'(k-k_0)$$

Skiptum um breytu $k - k_0 \to s$

$$\Psi(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} ds\, \phi(k_0+s)\exp\left\{i\left((k_0+s)x - (\omega_0+\omega_0' s)t\right)\right\}$$

og þ. $t=0$

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} ds\, \phi(k_0+s) e^{i(k_0+s)x}$$

og síðar

$$\Psi(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 t + k_0\omega_0' t)}\int_{-\infty}^{\infty} ds\, \phi(k_0+s) e^{i(k_0+s)(x-\omega_0' t)}$$

$$\simeq e^{-i(\omega_0 - k_0\omega_0')t}\,\Psi(x-\omega_0' t, 0)$$

pakki sem færist um með ω_0'

$v_{group}(k) = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0}$ saman borið við $v_{phase} = \frac{\omega}{k}$

grúpuhraði — fasahraði

Frjáls eind $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \to v_{phase} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$

en $\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$

$$\to v_{classical} = v_{group} = 2v_{phase}$$

Dirac-Delta-brunnur

Könnum eiginleika brunns lýst með Dirac delta fallinu

dreifing (distribution)

$$V(x) = -\alpha\,\delta(x)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) = 1$$

Hnitadreifing punkteindar er lýst með $\delta(x)$

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

eins mun við sjá að

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

Fourier ummyndun af $\delta(x)$ er fastinn $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ í k-rúminu

til þess að búa til nákvæma staðsetningu í x-rúminu þarf alla bylgjuvigra k eða skriðþunga $\hbar k$ í skriðþunga rúminu

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

delta brunnur

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) = 1$$

því er víddin á δ

$$[\delta] = \frac{1}{L}$$

$\alpha\delta(x)$ hefur vídd orka

$\rightarrow$ α hefur vídd orka$\cdot L$

$$[\alpha] = \frac{ML^2}{T^2}\cdot L = \frac{ML^3}{T^2}$$

Leysum

$$H\psi = E\psi$$

eða

$$-\frac{\hbar^2}{2m}d_x^2\psi - \alpha\,\delta(x)\psi = E\psi$$

Fyrsta dæmið sem við stöndum þar sem búast má við samfelldu rófi dreifiástanda (scattering) og mögulega einhverjum bundnum ástöndum með strjála orku

væntanlega með $E<0$ ... með $E>0$

Athugum fyrst hvort til sé bundið ástand með $E<0$

$x<0$ (I)

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

með

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

$$\kappa \in \mathbb{R},\quad \kappa > 0$$

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

$A = 0$ því annars fæst

$$\psi(x) \xrightarrow[x\to-\infty]{} \infty$$

$$\psi(x) = Be^{\kappa x} \qquad \text{(I)}$$

Athugum (II) þ.e. $x>0$

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}$$

nú þarf $G = 0$

$$\rightarrow \psi(x) = Fe^{-\kappa x} \qquad \text{(II)}$$

þessar lausnir verður að sníða saman, skeyta saman, í $x = 0$

En þar þurfum við að passa sérstaklega upp á δ-fallið

Ef mættið er þjált eða hefur endanleg stökk eða brot krefjumst við venjulega að

ψ og $d_x\psi$

séu samfelld

Við höfum enn ekki tekið tillit til δ-fallsins hér

Athugum

Heildum jöfnu Schrödingers frá $-\epsilon$ upp í ϵ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, d_x^2\psi(x) + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, V(x)\psi(x) = \underbrace{E\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \psi(x)}$$

$\psi(x)$ er samfellt og heildið $\rightarrow 0$ þegar $\epsilon \rightarrow 0$

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left\{ d_x\psi(x)\Big|_{+\epsilon} - d_x\psi\Big|_{-\epsilon}\right\} = \frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, V(x)\psi(x)$$

(11)

$$\underbrace{\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)}_{} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\lim_{\epsilon \to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \delta(x)\psi(x) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

δ-mættið veldur broti í afleiðunni

$$\psi'(+\epsilon) = -FKe^{-K\epsilon} \to -FK$$

$$\psi'(-\epsilon) = BKe^{-K\epsilon} \to BK$$

ψ er samfellt í $x = 0$

$\to B = F$

$$\to -BK - BK = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}B$$

$$\to 2K = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \to K = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

(12)

$$K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \qquad K = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

$$\to E = -\frac{\hbar^2K^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

Eitt bundið ástand

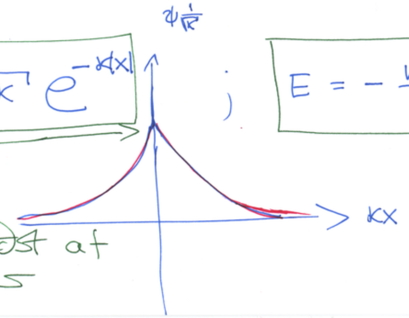
Stöðlum bylgjufallið

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = 2|B|^2\int_0^{\infty} e^{-2Kx}dx = \frac{|B|^2}{K} = 1$$

$B = \sqrt{K}$

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{K}e^{-K|x|}} \; ; \; \boxed{E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}} \; , \; K = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

náttúrulegur lengdarskali K^{-1}



Stærð brotsins ákveðst af styrk δ-mættisins

(1)

δ-brunnur

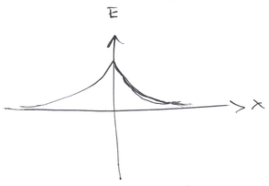
Höfum fundið eitt bundið ástand í δ-brunni

$$V(x) = -\alpha\delta(x)$$

$$\psi(x) = \sqrt{K}e^{-K|x|}$$

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

$$K = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$



Hvað með dreifilausnir?

þegar $E > 0$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 - \alpha\delta(x)\right\}\psi = E\psi$$

á svæði (I) þegar $x < 0$

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

með $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0, \; k \in \mathbb{R}$

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

Tökum báðar stefnur bylgjunnar til greina

(2)

á svæði (II) $x > 0$

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

samfella í $x = 0$

$$\psi^{I}(0) = \psi^{II}(0)$$

$$\to \boxed{A + B = F + G}$$

Fyrir afleiðurnar fæst

$$d_x\psi^{I}(0^-) = ik(A - B)$$

$$d_x\psi^{II}(0^+) = ik(F - G)$$

Áður höfðum við leitt út

$$\underbrace{d_x\psi(0^+) - d_x\psi(0^-)}_{} = \underbrace{-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)}_{}$$

eða hér

$$\boxed{ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B)}$$

2 jöfnur og 4 óþekktir stuðlar

Normun ekki möguleg

Hverju lýsir $\psi = \underbrace{Ae^{ikx}}_{} + \underbrace{Be^{-ikx}}_{}$

flöt bylgja frá vinstri

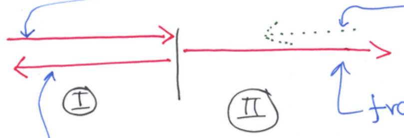
flöt bylgja frá hægri

3

Setjum þetta upp sem dreifingu (scattering) með jaðarskilyrðum

engin bylgja inn frá hægri $G=0$

Bylgja inn frá vinstri



framferðar bylgja

endurkast frá árekstrarmætti

Við megum velja $A = 1$ ← ákveður magn straums inn

(eða höldum A t.þ.a. minna okkur á innstrauminn)

4

$$1 + B = F$$

$$ik(F - 1 + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(1+B)$$

$$F - B = 1$$

$$ikF + B\left(ik + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\right) = \left(ik - \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\right)$$

umritum þá seinni sem

$$F + B(1-2i\beta) = (1+2i\beta)$$

þ.s. $\beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$

$$\boxed{\begin{aligned} F - B &= 1 \\ F + B(1-2i\beta) &= (1+2i\beta)\end{aligned}}$$

Sama fyrir stærri verkefni er gott að sjá þetta sem

$$\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & (1-2i\beta)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}F\\ B\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\ (1+2i\beta)\end{pmatrix}$$

Lausnin er

$$F = \frac{1}{1-i\beta}, \quad B = \frac{i\beta}{1-i\beta}$$

Sitthvoru megin δ-mættisins er mættið jafnhátt $V=0$

Speglunarlíkur (endurkast)

$$\boxed{R = \frac{|B|^2}{\underbrace{1}_{\text{innflæði}}} = \frac{\beta^2}{1+\beta^2}}$$

5

Framferðarlíkur

$$T = \frac{|F|^2}{1} = \frac{1}{1+\beta^2}$$

$$\beta^2 = \left(\frac{m\alpha}{\hbar k}\right)^2, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

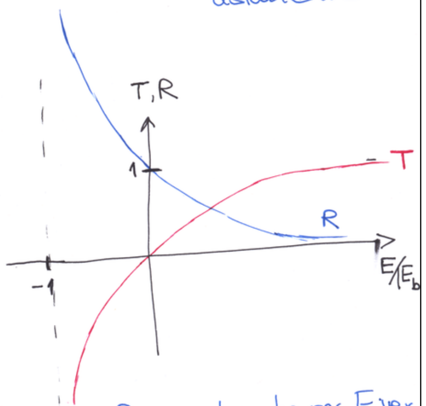
$$E_b = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$ Orka bundna ástandsins

Líkindin varðveitast

$$R+T = \frac{\beta^2}{1+\beta^2} + \frac{1}{1+\beta^2} = 1$$

$$R = \frac{1}{1+\frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}} = \frac{1}{1+\frac{E}{|E_b|}}$$

$$T = \frac{1}{1+\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}} = \frac{1}{1+\frac{|E_b|}{E}}$$



R minnkar þegar E vex

T vex -||-

En við leyfum aðeins $E > 0$ → skaut í $E = -|E_b|$

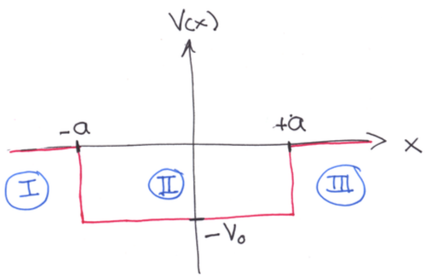
Fáguð framlenging, tenging við dreififylki

6

Endanlegur brunnur

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{þ. } -a \le x \le a \\ 0 & \text{þ. } |x| > a\end{cases}$$

leitum fyrst að bundnum ástöndum með $E<0$



Skiptum upp í þrjá hluta

(I): $-\frac{\hbar^2}{2m}d_x^2\psi = E\psi$

$$d_x^2\psi = \kappa^2\psi$$

með $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$

tvær lausnir, sú sem dofnar og vex ekki fjarri brunninum er

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

í (III) er lausnin þá

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x} \quad x>a$$

(7)

þar á milli í (II) er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 \psi - V_0 \psi = E\psi$$

eða

$$d_x^2 \psi = -\ell^2 \psi$$

með

$$\ell = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

því $E + V_0 > 0$

Lausnin er

$$\psi(x) = C\sin(\ell x) + D\cos(\ell x)$$

þ. $-a < x < a$

Brunnurinn er samhverfur

Lausnirnar eru annaðhvort jafn- eða oddstæðar

$$\psi(-x) = \pm\psi(x)$$

Þá nægir að tryggja að ψ og ψ' séu samfelld öðru megin

jafnstæðu lausnirnar eru $\sim \cos(\ell x)$

oddstæðu eru $\sim \sin(\ell x)$

(8)

Skoðum jafnstæðu lausnirnar (t.d. grunnástandið er jafnst.)

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x} & x>a \\ D\cos(\ell x) & 0<x<a \\ \psi(-x) & x<0\end{cases}$$

Samfella ψ í $x=a$

① $Fe^{-\kappa a} = D\cos(\ell a)$

Samfella ψ' í $x=a$

② $-\kappa F e^{-\kappa a} = -\ell D\sin(\ell a)$

Saman gefa þær (①/②)

$$\kappa = \ell\tan(\ell a)$$

Munum að $\kappa = \kappa(E)$ og $\ell = \ell(E)$ þ.a. við höfum hér óbeina jöfnu fyrir E

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \ell^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$$

$$\to \kappa^2+\ell^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \left(= z_0^2/a^2\right)$$

Veljum $z \equiv \ell a$, $z_0 \equiv \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$

(9)

þ.a.

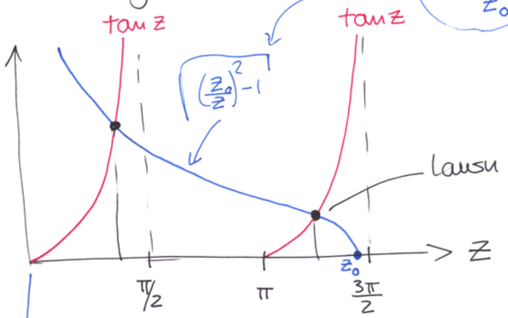
$$\tan(\ell a) = \frac{\kappa}{\ell}$$

$$(\tan(z))^2 = \frac{\kappa^2}{\ell^2} = \frac{\left(\frac{z_0}{a}\right)^2 - \ell^2}{\ell^2} = \frac{z_0^2 - (\ell a)^2}{(\ell a)^2} = \left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1$$

$$\to \boxed{\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}}$$

Óbein jafna t.d. má skoða lausnir grafískt

t.d. fer eftir z_0



$$z_0^2 = \frac{a^2\, 2mV_0}{\hbar^2}$$ þ.a. fjöldi lausna

→ fjöldi bundinna ástanda fer eftir dýpt brunns V_0

minnst eitt bundið ástand (1D)

(10)

Dreifilausnir fyrir endanlega brunninn

$E > 0$

Hugsum okkur inn-bylgju frá vinstri

(I) $x < -a$

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

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

(III) $x > a$

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

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

(II) $-a < x < a$

$$\psi(x) = C\sin(\ell x) + D\cos(\ell x)$$

$$\ell = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

4 skilyrði:

$\psi(-a)$ samfellt

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C\sin(\ell a) + D\cos(\ell a)$$

$\psi'(-a)$ samfellt

$$ik\left(Ae^{-ika} - Be^{ika}\right) = \ell\left(C\cos(\ell a) + D\sin(\ell a)\right)$$

$\psi_2(a)$ samfellt

$$C\sin(\ell a) + D\cos(\ell a) = F e^{ika}$$

$\psi_2'(a)$ samfellt

$$\ell\{C\cos(\ell a) - D\sin(\ell a)\} = ikFe^{ika}$$

þar má taka saman sem

$$B = i\frac{\sin(2\ell a)}{2k\ell}(\ell^2 - k^2)F$$

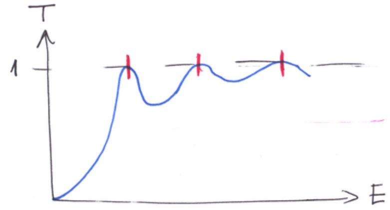
$$F = \frac{e^{-2ika}A}{\cos(2\ell a) - i\frac{(k^2+\ell^2)}{2k\ell}\sin(2\ell a)}$$

og

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)}\sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}\right)}$$

$$= \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)}\sin^2\left(\pi\sqrt{\frac{E+V_0}{\hbar\omega_1}}\right)}$$

$$\hbar\omega_1 = \hbar\left(\frac{\pi^2\hbar}{2m(2a)^2}\right)$$



$T=1$ herma í hvert sinn sem

$$\sqrt{\frac{E+V_0}{\hbar\omega_1}} = n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$E + V_0 = \hbar\omega_1 n^2$$

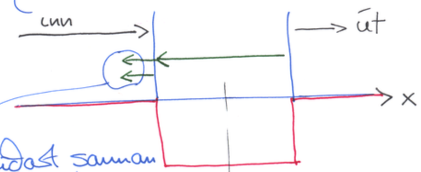
þegar $E = \hbar\omega_1 n^2 - V_0$

sama skilyrði og fyrir óendanlegan brunn

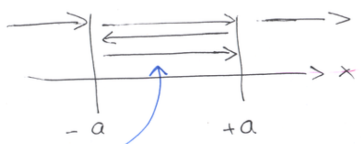
þetta er skilyrði þess að öll bylgjan varpist frá $-a$ aftur inn á brunnsvæðið

Hermuástönd

finnast í tilrauninni



Leggst saman eyðandi



þegar svæðið milli $-a$ og $+a$ er skoðað betur sést að lausnin jafngildir því að allir möguleikar fyrir "n"-sinnum endurkast sé teknir með í reikninginn

Í hermu er því hægt að sjá meiri líkur þess að ögn finnist á brunnsvæðinu

Hermuástöndin fá endanlega meðalævi þess vegna er toppurinn með endanlega breidd

Dæmi um hermu í dreifingu

hermutoppurinn

JENS HJORLEIFUR BARDARSON et al.
PHYSICAL REVIEW B 70, 245308 (2004)

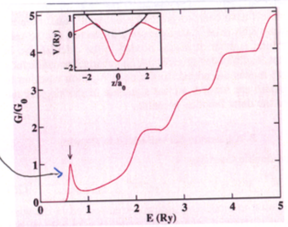


FIG. 9. (Color online). Conductance of a parabolic wall quantum wire in units of $G_0=2e^2/h$ as a function of energy in the presence of a double Gaussian scattering potential. The inset shows the scattering potential, whose parameters are $V_1=2.02$ Ry, $V_2=3.71$ Ry, $\alpha_1=0.29\,a_0^{-2}$ and $\alpha_2=0.96\,a_0^{-2}$, in the cross section $x=0$. The parabolic confinement potential ($\hbar\omega=1.01$ Ry) is also shown. The total number of modes is $N=9$. The arrow points at the value of the energy at which the probability density in Fig. 10 is calculated.

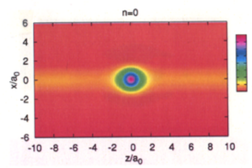


FIG. 10. (Color online). The probability density of the scattering states ψ_{nE}^{+} in the parabolic quantum wire in the presence of the double Gaussian scattering potential of Fig. 9. The total energy of the incident particle is $E=0.64$ Ry, coinciding with a resonance in the conductance (cf. the arrow in Fig. 9). The incoming wave is in mode $n=0$.

líkindin fyrir hermuna

Dvalartími einder innan brunns

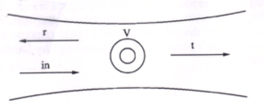


FIG. 1. Schematic view of the system. An incoming wave is partly transmitted and partly reflected by the finite range scattering potential V.

fleygboga skammtavír

1

Grunnur skammtafræðinnar

$\boxed{\text{Bylgjuföll eru stök í Hilbertrúmi}}$

Óendanlegavítt fallarúm á bili $[a,b]$ þ.a.

$$\int_b^a |\Psi|^2 dx = 1$$

gildi um stökin í rúminu

Skilgreinum innfeldi

$$\langle f|g\rangle \equiv \int_a^b dx\, f^*(x)\, g(x)$$

$$\langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^*$$

Mengi falla $\{f_n\}$ er fullkominn stöðlanlegur grunnur ef

$$\langle f_m|f_n\rangle = \delta_{mn}$$

og sérhvert fall í Hilbertrúminu má liða í grunninum

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x)$$

2

$\boxed{\text{Mælistærðir eru táknaðar með hermískum virkjum}}$

Línulegur virki uppfyllir

$$\hat{Q}\{a f(x) + b g(x)\} = a \hat{Q} f(x) + b \hat{Q} g(x)$$

Væntigildi virkja er

$$\langle Q\rangle = \int dx\, \Psi^* \hat{Q}\, \Psi = \langle \Psi|\hat{Q}\Psi\rangle$$

væntigildið er rauntala

$$\langle Q\rangle = \langle Q\rangle^*$$

en * breytir „röðun"

$$\langle f|\hat{Q} f\rangle = \langle \hat{Q} f|f\rangle \quad \text{f. öll } f$$

slíkir virkjar eru sjálfoka eða Hermískir

Athugum

$$\langle f|\hat{p} g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^*(-i\hbar\partial_x g) = -i\hbar f^* g\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \{-i\hbar\partial_x f\}^* g = \langle \hat{p} f|g\rangle$$

3

f í jaðarpunktunum verður að hverfa svo f sé stöðlanlegt.

$\boxed{\text{Skorðuð ástönd (ástönd sem gefa ávallt sömu mæliniðurstöðu) eru eigin ástönd mælistærðar eða virkja}}$

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi$$

fast skorðuð $\rightarrow \sigma_Q = 0$

Safn allra eigingilda virkja er róf hans

Komi sama eigingildið fyrir oftar en einu sinni er það margfalt, tvöfalt, þrefalt, ...

0 getur verið eigingildi, en ekki eiginvigur

Eigingildi H

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

eru orkuróf Hamiltonvirkjans H

4

Dæmi

Virkinn $\hat{Q} = i d_\phi$ með ϕ, hornið, $0 \le \phi \le 2\pi$ í Hilbertrúmi falla með

$$f(\phi + 2\pi) = f(\phi) \quad (*)$$

(lotubundin föll)

Er $\hat{Q}$ Hermískur?

$$\langle f|\hat{Q} g\rangle = \int_0^{2\pi} d\phi\, f^*\{i d_\phi g\}$$

$$= i f^* g\Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} d\phi\, i\{d_\phi f^*\} g$$

$$= \int_0^{2\pi} d\phi \{i d_\phi f\}^* g = \langle \hat{Q} f|g\rangle$$

Virkinn $\hat{Q}$ er hermískur

Hvert er róf hans?

$$i d_\phi f = q f$$

hefur lausn $f(\phi) = Ae^{iq\phi}$

sem þarf að uppfylla (*)

$$Ae^{iq(\phi+2\pi)} = Ae^{iq\phi}$$

5

→ $e^{iq2\pi} = 1$

→ $q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Öll eigingildin eru einföld

Eigingildi og ástönd hermitískra virkja

Flokkum í tvo hópa

strjál og samfeld

Strjál róf

* Eigingildin eru rauntölur

$$\hat{Q} f = q f$$

$\hat{Q}$ er hermitískur → $\langle f|\hat{Q} f\rangle = \langle \hat{Q} f|f\rangle$

$$\rightarrow \quad q\langle f|f\rangle = q^*\langle f|f\rangle$$

$$q = q^*$$

→ q er rauntala

f eru staðlanleg föll í Hilbertrúmi

6

* Eiginástönd með mismunandi eigingildi eru hornrétt

$$\hat{Q} f = q f \quad \text{og} \quad \hat{Q} g = q' g$$

$\hat{Q}$ er hermitískur virki →

$$\langle f|\hat{Q} g\rangle = \langle \hat{Q} f|g\rangle$$

$$\rightarrow \quad q'\langle f|g\rangle = q^*\langle f|g\rangle$$

→ $q' = q$, en q' og q voru mismunandi, eina útleiðin er því að

$$\langle f|g\rangle = 0$$

Hér er ekkert sagt um eiginvigra margfaldra eigingilda

En við getum alltaf valið eiginástönd sama margfalda eigingildisins þ.a. þau séu hornrétt

því hvaða samantekt eiginvigra margfalds eigingildis sem er er aftur eiginvigur

(Reiknivandi)

7

Hér verður munur á eiginleikum n-víðra fallarúma og ∞-víðra. Því er bætt við

Við takmörkum mögulega virkja enn frekar þ.a. við nýtum aðeins þá sem hafa eigin-ástönd sem spanna allt Hilbertrúmið

↓

$$\boxed{\text{Eiginföll mælistærðar mynda fullkominn grunn}}$$

Samfeld róf

Virkjar með samfeld róf hafa eiginföll sem eru ekki staðlanleg

Við getum útvíkkað hugtakið staðlanleg föll

Dæmi

Skoðum eigingildi og vigra skriðþunga virkjans

$$-i\hbar d_x f_p(x) = p f_p(x)$$

8

Almennu lausnir er

$$f_p(x) = A\exp\left\{i\frac{p}{\hbar}x\right\}$$

Ekki er til gildi á $p \in \mathbb{C}$ þ.a. f_p sé staðlanlegt og sé stak í Hilbertrúmi

Lagfærum þetta með útvíkkun

$$\langle f_{p'}|f_p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f_{p'}^*(x) f_p(x)$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{i(p-p')\frac{x}{\hbar}}$$

$$= |A|^2 \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\hbar}\, e^{i(p-p')\frac{x}{\hbar}}$$

$$= |A|^2 \hbar \int_{-\infty}^{\infty} du\, e^{i(p-p')u}$$

$$= |A|^2 2\pi\hbar\, \delta(p-p')$$

því við höfðum áður skilgreint Dirac delta fallið sem

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

9

Ef við nú setjum

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \; , \; f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip}{\hbar}x}$$

þá má umrita

$$\boxed{\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p-p')}$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{ef } p \neq p' \\ \infty & \text{ef } p = p' \end{cases}$$

Dirac stöðlun

mjög svipað

$$\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \delta_{n,m}$$

Eiginföllin f_p eru hornrétt

og Fourier greining sýnir að $\{f_p\}$ er fullkominn grunnur

10

Öll stöðlanleg föll má liða

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \, C(p) f_p(x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, C(p) e^{\frac{i p}{\hbar} x}$$

og

$$\langle f_{p'} | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \, C(p) \langle f_{p'} | f_p \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \, C(p) \delta(p-p')$$

$$= C(p')$$

Eiginföll virkja með samfeld róf eigingilda eru Dirac stöðlanleg og mynda fullkominn grunn

Eiginföll staðsetningarvirkjans $\hat{x}$ eru δ-föll

$$\hat{x} \, g_y(x) = y \, g_y(x)$$

$$g_y(x) = \delta(x-y)$$

$$\langle g_{y'} | g_y \rangle = \delta(y-y')$$

11

Mæling

Mæling á mælistærð $\hat{Q}$ fyrir eind í ástandi lýst með Φ gefur eitthvert eigingildi $\hat{Q}$ q_n með líkindum

$$|C_n|^2 \; , \; C_n = \langle f_n | \Phi \rangle$$

eða

$$|C(z)|^2 dz \; , \; C(z) = \langle f_z , \Phi \rangle$$

↑ á bilinu dz

Eftir mælinguna er eindin í eiginástandinu sem mældist

f_n eða f_z

Hér víkur skammtafræðin lengst frá sígildri eðlisfræði

12

Þetta má réttlæta með því að almennt gildir

$$\Phi = \sum_n C_n f_n$$

C_n segir til um hversu mikið af f_n er í Φ

$$C_n = \langle f_n | \Phi \rangle$$

Heildar líkindin eru varðveitt

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

eins má sýna

$$\langle Q \rangle = \sum_n q_n |C_n|^2$$

skoðum dæmi

Eiginfall $\hat{x}$ er $\delta(x-y) = g_y(x)$

líkindi þess að finna eind í y

$$C(y) = \langle g_y | \Phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \delta(x-y) \Phi(x,t)$$

$$= \Phi(y,t) \quad , \quad |C(y)|^2 = |\Phi(y,t)|^2$$

(13)

líkindi ~~þess~~ að eind hafi skriðþunga p

$$C(p) = \langle f_p | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\, \Psi(x,t)\, dx$$

$$= \Phi(p,t)$$

Fourier mynd $\Psi(x,t)$

Líkindin eru $|\Phi(p,t)|^2 dp$

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-i\frac{p}{\hbar}x}\, \Psi(x,t)$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{i\frac{p}{\hbar}x}\, \Phi(p,t)$$

Kerfum má jafnt lýsa í þessum tveimur falla rúmum, eða einu öðrum

(1)

Óvissu lögmálið

Athugum hvað gildir fyrir tvo virkja $\hat{A}$ og $\hat{B}$. Fyrir mælistærð A gildir

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi \,|\, (\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi \rangle = \langle f | f \rangle$$

ef $f \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi$

Á sama hátt fyrir aðra mælistærð B

$$\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle \quad \text{með} \quad g = (\hat{B} - \langle B \rangle)\Psi$$

$$\to \sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f|f\rangle \langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

Schwarz

$|\langle f|g\rangle| \leq \sqrt{\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle}$

(2)

Fyrir $z \in \mathbb{C}$ gildir

$$|z|^2 = [\mathrm{Re}(z)]^2 + [\mathrm{Im}(z)]^2 \geq [\mathrm{Im}(z)]^2 = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*)\right]^2$$

ef $z = \langle f | g \rangle$

$$\hookrightarrow \sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left\{ \frac{1}{2i} \left[\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle \right] \right\}^2$$

En $\langle f|g\rangle = \langle (\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi \,|\, (\hat{B} - \langle B \rangle)\Psi \rangle$

(hermískur) $= \langle \Psi \,|\, (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{B} - \langle B \rangle)\Psi \rangle$

$= \langle \Psi \,|\, (\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B \rangle - \hat{B}\langle A \rangle + \langle A \rangle\langle B \rangle)\Psi \rangle$

$= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B}\Psi \rangle - \langle B \rangle \langle \Psi | \hat{A}\Psi \rangle - \langle A \rangle \langle \Psi | \hat{B}\Psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle$

(3)

$= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle$

$= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$

Og eins má sýna að

$$\langle g | f \rangle = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

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

$$\to \langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$$

og að lokum fæst

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

4

Ósamrýmanlegar mælistærðir víxlast ekki

$\boxed{\text{samrýmanlegar mælistærðir deila sameiginlegum fullkomnum eiginfallagrunni}}$

$\boxed{\text{Ósamrýmanlegar mælistærðir eiga ekki sameiginlegan eiginfallagrunn}}$

Aðeins um tíma

Í okkar framsetningu á skammtafræði eru ástönd eða bylgjuföll mögulega háð tíma $\Psi(x,t)$, en virkjar oftast (hingað til) óháðir tíma, $\hat{x}$, $\hat{p}$

5

skoðum meðalgildi

$$d_t\langle Q\rangle = d_t\langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \langle\partial_t\Psi|Q\Psi\rangle + \langle\Psi|(\partial_t\hat{Q})\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{Q}\,\partial_t\Psi\rangle$$

og jafna Schrödingers gefur

$$i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}\Psi\ , \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

$$\to d_t\langle Q\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle H\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|Q\hat{H}\Psi\rangle + \langle\partial_t\hat{Q}\rangle$$

$\hat{H}$ er hermítur $\to \langle\hat{H}\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{H}\hat{Q}\Psi\rangle$

$$\to \boxed{d_t\langle Q\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle + \langle\partial_t\hat{Q}\rangle}$$

6

Ef $\hat{H}$ og $\hat{Q}$ víxlast þá er $\langle Q\rangle$ hreyfifasti

(ef Q er ekki beint háð t)

og $\hat{H}$ og $\hat{Q}$ hafa sameiginleg eiginföll

Ef H er óháð t þá er hægt að skilgreina $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$

og

$$\Psi(x,t) = U(t)\Psi(x,0)$$

$$\hat{A}(t) = U^{+}(t)\,\hat{A}\,U(t)$$

þá fæst

$$d_t\hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}(t)] + (\partial_t A) \quad \text{hreyfijafna f. virkja}$$

$$i\hbar\partial_t\Psi(x,0) = 0 \quad \text{Schrödinger jafna}$$

Heisenbergmynd með tímaháðum virkjum og sístæðum (ástöndum), bylgjuföllum

aukа

7

Hreyfijafna Heisenbergs (í Heisenbergmynd) minnir á hreyfijöfnuna fyrir vonttgildi virkja

Veljum $A = H$ og $B = Q$

$$\to \sigma_H^2\sigma_Q^2 \geq \left\{\frac{1}{2i}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle\right\}^2 = \left\{\frac{1}{2i}\frac{\hbar}{i}d_t\langle Q\rangle\right\}^2$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\left\{d_t\langle Q\rangle\right\}^2$$

eða

$$\sigma_H\sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2}\left|d_t\langle Q\rangle\right|$$

8

Veljum núna $\Delta E = \sigma_H$ og

$$\Delta t = \frac{\sigma_Q}{\left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|}$$

$$\to \quad \Delta E \cdot \sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2}\left|\frac{\sigma_Q}{\Delta t}\right| \quad \to \quad \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Δt er tímabilið sem þarf fyrir Q t.þ.a breytast um 1 staðalfrávik σ_Q

Ef einhver breyta/meðalstærð breytist hratt

$\to$ mikil óvissa í orku ΔE

Engin tenging við víxl hér

9

Dirac táknun

Fyrst þegar við lærðum um vigra voru alltaf notuð einhver gefin hnitakerfi

$$\bar{A} = A_x \bar{e}_x + A_y \bar{e}_y$$

Síðar lærðum við ýmislegt um vigra án þess að hafna hnitakerfi

Gerum svipað fyrir Hilbert-rúmið okkar. Þar hugsuðum við vissa tegund falla í stöðu eða skriðþunga rúminu

Staða eða skriðþungi leika hér hlutverk hnitakerfis

Hugsum okkur óhlutbundið Hilbertrúm ástanda (vigra) þ.a.

$$\Psi(x,t) = \langle x | \Psi(t)\rangle$$

$|x\rangle$ er eiginástand $\hat{x}$ með eigingildi x og $|\Psi\rangle$ er ástand kerfisins í Hilbertrúminu

$$\Phi(p,t) = \langle p | \Phi(t)\rangle$$

10

Bylgjufallið $\Psi(x,t)$ er þá liðunarstuðull ástandsins $|\Psi(t)\rangle$ í grunni staðarástanda

---

Virkjar ummynda á eitt ástand í annað

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle$$

Ástand má liða í einhverjum fullkomnum grunni ástanda $\{|\phi_n\rangle\}$

$$|\alpha\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle$$

$$\to \quad a_n = \langle \phi_n | \alpha\rangle$$

Virkja má þá setja út í sama grunni (eða öðrum)

$$\langle \phi_m | \hat{Q} | \phi_n\rangle = Q_{mn}$$

sem fylki

Athugum

$$\sum_n b_n |\phi_n\rangle = \sum_n a_n \hat{Q}|\phi_n\rangle$$

innfölldum með $\langle\phi_m|$

$$\sum_n b_n \underbrace{\langle \phi_m | \phi_n\rangle}_{\delta_{m,n}} = \sum_n a_n \langle \phi_m | \hat{Q} | \phi_n\rangle$$

$$\to \quad b_m = \sum_n Q_{mn} a_n$$

11

Skoðum dæmi um tvístiga kerfi

Þannig kerfi eru til (spuni) eða eru nálgun fyrir flóknara kerfi

Tvö óháð ástönd

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Almennt blandað ástand er

$$|\phi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

með $|a|^2 + |b|^2 = 1$ stöðlun

Hugsum okkur

$$H = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix}$$

Ef kerfið er í ástandi $|1\rangle$ klukkan $t=0$

Hvert er ástandið síðar, finnið $|\phi(t)\rangle$

Vitum

$$i\hbar\partial_t |\phi(t)\rangle = H|\phi(t)\rangle$$

en notum tímaóháða jöfnuna

$$H|s\rangle = E|s\rangle$$

Þurfum að finna eigingildi og vigra H

Eigingildin eru $\boxed{E_\pm = h \pm g}$

með eiginvigra

$$|S_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix}$$

Upphafsástandið

$$|\phi(0)\rangle = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|S_+\rangle + |S_-\rangle\right\}}$$

liðun í eigin ástöndum

Því fæst

$$|\phi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{e^{-i(h+g)\frac{t}{\hbar}}|S_+\rangle + e^{-i(h-g)\frac{t}{\hbar}}|S_-\rangle\right\}$$

Dirac bætti við nykur-rúminu $\langle\alpha|$

þ.a. ef

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ \vdots\end{pmatrix}$$

þá er

$$\langle\alpha| = (a_1^*, a_2^*, \dots)$$

$|\alpha\rangle$ ket

$\langle\alpha|$ bra

Ofanvarp á $|\alpha\rangle$

$$\hat{P} = |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

og fullkomleiki

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \mathbb{1}$$

Innfalda með $\langle x|$ og $|y\rangle$

$$\boxed{\begin{aligned}\sum_n \langle x|\phi_n\rangle\langle\phi_n|y\rangle &= \langle x|y\rangle\\ \sum_n \phi_n^*(x)\,\phi_n(y) &= \delta(x-y)\end{aligned}}$$

Hér þarf nokkra þjálfun sem við skoðum annað slagið í haust

Við munum fara varlega með táknum Diracs og nemendur kynnast henni betur í seinni námskeiðum

Skammtafræði í 3 víddum

Jafna Schrödingers er

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\bar{r})$$

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

í Kartískum hnitum

$$\bar{p} \to -i\hbar\bar{\nabla}$$

í 3-víða staðarrúminu

Bylgjuföllin verða í 3-víðu rúmi

$$\Psi(\bar{r},t)$$

með norminu

$$\int d\bar{r}\,|\Psi(\bar{r},t)|^2$$

Eiginföll H eru

$$\Psi_n = \psi_n(\bar{r})\,e^{-iE_nt/\hbar}$$

eiginföllin má setja í númeraröð, en við munum síðar sjá að n stendur oft fyrir nokkrar skammtatölur

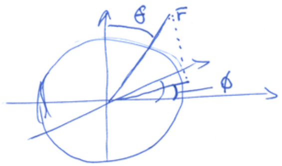
Við viljum leysa jöfnuna í kúluhnitum fyrir mætti með kúlusamhverfu

$$V = V(|\bar{r}|)$$

Ef við skrifum $p^2 = -\hbar\nabla^2$ í kúluhnitum fæst

θ: pólhorn $[0:\pi]$

φ: (stefnuhorn) $[0:2\pi]$ (um miðbaug)



$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\partial_r\left(r^2\partial_r\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\partial_\theta\left(\sin\theta\,\partial_\theta\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\partial_\phi^2\right] + V\right\}\psi = E\psi$$

Reynum aðskilnað breytistærða með

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

③

áður en við reynum innsetningu endurrita ég jöfnuna sem

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\partial_r\left(r^2\partial_r\right)\right] - \frac{L^2(\theta,\varphi)}{2mr^2} + V(r)\right]\phi = E\phi$$

$$L^2(\theta,\varphi) = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta\left(\sin\theta\,\partial_\theta\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2\right\}$$

Innsetning gefur þá

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{Y}{r^2}d_r\left(r^2 d_r R\right) - \frac{R}{r^2}L^2(\theta,\varphi)Y\right] + V(r)RY = ERY$$

eða (deilum með RY) og margföldum með $-\frac{2mr^2}{\hbar^2}$

$$\underbrace{\boxed{\left\{\frac{1}{R}d_r\left(r^2 d_r R\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[V(r)-E\right]\right\}}}_{i} - \underbrace{\boxed{\frac{L^2(\theta,\phi)\,Y}{Y}}}_{ii} = 0$$

④

(i) fall af r er alltaf jafnt (ii) fyrir öll gildi á θ og ϕ

aðeins hægt báðir hlutar eru sami fastinn

Köllum hann $l(l+1)$

$$\longrightarrow \quad d_r\left(r^2 d_r R\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[V(r)-E\right]R = l(l+1)R$$

$$L^2(\theta,\phi)\,Y = l(l+1)\,Y$$

Við þurfum að skoða þessar jöfnur frekar

Hornjafnan

giskum aftur á þáttun $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$

⑤

þá fæst

nýr aðgreiningarfasti

$$\boxed{\left(d_\phi^2 + m^2\right)\Phi = 0}$$

$$\boxed{\sin\theta\, d_\theta\left(\sin\theta\, d_\theta\Theta\right) + \left[l(l+1)\sin^2\theta - m^2\right]\Theta = 0}$$

Um fyrri jöfnuna gildir að lausnin þarf að vera lotubundin

$$\Phi(\phi+2\pi) = \Phi(\phi)$$

Um lausnir hér gildir þá

$$e^{im(\phi+2\pi)} = e^{im\phi} \rightarrow e^{2\pi i m} = 1$$

eða

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

⑥

θ-jafnan

$$\sin\theta\, d_\theta\left(\sin\theta\, d_\theta\Theta\right) + \left\{l(l+1)\sin^2\theta - m^2\right\}\Theta = 0$$

er með lausn

$$\Theta(\theta) = A\,P_l^m(\cos\theta) + B\,Q_l^m(\cos\theta)$$

$Q_l^m(\cos\theta)$ er með sérstöðupunkta í $\theta = 0$ og π $\rightarrow B = 0$

Við veljum l sem $0, 1, 2, 3, \ldots$ (ekki augljóst enn)

$P_l^m(\cos\theta)$ eru „associated Legendre"- föllin

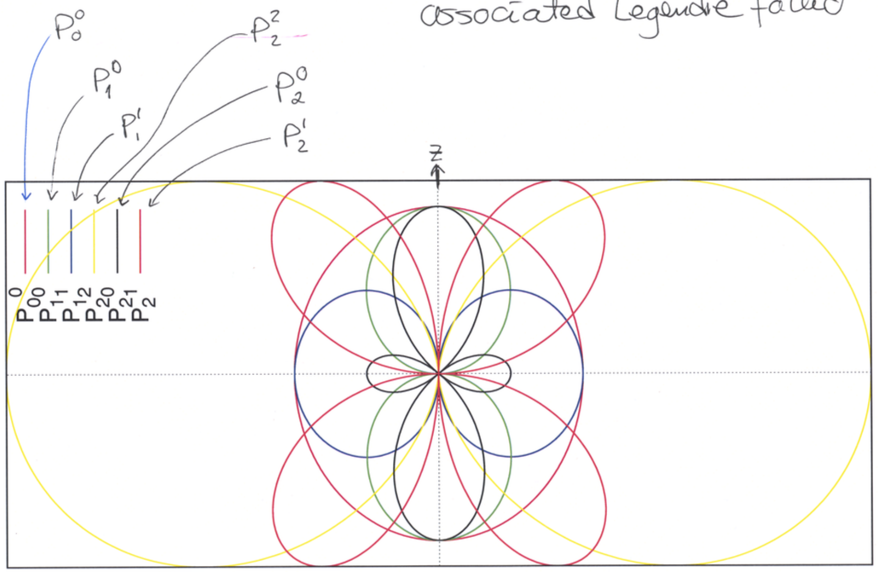
$$-l \le m \le l$$

$P_0^0(\cos\theta) = 1$ $\qquad$ $P_1^1(\cos\theta) = \sin\theta$ $\quad \ldots$

$P_1^0(\cos\theta) = \cos\theta$ $\qquad$ $P_2^0(\cos\theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$

7

associated Legendre fallið



8

þessar tvær lausnir fyrir θ og ϕ eru teknar saman í kúluföllin

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

$$\epsilon = \begin{cases} (-1)^m & \text{ef } m \geq 0 \\ 1 & \text{ef } m \leq 0 \end{cases}$$

en. þessu ϵ-i oft sleppt í öðrum bókum

Mynda fullkominn grunn

$$\int_0^{4\pi} d\Omega \left\{Y_{\ell m}(\Omega)\right\}^* Y_{\ell' m'}(\Omega) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

$$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

þurfum að muna að heildisfrymið er

$$d\bar{r} = r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

9

Jafna útþáttar, radial jafnan

$$d_r\left(r^2 d_r R\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{V(r)-E\right\}R = \ell(\ell+1)R$$

einföldum með

$$u(r) = rR(r) \to \begin{cases} R = \frac{u}{r}, \quad d_r R = \frac{1}{r^2}(r d_r u - u) \\ d_r\left(r^2 d_r R\right) = r d_r^2 u \end{cases}$$

og því

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} d_r^2 u + \underbrace{\left[V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}\right]}_{V_{eff}} u = Eu}$$

radial jafnan

eins og við bætist þáttur sem þrengi eindinni í burtu frá $r=0$ með vaxandi ℓ

10

Dæmi: Eind í harðri kúlu

Óendanlegur kúlulaga brunnur

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{ef } r \leq a \\ \infty & \text{ef } r > a \end{cases}$$

þurfum að leysa radial jöfnuna

$$d_r^2 u = \left\{\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - k^2\right\} u$$

með

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

Gerum ráð fyrir því að $E \geq 0$

Almenna lausnin er

$$u(r) = Ar\, j_\ell(kr) + Br\, n_\ell(kr)$$

$$j_\ell(x) \equiv (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} d_x\right)^\ell \frac{\sin x}{x}$$

Kúlu Bessel fallið

og

$$n_\ell(x) \equiv -(-x)^\ell \left(\frac{1}{x} d_x\right)^\ell \frac{\cos x}{x}$$

Kúlu Neumann fallið

11

Neumann föllin eru með sérstöðupunkt í $r=0$

$\rightarrow R(r) = A j_l(kr)$

k verður að velja þ.a.

$j_l(ka) = 0$

Núllstöðvarnar hafa ekki einfalda beina jöfnu

Köllum β_{nl} n-tu núllstöð kúlu Bessel fallsins l

Þá verður orkan

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta_{nl}^2$$

því $ka = \beta_{nl}$ og

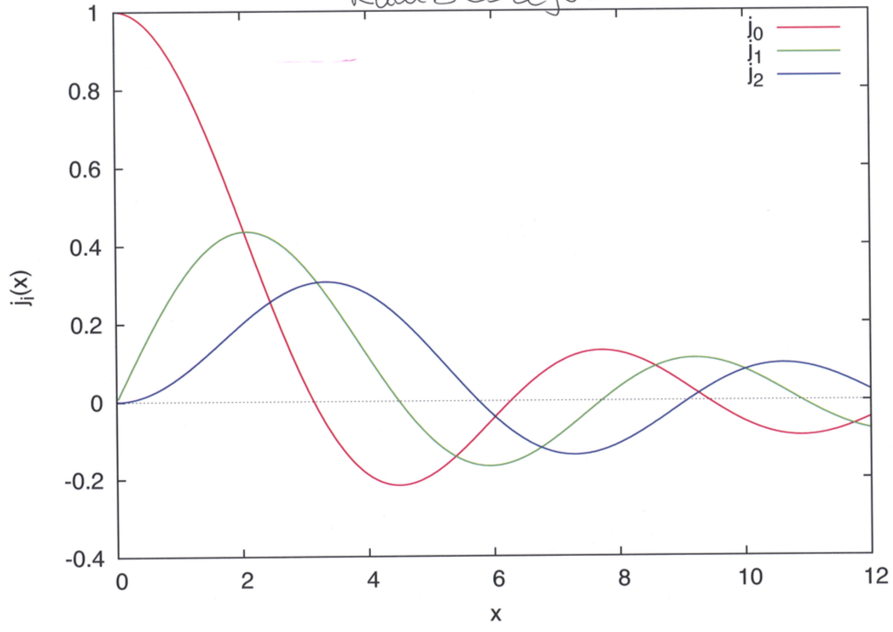
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta_{nl}^2 = E_{nl}$$

$$\psi_{nlm}(r,\Omega) = A_{nl}\, j_l\left(\beta_{nl}\frac{r}{a}\right) Y_{lm}(\Omega)$$

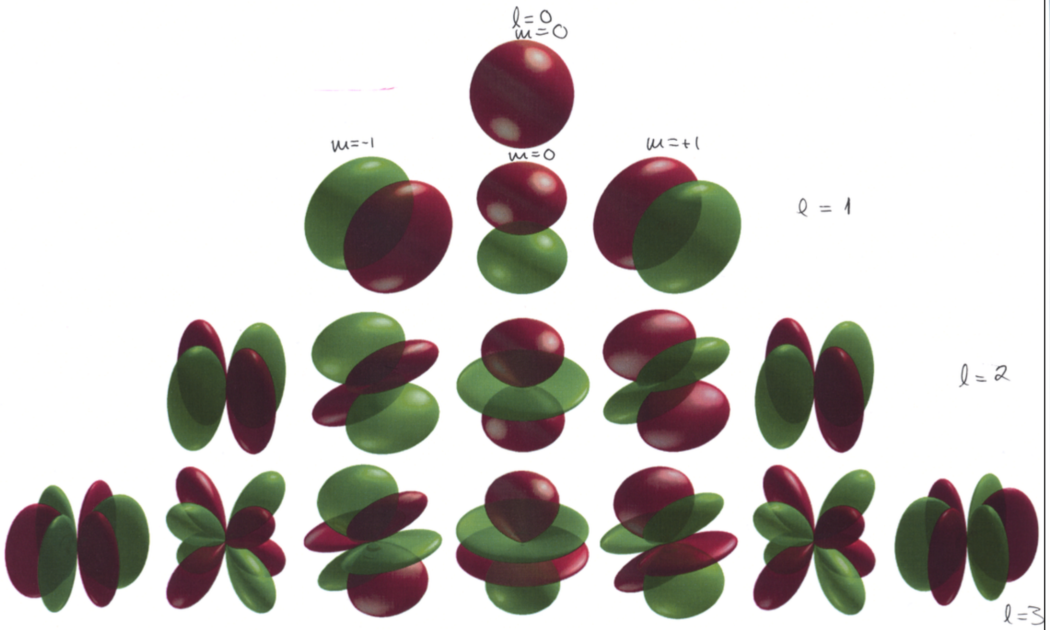
hærri núllstöð → fleiri núllstöðvar innan kúlu → hærri orka

12

Kúlu Bessel föll



13



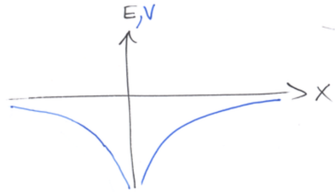
wikipedia
Sarxos

1

Vetnisatómið

Rafstöðumætti $+e$ punkthleðslu (líkan af kjarnanum með einni róteind)

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



Dreifilausnir með $E>0$

Bundnar lausnir með $E<0$

Bundin ástönd

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_r^2 u(r) + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]u = Eu$$

Setjum $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$

$$\frac{1}{\kappa^2} d_r^2 u = \left\{1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}\frac{1}{(\kappa r)} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2}\right\}u$$

$$\frac{1}{\kappa^2} d_r^2 u = \left\{1 - \frac{2}{(\kappa a)(\kappa r)} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2}\right\}u$$

$$\boxed{a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0{,}529\cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}}$$

Bohr geisli

Náttúrulegur lengdarskali

skiptum um breytistærð

$$\rho = \kappa r, \quad \rho_0 = \frac{2}{a\kappa}$$

$$\to d^2_\rho u = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u$$

Aðfellulausnir

$\rho \to \infty$ þá eru stærstu liðirnir

$$d^2_\rho u \approx u$$

með lausn

$$u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho}$$

Normanleiki $\to$ $B = 0$

$$u(\rho) \sim Ae^{-\rho}$$

$\rho \to 0$

$$d^2_\rho u \approx \frac{l(l+1)}{\rho^2} u$$

með almenna lausn

$$u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}$$

normanleiki $\to$ $D = 0$

$$\to u(\rho) \sim C\rho^{l+1}$$

Reynum því lausnaformið

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho)$$

Radial jafnan verður þá

$$\rho\, d^2_\rho v + 2(l+1-\rho) d_\rho v + (\rho_0 - 2(l+1)) v = 0$$

Lausn jöfnunnar án sérstöðupunkts í $\rho = 0$ er

$$v(\rho) = \Phi\left(l+1-\frac{\rho_0}{2}, 2l+2; 2\rho\right)$$

Φ er hypergeometrista confluent fallið

Það mun ekki geta staðlanlega lausn nema

$l+1-\frac{\rho_0}{2}$ sé neikvæð heiltala eða 0

$$\to l+1-\frac{\rho_0}{2} = -n_r \quad (*)$$

þar sem n_r er radial skammta með $n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots$

Þegar (*) er uppfyllt verður fallið Φ að endanlegri margliðu

$$L^{2l+1}_{n_r}(2\rho) = \binom{n_r + 2l + 1}{n_r} \Phi(-n_r, 2l+2, 2\rho)$$

þar sem $L^{2l+1}_{n_r}(2\rho)$ eru margliður Laguerre (associated)

$$L^0_0 = 1 \qquad L^2_0 = 2$$

$$L^0_1 = -x+1 \qquad L^2_1 = -6x+18$$

$$L^0_2 = x^2 - 4x + 2 \qquad \vdots$$

(*) gefur líka orkurófið

$$l+1-\frac{\rho_0}{2} = -n_r$$

$$\underbrace{n_r + l + 1}_{\text{heiltala}} = \frac{\rho_0}{2}$$

heiltala, köllum hana n
aðal skammtatalan n

$$n = n_r + l + 1$$

$$n = \frac{\rho_0}{2} = \frac{1}{a\kappa}$$

$$\to n^2 = \frac{1}{a^2\kappa^2}$$

$$\to \kappa^2 = \frac{1}{a^2 n^2}$$

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\to -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{1}{a^2n^2}$$

$$\to E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{1}{n^2}$$

eða

$$\boxed{E_n = -R_y \cdot \frac{1}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, 4, \ldots \quad n \in \mathbb{N}}$$

$$R_y = \frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{m^2e^4}{(4\pi\epsilon_0\hbar^2)^2}$$

$$= \frac{me^4}{\hbar^2 32\pi^2\epsilon_0^2} = \frac{me^4}{8h^2\epsilon_0^2}$$

$$\boxed{R_y = -13.6 \text{ eV}}$$

fyrir rafeind í tómarúmi

$$\boxed{\psi_{n\ell m}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}}\; e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^{\ell} L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_{\ell m}(\theta,\phi)}$$

Eiginföllin eru hornrétt

$$\int r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi\; \psi^*_{n\ell m}(r\Omega)\, \psi_{n'\ell'm'}(r\Omega) = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

$n = n_r + \ell + 1$, $n_r = 0, 1, 2, \dots$ $(n_r = n - \ell - 1)$

$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$

$-\ell \le m \le \ell$

Laguerre

$$L_n^\alpha(x) = e^x \frac{x^{-\alpha}}{n!} d_x^n\left(e^{-x} x^{n+\alpha}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(k+\alpha+1)} \frac{(-x)^k}{k!\,(n-k)!}$$

$$(1-t)^{-\alpha-1} e^{-\frac{xt}{(1-t)}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(x)\, t^n$$

$$L_n^\alpha(x) = \frac{e^x x^{-\frac{\alpha}{2}}}{n!} \int_0^\infty t^{n+\frac{\alpha}{2}} J_\alpha\left(2\sqrt{xt}\right) e^{-t}\, dt$$

$$L_n^\alpha(x) \xrightarrow[n\to\infty]{} \frac{e^{x/2}}{\sqrt{\pi}} n^{\frac{\alpha}{2}-\frac{1}{4}} x^{-\frac{\alpha}{2}-\frac{1}{4}} \cos\left\{2\sqrt{nx} - \frac{\alpha\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right\}$$

skoðum aðeins róf

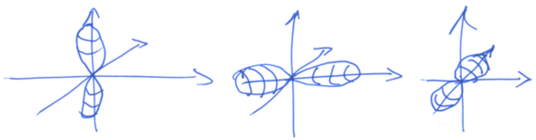
$n = 1 \to \ell = 0, m = 0$ einfalt grunnástand 1s
$Y_{00}(\Omega)$ kúlusamhverfa

$n = 2 \to \ell = 0, m = 0$, kúlusamhverfa 2s

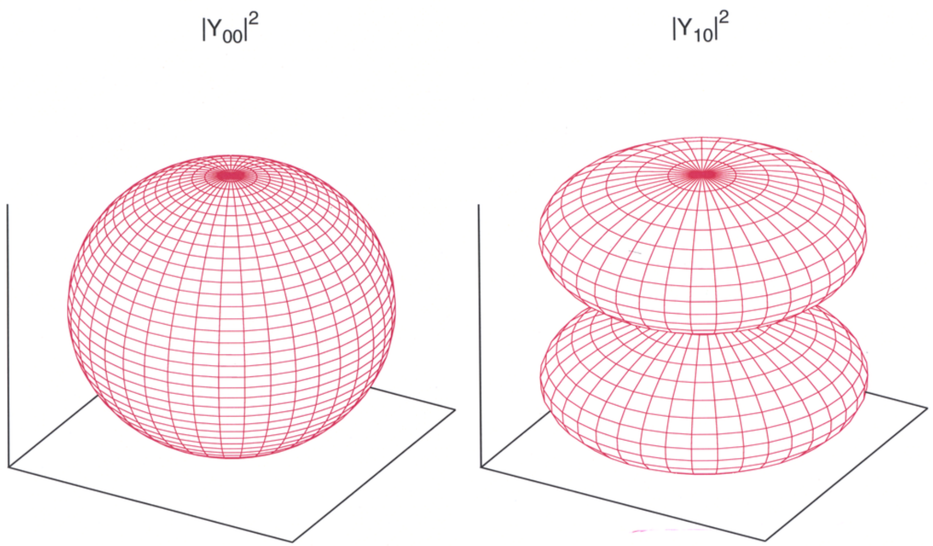
$\ell = 1 \begin{cases} m = -1 \\ m = 0 \\ m = +1 \end{cases}$ Ekki kúlusamhverf 2p
tölum of um p_x, p_y, p_z

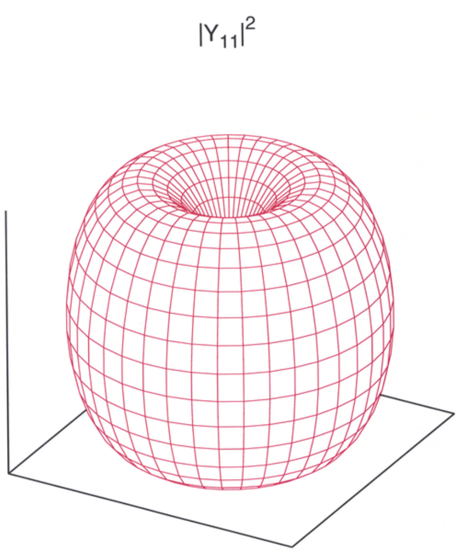
margföld

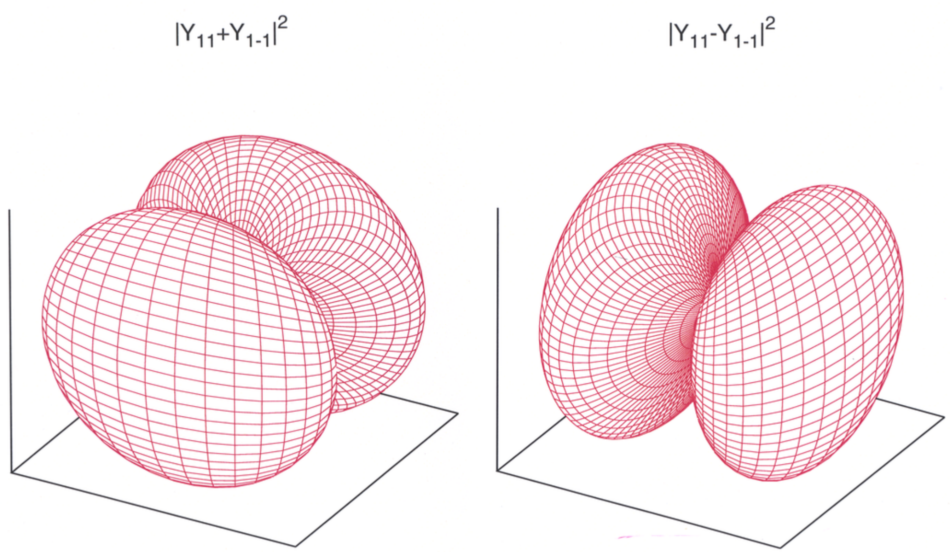
og teiknum af



Eru þetta $|Y_{1,0\pm1}|^2$?







12

margföld ástönd , 2p-ástönd

Eiginföllin $Y_{1,1}$, Y_{10} og $Y_{1,-1}$ spanna hlutrúmið
en það gera líka

$$Y_{10} \quad \text{og} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{ Y_{1,1} \pm Y_{1,-1} \right\}$$

þau eru notuð í bókum til að tákna p^x, p^y, p^z

Athyglisvert er líka

$$\sum_{m=-l}^{l} |Y_{lm}(\theta,\phi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}$$ Kúlusamhverf

13

Eftir að kanna betur hverfiþunga næsta verkefni

skoðum við síðar fínuppbygginguna vetnis

Er litrófið okkar of einfalt?

Truflanareikn

Línuróf H er stýrt með jöfnu $E_\gamma = E_i - E_f = -R_y\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right)$

En þessi jafna er líka nálgun, hér þarf meira en einfaldan truflanareikning

↳ Dofnun , línubreidd, hnik og meðalævi

1

Hverfiþungi

Í sígildri aflfræði eru hverfiþungi og orka eindar varðveitt í miðlægu mætti

Hvernig er hverfiþungi í skammtafræði?

Sígild aflfræði

$$\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p}$$

$$L_x = y p_z - z p_y$$
$$L_y = z p_x - x p_z$$
$$L_z = x p_y - y p_x$$

Í kartískum hnitum eru skammtavirkjarnir búnir til með því að setja inn virkjana fyrir p og x

Þá sést að þættir $\bar{L}$ víxlast ekki

$$\boxed{\begin{aligned}[L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y\end{aligned}}$$

eða almennt

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

$\epsilon_{ijk} = \pm 1$ jöfnumröðun / andstæðumröðun

$$\epsilon_{ijk} = \frac{(j-i)(k-i)(k-j)}{2}$$

2

Víxlin stýra eiginleikum $\bar{L}$

t.d.

$$\sigma_{L_x}^2 \cdot \sigma_{L_y}^2 \geq \left\{\frac{1}{2i}\langle i\hbar L_z\rangle\right\}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\langle L_z\rangle^2$$

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

Því eru ekki til ástönd sem eru eiginástönd L_x og L_y

En

$$\boxed{[L^2, L_i] = 0, \quad i = x, y, z}$$

eða

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

Því má finna sameiginleg eiginástönd fyrir L^2 og L_z, eða L^2 og L_x, eða L^2 og L_y.

Skoðum L^2 og L_z

Leitum

$$L^2 f = \lambda f \quad \text{og} \quad L_z f = \mu f$$

til þess skilgreinum við

$$\boxed{L_\pm = L_x \pm i L_y}$$

3

Í ljós mun koma að þetta eru hækkunar og lækkunar virkjar

Athugum

$$[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y]$$
$$= i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x)$$
$$= \pm\hbar(L_x \pm i L_y) = \pm\hbar L_\pm$$

eða

$$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$$

og auðvitað fæst

$$[L^2, L_\pm] = 0$$

því $L_\pm$ er samantekt L_i með $i = x, y$

4

Ef f er eiginástand L^2 og L_z þá er $(L_\pm f)$ það líka

$\updownarrow$

$$L^2(L_\pm f) = L_\pm(L^2 f)$$
$$= L_\pm(\lambda f)$$
$$= \lambda(L_\pm f)$$

$(L_\pm f)$ er eiginástand L^2 með sama eigingildi λ

$$L_z(L_\pm f) = \{L_z L_\pm - L_\pm L_z\} f + L_\pm L_z f$$
$$= [L_z, L_\pm] f + L_\pm L_z f$$
$$= \pm\hbar L_\pm f + L_\pm(\mu f)$$
$$= (\mu \pm \hbar)(L_\pm f)$$

$\rightarrow (L_\pm f)$ er eiginástand L_z með eigingildið $\mu \pm \hbar$

L_+ hækkar eigingildi f úr $\mu \rightarrow \mu + \hbar$

L_- lækkar — || — $\mu \rightarrow \mu - \hbar$

(5)

$L^2 f = \lambda f$

eigingildi L_z	ástand
⋮	⋮
$\mu + 2\hbar$	$L_+^2 f$
$\mu + \hbar$	$L_+ f$
μ	f
$\mu - \hbar$	$L_- f$
$\mu - 2\hbar$	$L_-^2 f$

z-þáttur vigurs getur ekki vaxið án takmörkunar þegar honum er snúið (vigurinn hefur fasta lengd)

↓

til er efsta ástand þ.a.

$$L_+ f_t = 0$$

og lægsta þ.a.

$$L_- f_b = 0$$

(6)

$L_z f_t = \mu_t f_t$

veljum $\mu_t = \hbar l$ — sjáum síðar að það er gott val

$L_z f_t = \hbar l f_t$

$L^2 f_t = \lambda f_t$

$$L_\pm L_\mp = (L_x \pm i L_y)(L_x \mp i L_y)$$
$$= L_x^2 + L_y^2 \mp (L_x L_y - L_y L_x)$$
$$= L_x^2 + L_y^2 \mp i[L_x, L_y]$$
$$= L_x^2 + L_y^2 \mp i(i\hbar L_z)$$
$$= L^2 - L_z^2 \mp i(i\hbar L_z)$$

eða

$$L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp \hbar L_z$$

og því

$$L^2 f_t = (L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z) f_t$$
$$= (0 + \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l) f_t$$
$$= \hbar^2 l(l+1) f_t$$

$\to \lambda = \hbar^2 l(l+1)$

(7)

$L_- f_b = 0$

veljum eigingildi $\hbar\bar{l}$:

$L_z f_b = \hbar \bar{l} f_b$

$L^2 f_b = \lambda f_b$

$$L^2 f_b = (L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z) f_b$$
$$= (0 + \hbar^2 \bar{l}^2 - \hbar^2 \bar{l}) f_b$$
$$= \hbar^2 \bar{l}(\bar{l} - 1) f_b$$

$\to \lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l} - 1)$

$\to l(l+1) = \bar{l}(\bar{l} - 1)$

með lausnir $\boxed{\bar{l} = -l}$ eða $\bar{l} = l + 1$

Ekki ásættanlegt því þá væri lægsta eigingildið hærra en það hæsta

Eigingildi L_z eru því $m\hbar$ frá $-l$ til l í N-heilum skrefum

$l = -l + N \to 2l = N$

eða $l = \frac{N}{2}$

l er því heiltala eða heiltala/2

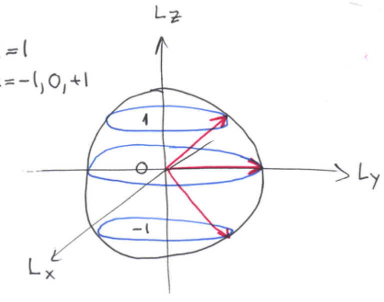
(8)

Við höfum því

$$\boxed{L^2 f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m, \qquad L_z f_l^m = \hbar m f_l^m}$$

Sígildur skilningur væri vigur með lengd^2 $\hbar^2 l(l+1)$ og $\hbar^2 l(l+1) > \hbar^2 l^2$ → vigurinn liggur aldrei alveg í z-stefnu

$l = 1$
$m = -1, 0, +1$



Er hægt að leggja z-ásinn eftir hverfiþunganum?

Nei, því $\vec{L}$ er aldrei hægt að ákvarða samtímis

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

Eiginföll

Miðlægmætti varðveita hverfiþungann, því er eðlilegt að nota kúluhnit

notum að $\bar r = r\hat r$

$$\bar L = -i\hbar\, \bar r \times \bar\nabla$$

$$\bar\nabla = \hat r \frac{\partial}{\partial r} + \hat\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \hat\phi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\to \bar L = -i\hbar\left\{ r\underbrace{(\hat r \times \hat r)}_{=0}\frac{\partial}{\partial r} + \underbrace{(\hat r \times \hat\theta)}_{\hat\phi}\frac{\partial}{\partial \theta} + \underbrace{(\hat r \times \hat\phi)}_{=-\hat\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right\}$$

$$\to \bar L = -i\hbar\left\{\hat\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

Einingarvigrana má skrifa í Kartískum hnitum

Oft $\hat i = \hat x$, $\hat j = \hat y$, $\hat k = \hat z$

$$\hat\theta = (\cos\theta\cos\phi)\hat i + (\cos\theta\sin\phi)\hat j - (\sin\theta)\hat k$$

$$\hat\phi = -(\sin\phi)\hat i + (\cos\phi)\hat j$$

$$\to \bar L = -i\hbar\left\{(-\sin\phi\,\hat i + \cos\phi\,\hat j)\frac{\partial}{\partial\theta} - (\cos\theta\cos\phi\,\hat i + \cos\theta\sin\phi\,\hat j - \sin\theta\,\hat k)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

og því

$$L_x = -i\hbar\left\{-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

$$L_y = -i\hbar\left\{+\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

og

$$\boxed{L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}}$$

$$L_\pm = L_x \pm iL_y = -i\hbar\left\{(-\sin\phi \pm i\cos\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} - (\cos\phi \pm i\sin\phi)\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

eða með

$$\cos\phi \pm i\sin\phi = e^{\pm i\phi}$$

$$\to \quad L_\pm = \pm\hbar e^{\pm i\phi}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

$$L_+L_- = -\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + i\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

og því

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

því eru eiginföll L^2 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ með eiging. $\hbar^2 l(l+1)$ þau eru líka eiginföll L_z með eiging. $\hbar m$

Athyglisvert: hér eru l og m heiltölur, en umfjöllunin áður með L_+ og L_- leyfði að l og m væru mögulega hálfar heiltölur

heiltölu lausnirnar þegar virkjarnir eru athugaðir í staðarrúminu

Spuni

Tilraunir sýna að rafeindin hefur „viðbótar" hverfiþunga sem kemur fram sem tvístig -> spuni

Afstæðiskenning + 1. stig hreyfijafna
Dirac jafna
-> spuni

Galilei-ummyndun + 1. stigs hreyfijafna
-> spuni

Báðar jöfnur + Rafsegulsvið
-> g-stuðull = 2

Hverfiþunga tvístig þýðir ½-tölu hverfiþungi

Ekki hægt að tengja við staðarrúmið -> ekki hringsnúningur um eigin ás

Engin þekktur rafeindageisli, jafnvel sá sígilt reiknaði krefst of mikils hraða í hringsnúningi

---

því er sagt að spuni sé eigin hverfiþungi eindarinnar.
Tilkominn vegna skammtalýsingar

Til eru þær hugmyndir að spunin sé vegna hringflæðis orku í bylgjufalli eindarinnar.
-> Bylgjueiginleiki

spuni er til sem hálftölu og heiltölu spuni

e	γ	π	$g_{\mu\nu}$
½	1	0	2

Spuni er hverfiþungi

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$
$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x$$
$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

$$S^2|s,m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s,m\rangle$$
$$S_z|s,m\rangle = \hbar m|s,m\rangle$$

$$S_\pm|s,m\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm1)}\,|s,(m\pm1)\rangle$$

$$s = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots$$

$$m = -s, -s+1, \ldots, s-1, s$$

½-spuni

Rafeindir og fjöldi annarra einda hefur $s = ½$

Einungis tvö eiginástönd (tvístig)

$|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle$ spuni upp ↑

$|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle$ spuni niður ↓

Almennt ástand er samantekt þessara eiginástanda

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_-$$

(spinor – spinnill)

$$S^2\chi_+ = \tfrac{3}{4}\hbar^2\chi_+$$
$$S^2\chi_- = \tfrac{3}{4}\hbar^2\chi_-$$

Alla spunavirkjana (½-tölu) má útsetja sem 2x2-fylki

T.d.
$$S^2 = \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \tfrac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} c \\ e \end{pmatrix} = \tfrac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \tfrac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} d \\ f \end{pmatrix} = \tfrac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow S^2 = \tfrac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Á samsvarandi hátt fæst

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

og frá

$$S_+\chi_- = \hbar\chi_+ \qquad S_-\chi_+ = \hbar\chi_-$$

og
$$S_+\chi_+ = 0$$
$$S_-\chi_- = 0$$

$$\rightarrow S_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Eins má nota

$$S_\pm = S_x \pm iS_y$$

til þess að fá

$$S_x = \tfrac{1}{2}(S_+ + S_-)$$
$$S_y = \tfrac{1}{2i}(S_+ - S_-)$$

(5)

og því

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$$

S_x, S_y, S_z og S^2 eru öll Hermískir virkjar, enda mælistærðir

$S_\pm$ eru ekki Hermískir, enda ekki mælistærðir

Venja er að tákna ½-spuna virkjana við fylki Pauli

$$\bar{S} = \frac{\hbar}{2}\bar{\sigma}$$

þar sem

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

(6)

Eigin ástönd S_z eru

$$\chi_+ = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \text{ með eigingildi } +\frac{\hbar}{2}$$

$$\chi_- = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \quad - \| - \quad -\frac{\hbar}{2}$$

líkindi þess að mæling S_z á $\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ gefi $+\frac{\hbar}{2}$ eru $|a|^2$

og líkindin fyrir $-\frac{\hbar}{2}$ eru $|b|^2$

Bara þessir tveir möguleikar

$$\rightarrow |a|^2 + |b|^2 = 1$$

stöðlum $\chi = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$

Hvað gerist ef ég mæli S_x á χ?

þarf að þekkja eiginástönd og gildi S_x

$$\chi_+^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \quad \text{með eigingildi } +\frac{\hbar}{2}$$

$$\chi_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \quad \text{með eigingildi } -\frac{\hbar}{2}$$

$$\rightarrow \chi = \left(\frac{a+b}{\sqrt{2}}\right)\chi_+^{(x)} + \left(\frac{a-b}{\sqrt{2}}\right)\chi_-^{(x)}$$

$$\left\{ = \frac{a+b}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + \frac{a-b}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\right\}$$

(7)

Mæling S_x á χ gefur

$$+\frac{\hbar}{2} \quad \text{með líkum} \quad \frac{|a+b|^2}{2}$$

$$-\frac{\hbar}{2} \quad \text{með líkum} \quad \frac{|a-b|^2}{2}$$

Sömu mæliniðurstöður, en með öðrum líkum

Eftir mælinguna á S_x er eindin með vel skilgreind x-þátt spuna, eindin er komin í eiginástand S_x

Mæling á S_z setur eindina í eiginástand S_z

heildarlíkur

$$\frac{1}{2}\left\{|a+b|^2 + |a-b|^2\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{(a^*+b^*)(a+b) + (a^*-b^*)(a-b)\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{|a|^2 + |b|^2 + a^*b + b^*a + |a|^2 + |b|^2 - a^*b - b^*a\right\} = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

(8)

Áhrif segulsviðs á spuna

Segulsvið hefur áhrif á brautarhreyfingu hleðslna eindar og spuna þeirra

Hamiltonvirki brautarhreyfingarinnar breytist

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$\rightarrow \frac{\pi^2}{2m} + V$$

þar sem $\bar{\pi} = \bar{p} + e\bar{A}$ með vigursviðið $\bar{A}$ þ.a.

$$\bar{B} = \bar{\nabla}\times\bar{A} \qquad \text{ef } \bar{\nabla}\cdot\bar{A} = 0$$

$$\bar{E} = -\partial_t\bar{A} \qquad \text{Kvarðafrelsi}$$

Einnig bætist við liður

$$H = -\bar{\mu}\cdot\bar{B}$$

þar sem B er ytra segulsvið sem eindin er sett í og $\bar{\mu}$ er segulvægi eindarinnar

Segulvægi eindar er í réttu hlutfalli við spuna hennar

$$\bar{\mu} = \gamma\bar{S}$$

Í sígildri eðlisfræði er

$\gamma = \frac{q}{2m}$ fyrir eind þ.s. massinn og hleðslan eru eins dreifð.

Fyrir Dirac jöfnuna + EM fæst $\gamma = -\frac{e}{m}$ fyrir rafeindir

og líka fyrir óafstæða 1. stigs-hreyfijöfnu

A. Goswami

Y. Takahashi

skilgreindur er g-stuðull

$$\gamma = -g\frac{e}{2m}$$

$g = 2$ í tómarúmi

skömmtun rafsegulsviðs leiðir til leiðréttinga á g

$$g = 2\left\{1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \cdots\cdots\right\}$$

$$= 2.0023193043617$$

QED

Í efni getur g tekið ýmiss gildi vegna uppbyggingu þess, kristallagrind - - - - -

$$H = -\gamma \bar{B}\cdot\bar{S}$$

því eru spunaástöndin tvöföld í orku ef $B=0$

Segulsviðið brýtur þá tvöfeldni

<u>Dæmi</u> <u>Larmor pólvelta</u>

Eind í einsleitu segulsviði skoðum spuna, en engar brautarhreyfingar

Fastum $\bar{B} = B_0\hat{k}$

$$H = -\gamma\bar{B}\cdot\bar{S}$$

$$= -\gamma B_0 S_z = -\frac{\gamma B_0\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

Eigin ástönd H eru því eigin ástönd S_z

$$\chi_+ = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \text{ með } E_+ = -\frac{\gamma B_0\hbar}{2}$$

$$\chi_- = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \text{ með } E_- = +\frac{\gamma B_0\hbar}{2}$$

Tímaþróun er samkvæmt

$$i\hbar\partial_t\chi = H\chi$$

H er óháð tíma

$\downarrow$

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_-t/\hbar}$$

$$= \begin{pmatrix} a e^{\frac{i\gamma B_0}{2}t}\\ b e^{-\frac{i\gamma B_0}{2}t}\end{pmatrix}$$

Stuðlana a og b verður að ákveða frá upphafsskilyrðum

$$\chi(0) = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

Gilda verður $|a|^2 + |b|^2 = 1$

Veljum því

$$a = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

$$b = \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

og hornið α má einnvelja

$$\rightarrow \chi(t) = \begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0}{2}t}\\ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0}{2}t}\end{pmatrix}$$

Til þess að sjá hvað er að gerast er rétt að reikna væntigildi

$$\langle S_x\rangle = \chi^\dagger(t) S_x \chi(t) =$$

$$\left(\cos\left(\tfrac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0}{2}t}, \sin\left(\tfrac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0}{2}t}\right)\begin{pmatrix}0 & \frac{\hbar}{2}\\ \frac{\hbar}{2} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0}{2}t}\\ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0}{2}t}\end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(\sin\left(\tfrac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0}{2}t}, \cos\left(\tfrac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0}{2}t}\right)\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0}{2}t}\\ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0}{2}t}\end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\, 2\cos\left(\tfrac{\alpha}{2}\right)\sin\left(\tfrac{\alpha}{2}\right)\left\{e^{i\gamma B_0 t} + e^{-i\gamma B_0 t}\right\}$$

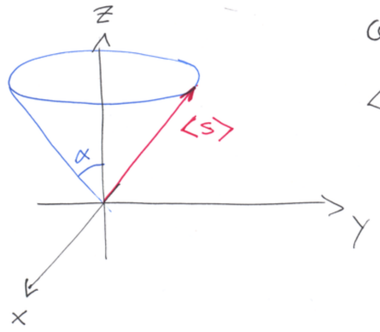
$$= \frac{\hbar}{2}\sin(\alpha)\cos(\gamma B_0 t)$$

Eins fæst

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\alpha) \sin(\gamma B_0 t)$$

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\alpha)$$

α – er hornið milli z-áss og hverfiþungans



$\omega = \gamma B_0$ er þá pólveltutíðni

$\langle s \rangle$, sem hverfur þegar $B \to 0$

Samlagning hverfiþunga

Athugum tvær $\frac{1}{2}$-spuna eindir

Heildar kerfið er í ástandi sem er samantekt fjögurra ástanda

$$\uparrow\uparrow, \quad \uparrow\downarrow, \quad \downarrow\uparrow, \quad \downarrow\downarrow$$

Hver er heildar hverfiþungi kerfisins?

$$\bar{S} = \bar{S}^{(1)} + \bar{S}^{(2)}$$

Hvert ástand er eiginástand

$$S_z = S_z^{(1)} + S_z^{(2)}$$

$$S_z \chi_1 \chi_2 = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_1 \chi_2$$

$$= \{S_z^{(1)} \chi_1\} \chi_2 + \chi_1 \{S_z^{(2)} \chi_2\}$$

$$= \{\hbar m_1 \chi_1\} \chi_2 + \chi_1 \{\hbar m_2 \chi_2\}$$

$$= \hbar \underbrace{(m_1 + m_2)}_{m} \chi_1 \chi_2$$

og því

$\uparrow\uparrow$ $m = 1$

$\uparrow\downarrow$ $m = 0$

$\downarrow\uparrow$ $m = 0$

$\downarrow\downarrow$ $m = -1$

skrítið, því við bjuggumst við $-1, 0, +1 = m$ og öllum einföldum, ef $s = 1$

skoðum $S_-(\uparrow\uparrow)$

$$S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_-(\uparrow\uparrow) = (S_-^{(1)} \uparrow) \uparrow + \uparrow (S_-^{(2)} \uparrow)$$

$$= (\hbar \downarrow) \uparrow + \uparrow (\hbar \downarrow)$$

$$= \hbar (\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow)$$

þannig að ástöndin með $s = 1$ eru

$$\left.\begin{array}{l} |1,1\rangle = \uparrow\uparrow \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1,-1\rangle = \downarrow\downarrow \end{array}\right\} \; s=1 \text{ þrístig}$$

hér er nauðsynlegt að reyna að

$$(S_-^{(1)} + S_-^{(2)}) \uparrow\downarrow = +(\hbar\downarrow)\downarrow + \uparrow \cdot 0$$

$$(S_-^{(1)} + S_-^{(2)}) \downarrow\uparrow = 0 + \hbar \downarrow\downarrow$$

$$\to S_- |1,0\rangle \sim |1,-1\rangle$$

En, eftir er eitt ástand

$(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$ þ.a.

$$S_-(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = 0$$

þetta er ástand með $s = 0$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$$

einstig

Við þurfum að sanna betur flokkunina í einstig $(s=0)$ og þrístig $(s=1)$

Eru þessi ástönd eiginástönd S^2 með réttum eigingildum?

$$S^2 = (S^{(1)} + S^{(2)}) \cdot (S^{(1)} + S^{(2)})$$

$$= \{S^{(1)}\}^2 + \{S^{(2)}\}^2 + 2 \bar{S}^{(1)} \cdot \bar{S}^{(2)}$$

$$\bar{S}^{(1)} \cdot \bar{S}^{(2)} (\uparrow\downarrow) = (S_x^{(1)} \uparrow)(S_x^{(2)} \downarrow) + (S_y^{(1)} \uparrow)(S_y^{(2)} \downarrow) + (S_z^{(1)} \uparrow)(S_z^{(2)} \downarrow)$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2}\downarrow\right)\left(\frac{\hbar}{2}\uparrow\right) + \left(\frac{i\hbar}{2}\downarrow\right)\left(-\frac{i\hbar}{2}\uparrow\right) + \left(\frac{\hbar}{2}\uparrow\right)\left(-\frac{\hbar}{2}\downarrow\right)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4}(2 \downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow)$$

og líka

$$\bar S^{(1)}\cdot \bar S^{(2)}(\downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}(2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$$

þess vegna fæst

$$\bar S^{(1)}\cdot\bar S^{(2)}|1,0\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\frac{1}{\sqrt2}\{2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow + 2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\} = \frac{\hbar^2}{4}|1,0\rangle$$

$$\bar S^{(1)}\cdot\bar S^{(2)}|0,0\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\frac{1}{\sqrt2}\{2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow - 2\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow\} = -\frac{3\hbar^2}{4}|0,0\rangle$$

$$\to S^2|1,0\rangle = \Big\{\underbrace{\frac{3\hbar^2}{4}}_{\{S^{(1)}\}^2} + \underbrace{\frac{3\hbar^2}{4}}_{\{S^{(2)}\}^2} + \underbrace{2\frac{\hbar^2}{4}}_{2\bar S^{(1)}\cdot\bar S^{(2)}}\Big\}|1,0\rangle = \underbrace{2\hbar^2}_{s(s+1) \text{ fyrir } s=1}|1,0\rangle$$

og

$$\underbrace{S^2|0,0\rangle}_{\text{Svo eigin ástand } S^2 \text{ með } s=0} = \Big[\frac{3\hbar^2}{4}+\frac{3\hbar^2}{4}-2\frac{3\hbar^2}{4}\Big\}|0,0\rangle = 0$$

Almennt gildir fyrir tvo spuna / hverfiþunga S_1 og S_2 at vit fáum spuna skala frá (S_1+S_1) niður í $|S_1-S_2|$ í heiltölu skrefum

$$S = (S_1+S_2), (S_1+S_2-1), (S_1+S_2-2), \dots, |S_1-S_2|$$

$$|s,m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} \underbrace{C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2 m}}_{\text{Clebsch-Gordan-stuðlar}}|s_1,m_1\rangle|s_2,m_2\rangle$$

Rafeind í vetni í ástandi $|nlm\rangle$ getur haft heildar hverfiþunga $l+\frac12$ eða $l-\frac12$ þegar spuni er tekin með

Ef kjarnspuna er tøkt við fæst

$$l+1,\ l,\ l-1$$

Eins eindir

Jafna Schrödingers gildir líka fyrir fleiri eindir en eina

Fyrir tvær eindir höfum við

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$$

með $\Psi(\bar r_1,\bar r_2,t)$ og H

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1}+\frac{p_2^2}{2m_2}+V(\bar r_1,\bar r_2,t)$$

$\bar r_1$ og $\bar r_2$ eru hnit sem eiga við eind 1 og 2

Bylgjufallið er normalt og leyfir líkindatúlkun á sædvanlegan hátt

$$\int d\bar r_1 d\bar r_2\, |\psi(\bar r_1,\bar r_2,t)|^2 = 1$$

fyrir mætti sem eru ekki háð t er til heildarorka þ.a.

$$\Psi(\bar r_1,\bar r_2,t) = \psi(\bar r_1,\bar r_2)e^{-iEt/\hbar}$$

og tíma óháða jafna

(8)

Schrödingers

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V\right\}\psi = E\psi$$

er eigingildisjafna með heildarorkuna E sem eigingildi

Bose og Fermi-eindir

Er mögulegt að eind 1 sé lýst með $\psi_a(\vec{r})$ og eind 2 með $\psi_b(\vec{r})$ þ.a.

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

Eind 1 væri í ástandi $|a\rangle$ og eind 2 í $|b\rangle$

Við vorum rétt áðan að fjalla um ástand

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\}$$

þar sem þetta var ekki hægt að gera

samtíðun ástanda

en stöðvum, setjum að þetta séu eins eindir

þær þekkjast ekki í sundur!!

(9)

lýsum þannig með

$$\psi_\pm(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = A\left\{\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)\right\}$$

samhverft og andsamhverft samantekt

Í þrívídd eru ekki fleiri möguleikar til þess að tryggja að eindirnar þekkist ekki í sundur. Í tvívídd er hægt að finna fleiri → anyons

Þessir tveir möguleikar kallast bóse-eindir (+) og fermi-eindir (−)

Síðan hefur komið í ljós að eindir með heiltöluspuna eru bóseeindir og hálftöluspuna eru Fermieindir

(10)

Síðar mun sjást að samhverfan eða andsamhverfan á við heildarbylgjufallið = brautarhluti og spuna-hluti

Fermi eindir í sama ástandinu, t.d. $|a\rangle$

$$\hookrightarrow \psi_-(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = A\left\{\psi_a(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2) - \psi_a(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)\right\} = 0$$

Pauli einsetulögmálið er vegna kröfu um andsamhverfu bylgjufallsins fyrir Fermieindir

Við getum skilgreint skiptavirkja P þ.a.

$$P f(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = f(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$$

$P^2 = 1$ og eigingildin eru ± 1

(11)

Fyrir eins eindir verður að gilda að

$$[P,H] = 0$$

H og P með annað hvort eigingildið ± 1 eiga því sameiginleg ástönd

Kerfi helst því áfram með þá samhverfu (± 1) sem valin er í upphafi

samhverfukrafa

$$\boxed{\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \pm\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)}$$

Skipta kraftur

(12)

Tvær eindir

$$\psi_+(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right\} \quad \text{Bose}$$

$$\psi_-(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right\} \quad \text{Fermi}$$

Reiknum

$$\langle (x_1-x_2)^2\rangle = \langle x_1^2\rangle + \langle x_2^2\rangle - 2\langle x_1x_2\rangle$$

þá fæst

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

með

$$\langle x\rangle_{ab} \equiv \int dx\, \psi_a^*(x)\, x\, \psi_b(x)$$

(*)

Síðasti liðurinn

(13)

$$\mp 2|\langle x\rangle_{ab}|^2$$

fæst ekki fyrir mismunandi eindir

Ef við höfum ψ_a og ψ_b gefin á takmörkuðu svæði sést að Fermieindir halda lengra bili milli sín, en

Bóseindir dragast að hvor annarri

Eingöngu vegna samhverfu bylgjufallanna

Því mun koma í ljós að rafeindir með eins spuna (þekkjast ekki í sundur) hafa veikari fráhrindikraft milli sín en rafeindir með sitthvorn spunann (aðgreinanlegar) hafa sterkari fráhrindingu

Eða aðeins styrar í atómi

(14)

Heildarbylgjufallið $\psi(\vec r)\chi(s)$ er andsamhverft

Ef $\chi(s)$ er spuna einstigið þá er $\chi(s)$ andsamhverft og $\psi(\vec r)$ því samhverft sem leiðir til efnatengis

Fínt jafnvægi raf- og samhverfu krafta

Atóm

(1)

Hamiltonvirkinn fyrir Z-rafeindir í atómi er

$$H = \sum_{j=1}^{Z}\left\{\frac{p_j^2}{2m} - \underbrace{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_j}}_{\text{Kjarnmætti}}\right\} + \frac12 \underbrace{\sum_{\substack{jk\\ j\neq k}}^{Z} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec r_j-\vec r_k|}}_{\text{Innbyrðis víxlverkun rafeinda}}$$

Kemur í veg fyrir tvíliðun para

engin sjálfsvíxlverkun rafeinda

Lausnin $\psi(\vec r_1,\vec r_2,\vec r_3\cdots\vec r_Z)\chi(\vec s_1,\vec s_2,\vec s_3,\ldots\vec s_Z)$ verður að vera andsamhverf

Ekki er til nákvæm lausn nema fyrir H-atómið. Mjög góðar tölulegar lausnir eru til í undanförnum grunni fyrir $Z\leq 12$ og þar fyrir ofan aðrar góðar nálganir

2

Helín

Umritum Hamilton virkjann sem

$$H = \underbrace{\left\{ \frac{p_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right\}}_{\text{H-atóm með } Z=2} + \underbrace{\left\{ \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right\}}_{\text{H-atóm með } Z=2} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\text{fráhrinding rafeindanna Coulomb}}$$

Ef við sleppum síðasta liðnum og gískum á

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{nlm}(\vec{r}_1)\, \psi_{n'l'm'}(\vec{r}_2)$$

fæst

$$E = -4 R_y \left\{ \frac{1}{n^2} + \frac{1}{(n')^2} \right\}$$

3

Í grunnástandi væri þá

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1 + r_2)/a}$$

$$E_0 = 8(-R_y) = -109 \text{ eV}$$

ψ_0 er samhverft fall $\rightarrow$ spuninn verður að vera andsamhverfur $\Leftrightarrow$ einstig

$s, m = 0$

Mæld orka er

$$E_0^{\text{mæld}} \cong -78.975 \text{ eV}$$

Munurinn skrifast á Coulomb fráhrindinguna

Til er tvenns konar He

χ – einstig $s = 0$
parahelín

χ – þrístig $s = 1$
Orthohelín

Grunnástandið 1S er alltaf parahelín

4

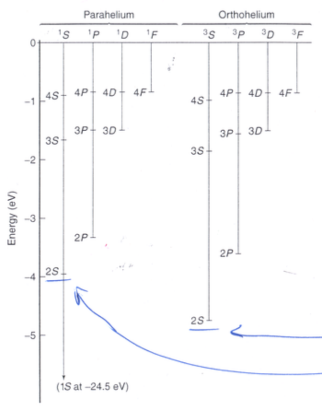


FIGURE 5.2: Energy level diagram for helium (the notation is explained in Section 5.2.2). Note that parahelium energies are uniformly higher than their orthohelium counterparts. The numerical values on the vertical scale are relative to the ground state of ionized helium (He$^+$): $4 \times (-13.6)$ eV $= -54.4$ eV; to get the *total* energy of the state, subtract 54.4 eV.

Parahelín hefur samhverft brautar bylgjufall

$\rightarrow$ hærri Coulomb fráhrinding

sést vel fyrir ástöndin nærri kjarnanum

5

Section 5.2: Aton

TABLE 5.1: Ground state electron configurations for the first four rows of the Periodic Table.

Z	Element	Configuration	
1	H	$(1s)$	$^2S_{1/2}$
2	He	$(1s)^2$	$^1S_0$
3	Li	$(\text{He})(2s)$	$^2S_{1/2}$
4	Be	$(\text{He})(2s)^2$	$^1S_0$
5	B	$(\text{He})(2s)^2(2p)$	$^2P_{1/2}$
6	C	$(\text{He})(2s)^2(2p)^2$	$^3P_0$
7	N	$(\text{He})(2s)^2(2p)^3$	$^4S_{3/2}$
8	O	$(\text{He})(2s)^2(2p)^4$	$^3P_2$
9	F	$(\text{He})(2s)^2(2p)^5$	$^2P_{3/2}$
10	Ne	$(\text{He})(2s)^2(2p)^6$	$^1S_0$
11	Na	$(\text{Ne})(3s)$	$^2S_{1/2}$
12	Mg	$(\text{Ne})(3s)^2$	$^1S_0$
13	Al	$(\text{Ne})(3s)^2(3p)$	$^2P_{1/2}$
14	Si	$(\text{Ne})(3s)^2(3p)^2$	$^3P_0$
15	P	$(\text{Ne})(3s)^2(3p)^3$	$^4S_{3/2}$
16	S	$(\text{Ne})(3s)^2(3p)^4$	$^3P_2$
17	Cl	$(\text{Ne})(3s)^2(3p)^5$	$^2P_{3/2}$
18	Ar	$(\text{Ne})(3s)^2(3p)^6$	$^1S_0$
19	K	$(\text{Ar})(4s)$	$^2S_{1/2}$
20	Ca	$(\text{Ar})(4s)^2$	$^1S_0$
21	Sc	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)$	$^2D_{3/2}$
22	Ti	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^2$	$^3F_2$
23	V	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^3$	$^4F_{3/2}$
24	Cr	$(\text{Ar})(4s)(3d)^5$	$^7S_3$
25	Mn	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^5$	$^6S_{5/2}$
26	Fe	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^6$	$^5D_4$
27	Co	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^7$	$^4F_{9/2}$
28	Ni	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^8$	$^3F_4$
29	Cu	$(\text{Ar})(4s)(3d)^{10}$	$^2S_{1/2}$
30	Zn	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^{10}$	$^1S_0$
31	Ga	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)$	$^2P_{1/2}$
32	Ge	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^2$	$^3P_0$
33	As	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^3$	$^4S_{3/2}$
34	Se	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^4$	$^3P_2$
35	Br	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^5$	$^2P_{3/2}$
36	Kr	$(\text{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^6$	$^1S_0$

Uppröðunin verður flóknari fyrir þyngri atóm

Táknum $^{2S+1}L_J$ (heildar, S, L, J)

ástönd

$l = 0 \Leftrightarrow S$

$l = 1 \Leftrightarrow P$

$l = 2 \Leftrightarrow D$

$l = 3 \Leftrightarrow F$

Hvel

$n = 1 \Leftrightarrow K$

$n = 2 \Leftrightarrow L$

$n = 3 \Leftrightarrow M$

Tilraunaniðurstöður

└ Reglur Hunds

① Hæst S hefur lægstu orku

② Fyrir gefið S þá er ástandið með hæst L með lægsta orku

③ Í hlutahveli (n, l) er $J = |L - S|$ með lægsta orku ef fylling er upp að $\frac{1}{2}$
annars $J = L + S$

skiptakraftar samhverfa

Lotubundið mætti

Greiða Diracs

1D-mætti með lotu a

$$V(x+a) = V(x)$$

Setning Blochs segir okkur að jafna Schrödingers

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 + V(x)\right\}\psi = E\psi$$

hafi lausn sem uppfyllir

$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x) \quad (*)$$

Sönnun

D er færsluvirkinn

$$D f(x) = f(x+a)$$

fyrir lotubundið mætti gildir

$$[D, H] = 0$$

því eru eiginföll H líka eiginföll D

$$D\psi = \lambda\psi$$

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x)$$

λ er ekki 0

$$\rightarrow \lambda = e^{iKa}$$

hvaða tala sem er

og við leggum eftir að skilja hlutverk K

Skrifum við t.þ.a. skrifa eigingildi?

Ef $K \in \mathbb{R}$ þá er $\psi(x)$ ekki lotubundið en $|\psi|^2$ er lotubundið

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2$$

Skilyrði Blochs (*) er leið t.þ.a. leysa jöfnu Schrödinger einungis í einni lotu og flytja lausnina yfir í hinar

Ef í viðbót t.þ.a. losna við jaðar við setjum

$$\psi(x+Na) = \psi(x)$$

fyrir mjög hátt N, fast

$$e^{iNKa}\psi(x) = \psi(x)$$

$$\rightarrow e^{iNKa} = 1, \quad NKa = 2\pi n$$

$$K = \frac{2\pi n}{Na} \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

K má gera eins þétt og þarf með því að hafa N nógu stórt

Dirac greiða

$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja)$$

Inni í lotunum

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 \psi = E\psi$$

$$d_x^2\psi = -k^2\psi$$

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

$E > 0$

Skoðum $(0 < x < a)$

$$\psi(x) = A\,\mathrm{Sin}(kx) + B\,\mathrm{Cos}(kx)$$

á bili $(-a < x < 0)$ gildir

$$\psi(x) = e^{-iKa}\left[A\,\mathrm{Sin}\{k(x+a)\} + B\,\mathrm{Cos}\{k(x+a)\}\right]$$

samfella í $x=0$

(1) $$B = e^{-iKa}\left[A\,\mathrm{Sin}(ka) + B\,\mathrm{Cos}(ka)\right]$$

ósamfella afleiðu í $x=0$

(2) $$kA - e^{-iKa} k\left[A\,\mathrm{Cos}(ka) - B\,\mathrm{Sin}(ka)\right] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} B$$

---

(1) $\rightarrow$ $$A\,\mathrm{Sin}(ka) = \left[e^{iKa} - \mathrm{Cos}(ka)\right] B$$

Nota í (2)

$$\frac{\left[e^{iKa} - \mathrm{Cos}(ka)\right] kB}{\mathrm{Sin}(ka)} - e^{-iKa} k \left[\frac{\left[e^{iKa} - \mathrm{Cos}(ka)\right] B\,\mathrm{Cos}(ka)}{\mathrm{Sin}(ka)} - B\,\mathrm{Sin}(ka)\right] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} B$$

eða

$$\left[e^{iKa} - \mathrm{Cos}(ka)\right]\left[1 - e^{-iKa}\mathrm{Cos}(ka)\right] + e^{-iKa}\mathrm{Sin}^2(ka) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k}\mathrm{Sin}(ka)$$

og

$$\mathrm{Cos}(Ka) = \mathrm{Cos}(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\mathrm{Sin}(ka)$$

$$\frac{m\alpha}{\hbar^2 k} = \frac{2m\left(\frac{\alpha}{a}\right)a^2}{\hbar^2\, ka} = \left(\frac{\alpha}{a E_1}\right)\frac{1}{(ka)} \qquad \text{þ.s. } E_1 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

orka

(10)

ka : víddarlaust

$\frac{\alpha}{aE_1}$: líka víddarlaust

$\beta = \frac{\alpha}{aE_1}$ styrkur δ-toppa í hlutfalli við aE_1

Jafnan $$\boxed{\cos(Ka) = \cos(ka) + \beta\,\frac{\sin(ka)}{ka}}$$

ákvarðar ka sem rót fyrir hvert gildi á Ka

↳ gefur orku $(ka)^2 = \frac{2ma^2E}{\hbar^2}$

$$\to E = \frac{\hbar^2 (ka)^2}{2ma^2} = E_1\cdot(ka)^2$$

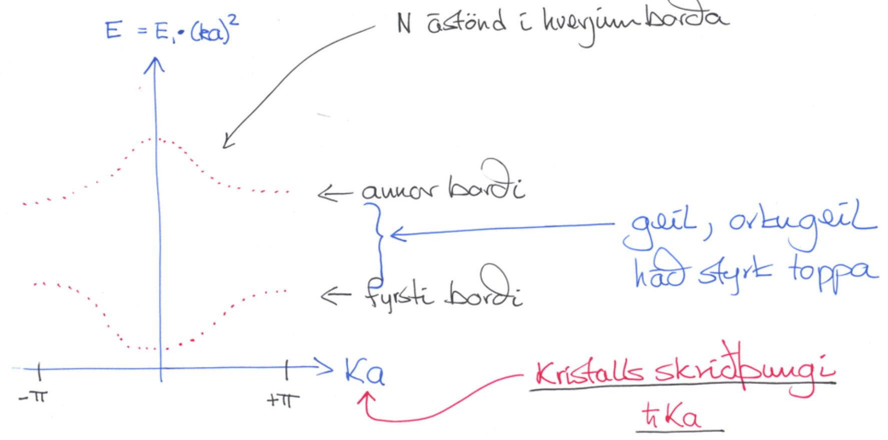
eða

$$E(Ka) = E_1\cdot\left(ka(Ka)\right)^2$$

(11)

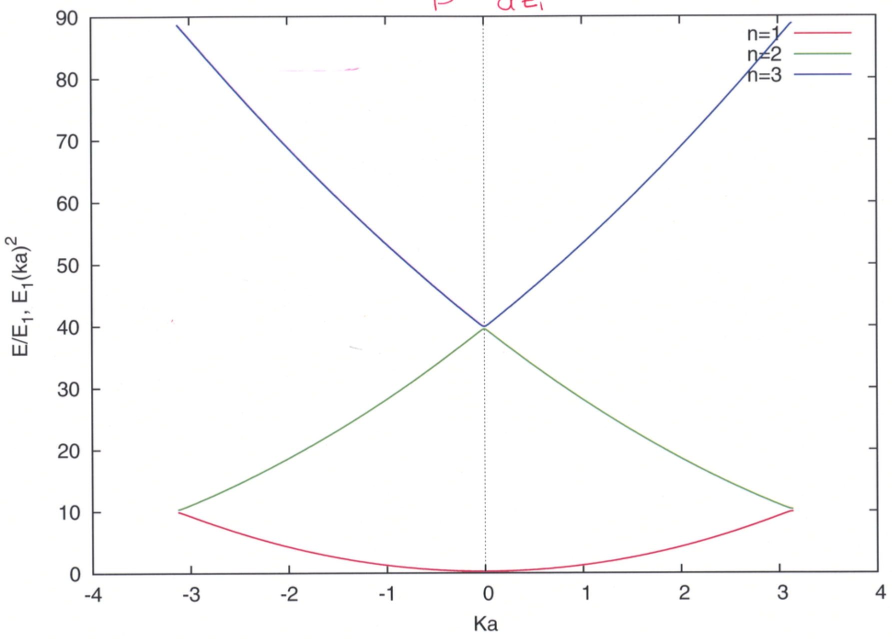
fyrir hvert Ka hljóta að vera til óendanlega margar lausnir á jöfnunni, hvernig raðast þær saman þegar Ka er skannað á bilinu $[-\pi, +\pi]$?

Væntanlega myndast borðar



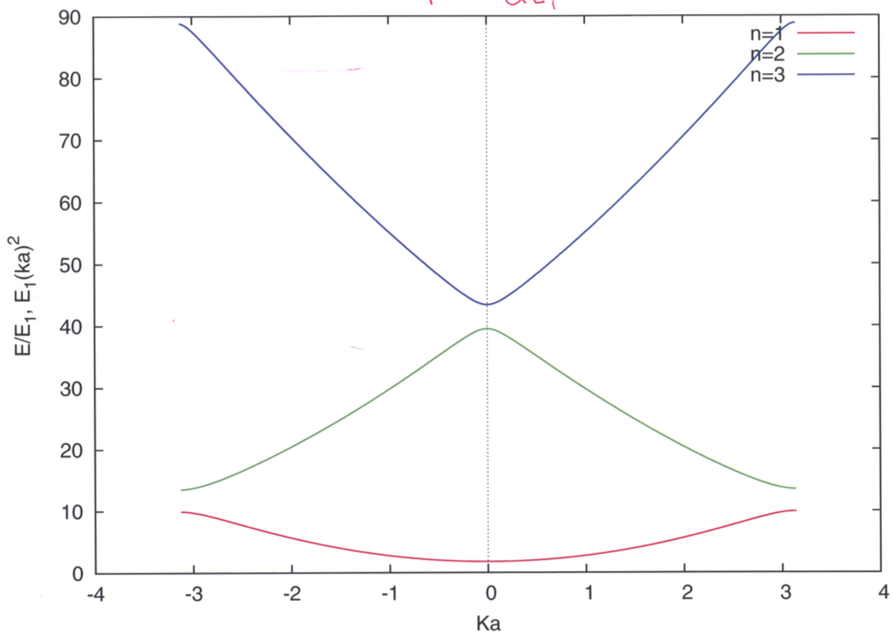
(12)

$\beta = \frac{\alpha}{aE_1} = 0{,}1$

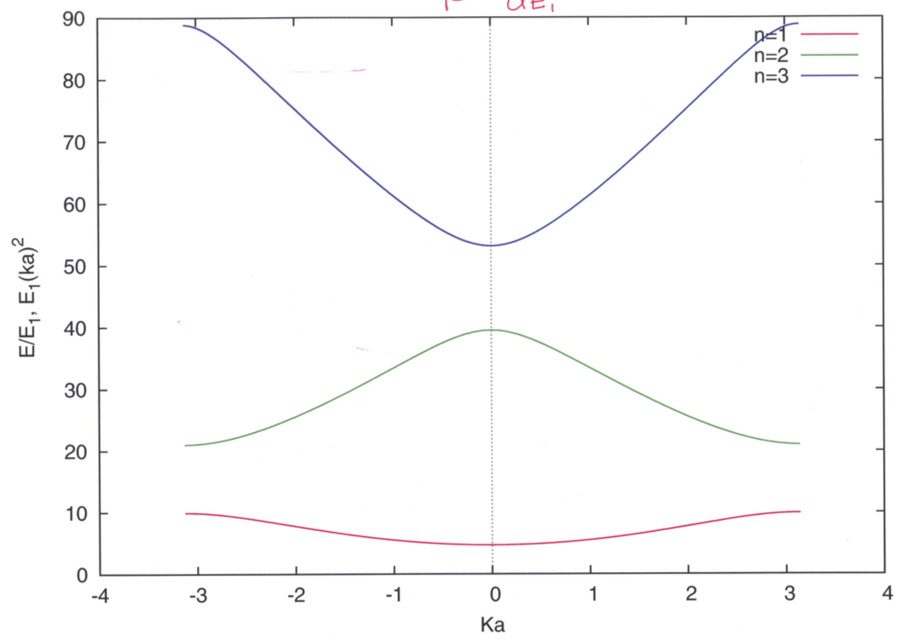


(13)

$\beta = \frac{\alpha}{aE_1} = 1{,}0$



$\beta = \frac{\alpha}{aE_1} = 4.0$



Hraðinn í hverjum borða er

$$v_n = \frac{1}{\hbar}\partial_K E_n(K)$$

* Hverfur á borða jöðrum

* skoða virka massann

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} d_K^2 E_n(K)$$

bera saman við frjálsa eind.

Tímaóháður truflanareikningur

Hugsum okkur að við þekkjum lausnir

$$H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$$

-> fullkominn staðlaður grunnur $\{|\psi_n^0\rangle\}$ og róf E_n^0

Er hægt að nota þessa þekkingu t.þ.a. leysa

$$H\psi_n = E_n\psi_n$$

Við munum nota til þess truflanareikning

* Rayleigh-Schrödinger
* Brillouin-Wigner
* Hnikun — 1 stika, fjölstika

⋮

skoðum mörg athyglisverð kerfi, sem truflanareikningur leyfir okkur að skilja

Rayleigh-Schrödinger truflanareikn

$$H^0|\psi_n^0\rangle = E_n^0|\psi_n^0\rangle$$

$$\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = \delta_{n,m}$$

Viljum leysa

$$H = H^0 + \lambda H'$$

þar sem λ er smár truflanastiki

Er hægt að finna lausn, sem veldisröð í λ?

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |\psi_n^{(i)}\rangle$$

Rayleigh-Schrödinger röð

$$E_n = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)}$$

þar sem $|\psi_n^{(i)}\rangle$ er i-ta stigs leiðrétting á ástandinu $|\psi_n\rangle$ og $E_n^{(i)}$ er i-ta stigs leiðrétting (eða þáttur) orkunnar E_n ?

λ: styrkur truflunar

H': truflun

Reynum með innsetningu

$$(H^0+\lambda H')\{|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \cdots\}$$
$$= (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots)\{|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \cdots\}$$

tökum saman veldi

$$H^0|\psi_n^0\rangle + \lambda\{H^0|\psi_n^1\rangle + H'|\psi_n^0\rangle\} + \lambda^2\{H^0|\psi_n^2\rangle + H'|\psi_n^1\rangle\} + \cdots$$
$$= E_n^0|\psi_n^0\rangle + \lambda\{E_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1|\psi_n^0\rangle\} + \lambda^2\{E_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle\} + \cdots$$

0-ta-stig

$$H^0|\psi_n^0\rangle = E_n^0|\psi_n^0\rangle$$ vel þekkt

1-ta-stig

$$H^0|\psi_n^1\rangle + H'|\psi_n^0\rangle = E_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1|\psi_n^0\rangle$$

2-ar-stig

$$H^0|\psi_n^2\rangle + H'|\psi_n^1\rangle = E_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle$$

1. stig Innfeldum með $\langle\psi_n^0|$

$$\langle\psi_n^0|H^0|\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

H^0 er Hermískt

$$E_n^0\cancel{\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle} + \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle = E_n^0\cancel{\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle} + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

þ.a. eftir stendur

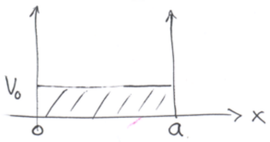
$$\boxed{E_n^1 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle}$$

Fyrsta stigs leiðrétting á orku ástands vegna ytri truflunar er væntigildi truflunar í ótruflaða ástandinu

Dæmi

'Óendanlegur brunnur

bætum fasta V_0 við mættið



$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|V|\psi_n^0\rangle$$
$$= V_0\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = V_0$$

$\rightarrow$ um öll orkustig gildir

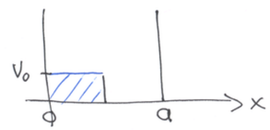
$$E_n \simeq E_n^0 + V_0$$

þeim er hnikað um V_0

Í raun er þetta nákvæmt svar og við sjáum að allir hærri liðir í röðinni hverfa

Notuðum hvergi eiginföllin, þetta gildir almennt

Ef mættið næði yfir hálfan brunninn



fáum við

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|V(x)|\psi_n^0\rangle$$
$$= \int dx \{\psi_n^0\}^* V(x)\,\psi_n^0(x)$$
$$= \frac{2}{a}V_0\int_0^{a/2}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx$$
$$= \frac{V_0}{2}$$

þ.a. $E_n \simeq E_n^0 + \frac{V_0}{2}$

sem er nálgun, 1. stigs nálgun og hærri liðir skipta líka máli, (eða geta gert það).

Hvað með 1. stigs leiðréttingu á ástandinu

Við rifjum upp 1. stigs líðuna

$$H^0|\psi_n^1\rangle + H'|\psi_n^0\rangle = E_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1|\psi_n^0\rangle$$

$$\rightarrow (H^0 - E_n^0)|\psi_n^1\rangle = -\underbrace{(H'-E_n^1)|\psi_n^0\rangle}_{\text{allt þekkt}}$$

ástand (leiðrétting) sem við viljum finna

Jafnan er jafngild hliðraðri afleiðujöfnu fyrir $|\psi_n^1\rangle$

því ef $|\psi_n^1\rangle$ er lausn jöfnunnar þá er $|\psi_n^1\rangle + \alpha|\psi_n^0\rangle$ það líka því $(H^0-E_n^0)|\psi_n^0\rangle = 0$

Óhrufluðu ástöndin mynda fullkominn stöðlaðan grunn $\{|\psi_n^0\rangle\}$ þess vegna má liða nýja ástandið í grunninum

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_m C_m^{(n)}\,|\psi_m^0\rangle$$

hér er hægt að sleppa $m=n$ liðunum úr summunni

Notum því

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} C_m^{(n)}\,|\psi_m^0\rangle$$

og reynum innsetningu

$$\sum_{m\neq n}\{E_m^0 - E_n^0\}C_m^{(n)}|\psi_m^0\rangle = -(H^1-E_n^1)|\psi_n^0\rangle$$

innföldum með $\langle\psi_l^0|$

$$\sum_{m\neq n}\{E_m^0-E_n^0\}C_m^{(n)}\langle\psi_l^0|\psi_m^0\rangle = -\langle\psi_l^0|H^1|\psi_n^0\rangle + E_n^1\langle\psi_l^0|\psi_n^0\rangle$$

$$\{E_l^0 - E_n^0\}\,C_l^{(n)} = -\langle\psi_l^0|H^1|\psi_n^0\rangle + E_n^1\,\delta_{ln}$$

þurfum að skoða margföld ástönd sér

Ef $l = n$ fæst

$$E_n = \langle\psi_n^0|H^1|\psi_n^0\rangle$$

sem áður, en ef $l\neq n$ fæst

$$\{E_l^0-E_n^0\}C_l^{(n)} = -\langle\psi_l^0|H^1|\psi_n^0\rangle$$

$$\to\quad C_l^{(n)} = \frac{\langle\psi_l^0|H^1|\psi_n^0\rangle}{E_n^0-E_l^0}$$

1. stig leiðrétting á ástandi getur oft verið léleg þó leiðréttingin á orkunni sé góð

og þess vegna

$$\boxed{|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_m^0|H^1|\psi_n^0\rangle}{E_n^0-E_m^0}\,|\psi_m^0\rangle}$$

1. stigs leiðrétting á ástandi

engin sérst. punktur

2. stigs orka

Notum aftur jöfnuna fyrir 2. stigs truflun

$$H^0|\psi_n^2\rangle + H^1|\psi_n^1\rangle = E_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle$$

Innföldum $\langle\psi_n^0|$

$$\cancel{\langle\psi_n^0|H^0|\psi_n^2\rangle} + \langle\psi_n^0|H^1|\psi_n^1\rangle = \cancel{E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle} + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^2\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

$$\to\quad E_n^2 = \langle\psi_n^0|H^1|\psi_n^1\rangle - E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle$$

og við höfðum rétt fundið að

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} C_m^{(n)}|\psi_m^0\rangle \quad\to\quad \langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} C_m^{(n)}\underbrace{\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle}_{=0} = 0$$

því $n\neq m$

$$\to\quad E_n^2 = \langle\psi_n^0|H^1|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} C_m^{(n)}\langle\psi_n^0|H^1|\psi_m^0\rangle$$

$$= \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_m^0|H^1|\psi_n^0\rangle\langle\psi_n^0|H^1|\psi_m^0\rangle}{E_n^0-E_m^0}$$

$$\to\quad \boxed{E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{|\langle\psi_m^0|H^1|\psi_n^0\rangle|^2}{E_n^0-E_m^0}}$$

Við sleppum hærri liðum í orku og 2. stigs leiðréttingu á bylgjufallinu

Við munum skoða til viðbótar aðra röð sem einfaldara er að summa. 1. og 2. stigs truflanareikn. samkvæmt Rayleigh–Schrödinger er mjög mikilvægur ....

* Við eigum eftir að fjalla um margföld ástönd

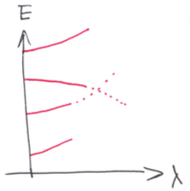
* Samleitni raðar er ekki fyrirfram gefin. Finna þarf lítinn truflanastika.

Hann er ekki alltaf til. Þá þarf að beita öðrum aðferðum að aðferðum sem túlka má sem summun raðarinnar eða hluta raðar

* Fjöldi aðferða til. Hafa þróast oft á mismunandi sviðum, eðlisfræði, efnafræði og stærðfræði .....

* Röð getur verið aðfelluröð ....

*



Við getum ekki gert λ það stórt að ástönd falli saman (skerist)

Við munum skoða aðferðir sem ráða við þann styrkleika truflunar

Skilningur okkar á mörgum kerfum er aðeins með truflanafræði

↳ ~~truflanaskilningur~~

↓

Munum hér um ástöndin milli tveggja δ-tappa

→ QED

quantum electrodynamics

skammta rafsegulfræði

endurstöðlun

þýðing upphaflegra stika

↕

Mældir stikar

Truflanareikningur fyrir margföld ástönd

Byrjum með tvöfalt ástand og sjáum síðan almenna aðferð fyrir margfalt ástand

↕

Minnir einnig á almenna aðferð sem við skoðum síðar

Tvöfalt ástand

$$H^0|\psi_a^0\rangle = E^0|\psi_a^0\rangle, \quad H^0|\psi_b^0\rangle = E^0|\psi_b^0\rangle$$

með

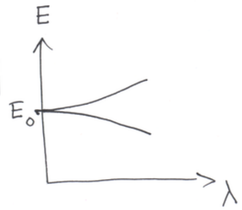
$$\langle\psi_a^0|\psi_b^0\rangle = 0$$

Mikilvægt er að línulega samantekt ástandanna

$$|\psi^0\rangle = \alpha|\psi_a^0\rangle + \beta|\psi_b^0\rangle$$

er eiginástand H^0

$$H^0|\psi^0\rangle = E^0|\psi^0\rangle$$



Truflun getur klofið margfalt ástand

Sem 1. stigs nálgun er hægt að búast við því að nýju ástöndin séu línuleg samantekt ótrufluðu ástandanna

Hærri nálganir taka tillit til fleiri ástanda

Fyrir 1. stig truflunar höfum við áður

$$H^0|\psi^1\rangle + H'|\psi^0\rangle = E^0|\psi^1\rangle + E^1|\psi^0\rangle$$

Innfeldum með $\langle\psi_a^0|$

$$\cancel{\langle\psi_a^0|H^0|\psi^1\rangle} + \langle\psi_a^0|H'|\psi^0\rangle = \cancel{E^0\langle\psi_a^0|\psi^1\rangle} + E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

Munum að hér

$$|\psi^0\rangle = \alpha|\psi_a^0\rangle + \beta|\psi_b^0\rangle$$

$$\langle\psi_a^0|H'|\psi^0\rangle = E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

$$\alpha\langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle + \beta\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle = \alpha E^1$$

eða

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1$$

með

$$W_{ij} \equiv \langle\psi_i^0|H'|\psi_j^0\rangle \quad (i,j = a,b)$$

Innföldum með $\langle\psi_b^0|$ leiðir til

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E'$$

Tekur saman verða þar

$$\begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E'\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

fylkjastök truflunar í hlutrúminu $\{|\psi_i^0\rangle, i=a,b\}$

2×2 eigingildisjafna

með lausn

$$\boxed{E'_\pm = \frac{1}{2}\left\{W_{aa}+W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa}-W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2}\right\}}$$

Setning

A er hermískur virki sem víxlast við H^0 og H'. Ef $|\psi_a^0\rangle$ og $|\psi_b^0\rangle$ (margföld ástönd H^0) eru líka eiginástönd A með mismunandi eigingildi

$$A|\psi_a^0\rangle = \mu|\psi_a^0\rangle$$
$$A|\psi_b^0\rangle = \nu|\psi_b^0\rangle \qquad \text{með } \mu\neq\nu$$

þá er $W_{ab}=0$ og venjulegur truflana reikningur nægir

Sönnun

$$[A,H'] = 0$$

$$\langle\psi_a^0|[A,H']|\psi_b^0\rangle = 0$$

$$\|$$

$$\langle\psi_a^0|AH'|\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'A|\psi_b^0\rangle$$

$$= \mu\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle - \nu\langle\psi_a|H'|\psi_b^0\rangle$$

$$= (\mu-\nu)W_{ab} = 0$$

$$\rightarrow W_{ab} = 0$$

Hornalínugera í n-vídd hlutrúmi n-falda eiginástandsins $\rightarrow$

þetta er mjög handhæg aðferð sem við munum nota þegar hægt er, t.d. fyrir margföld ástönd vetnisatóms

þar þarf t.d. að skoða hvort L_z geti leikið þetta hlutverk.

Hærri margfeldni

Augljóst að 1. stigs niðurstöður fást með því að nota $n\times n$ - fylkið

$$W_{ij} = \langle\psi_i^0|H'|\psi_j^0\rangle$$

Dæmi

Eind í teningi

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \text{if } 0<x<a,\ 0<y<a,\ 0<z<a \\ \infty & \text{annars} \end{cases}$$

Eiginföllin eru

$$\psi^0_{n_xn_yn_z}(x,y,z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{n_z\pi z}{a}\right)$$

og eigingildin (orkurófið)

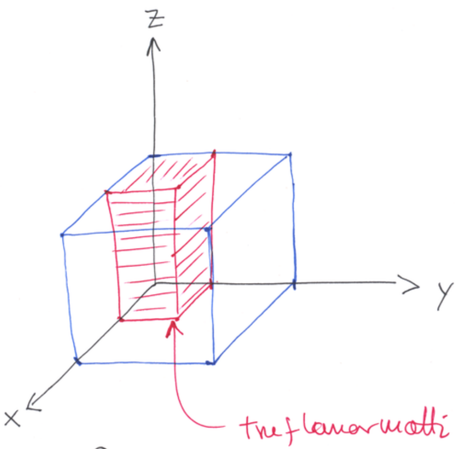
$$E^0_{n_xn_yn_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left\{n_x^2+n_y^2+n_z^2\right\}$$

Grunnástand $|\psi_{111}\rangle$ er einfalt með orku $E^0_{111} = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$

Næsta ástand er margfalt með

$$E_1^0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\cdot 6$$

$$\left.\begin{aligned} |\psi_a^0\rangle &= |112\rangle \\ |\psi_b^0\rangle &= |121\rangle \\ |\psi_c^0\rangle &= |211\rangle \end{aligned}\right\} \quad |n_xn_yn_z\rangle$$



Athugum truflun

$$H' = \begin{cases} V_0 & \text{ef } 0<x<\frac{a}{2},\ 0<y<\frac{a}{2} \\ 0 & \text{annars} \end{cases}$$

7

$$E_0' = \langle 111|H'|111\rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} dx \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\int_0^{a/2} dy \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)\int_0^{a} dz \sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right)$$

$$= \frac{1}{4}V_0$$

á sama hátt fæst

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{V_0}{4}$$

og

$$W_{ab} = 0 \quad , \quad W_{ac} = 0$$

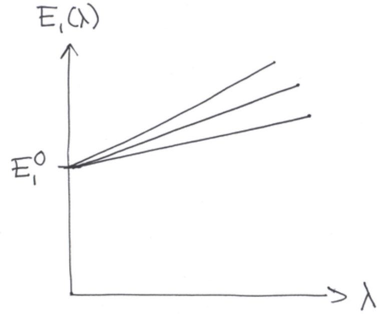
$$W_{bc} = \frac{16}{9\pi^2}V_0 \qquad \text{með } K = \left(\frac{8}{3\pi}\right)^2 \approx 0{,}7205$$

$$\to W = \frac{V_0}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & K \\ 0 & K & 1 \end{pmatrix}$$

8

þrenn eigingildi

$$w_1 = 1$$
$$w_2 = 1 + K$$
$$w_3 = 1 - K$$



þess vegna er 1. stigs leiðréttingin í λ

$$E_1(\lambda) = \begin{cases} E_1^0 + \frac{\lambda V_0}{4}\cdot 1 \\ E_1^0 + \frac{\lambda V_0}{4}(1+K) \\ E_1^0 + \frac{\lambda V_0}{4}(1-K) \end{cases}$$

Truflunin klýfur upp ástandið línuleg nálgun (öll hækka, enda minnkar rúmmál kassans)

Nýju ástöndin eru

$$|\psi^0\rangle = \begin{cases} |a\rangle \\ \frac{|b\rangle + |c\rangle}{\sqrt{2}} \\ \frac{|b\rangle - |c\rangle}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

9

Við getum ekki búið til svipaða aðferð sem reiknar 2. stigs truflun fyrir margföld ástönd án þess að taka tillit til annarra ástanda

En við getum gert betur

Hugsum okkur kerfi með þekktum lausnum

$$H_0|n\rangle = E_n^0|n\rangle$$

notum latneska stafi til að tákna ástöndin í fullkomna grunninum hér $\{|n\rangle\}$

Við leitum lausna á

$$\{H_0 + H'\}|\mu\rangle = E_\mu|\mu\rangle \quad \text{(i)}$$

Grískir stafir tákna þessi nýju óþekktu ástönd $H_0 + H'$

$\{|n\rangle\}$ var fullkominn grunnur

$$\to |\mu\rangle = \sum_n C_{\mu n}|n\rangle \quad \text{(ii)}$$

þar sem þekkjum ekki liðunarstuðlana $C_{\mu n}$

Við viljum finna þá og E_μ

10

Innföldum (i) með $\langle m|$

$$\langle m|\{H_0 + H'\}|\mu\rangle = E_\mu\langle m|\mu\rangle$$

og notum liðunina (ii) fyrir $|\mu\rangle$

þarf að finna óþekkt

$$\sum_n \Big\{\underbrace{\langle m|H_0|n\rangle}_{=\delta_{mn}E_n^0} + \underbrace{\langle m|H'|n\rangle}_{\text{hægt að reikna}}\Big\} C_{\mu n} = \underbrace{E_\mu \sum_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{=\delta_{m,n}} C_{\mu n}}_{= E_\mu C_{\mu m}}$$

11

Hvað erum við með hér?

$$\underbrace{\begin{pmatrix} E_1^0 + H'_{11} & H'_{12} & H'_{13} & \cdots \\ H'_{21} & E_2^0+H'_{22} & H'_{21} & \cdots \\ H'_{31} & H'_{32} & E_3^0+H'_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{\text{Óendanlega stórt Hamilton fylki}} \begin{pmatrix} C_{\mu1}\\ C_{\mu2}\\ C_{\mu3}\\ \vdots \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} C_{\mu1}\\ C_{\mu2}\\ C_{\mu3}\\ \vdots \end{pmatrix}$$

eiginvigrar með liðunar stuðlum

Eigingildi

12

Veljum N og sniðum fylkið þ.a. við notum bara orkulægstu stök grunnsins upp í $|N\rangle$

Finnum N eigingildin og vigrana, athugum samleitni með því að hækka N

Vonumst til þess að einhver ásættanlegur fjöldi lægstu eigingildanna hafi góða samleitni

Fáum lausn sem jafngildir N. stigs truflun

Oft gert fyrir $N = 100$, $N = 1000$, $N = 10000$

„Exact numerical diagonalization"

13

Ráðum við mjög flókin fyrirbæri, sterka truflun eða tengingu

level crossing – anticrossing

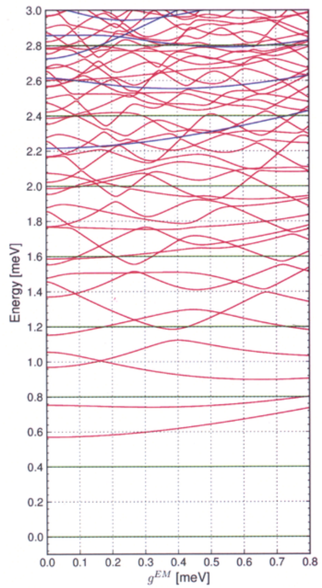
⋮

Má líka líta á sem N-stika hnikunarreikning

Kerfi einnar eindar, eða fjöleindakerfi

14

http://arxiv.org/abs/1109.4728



Upp í 10 rafeindir Coulomb víxlverkandi og 27 ljóseindir í holi

Tenging rafeinda og ljóseinda

1

Brillouin-Wigner truflun

Viljum leysa

$$(H_0 + \lambda V)|N\rangle = E_n|N\rangle$$

þekkum lausnir

$$H_0|n\rangle = E_n^0|n\rangle$$

umritum

$$(E_n - H_0)|N\rangle = \lambda V|N\rangle$$

og innföldum með $\langle m|$

(i) $$(E_n - E_m^0)\langle m|N\rangle = \lambda\langle m|V|N\rangle$$

veljum normun $|N\rangle$ þ.a. $\langle n|N\rangle = 1$

$\langle N|N\rangle \neq 1$ en það má leiðrétta síðar

Notum

$$|N\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|N\rangle$$

$$= |n\rangle\langle n|N\rangle + \sum_m{}' |m\rangle\langle m|N\rangle$$

n sleppt úr summu

$$\langle m|N\rangle = \lambda\frac{\langle m|V|N\rangle}{(E_n - E_m^0)}$$

notum í $|N\rangle$ þ.a.

(ii) $$\boxed{|N\rangle = |n\rangle + \sum_m{}' |m\rangle\frac{1}{E_n - E_m^0}\lambda\langle m|V|N\rangle}$$

Aðaljafna BW-truflanafræði

Óbein jafna, svipar til heildisjöfnu

2

Þessa jöfnu má ítra sem

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda\sum_m{}' |m\rangle\frac{1}{E_n - E_m^0}\langle m|V|n\rangle$$

$$+ \lambda^2\sum_{jm}{}' |j\rangle\frac{1}{E_n - E_j^0}\langle j|V|m\rangle\frac{1}{E_n - E_m^0}\langle m|V|n\rangle$$

$$+ \lambda^3\sum_{kjm}{}' |k\rangle\frac{1}{E_n - E_k^0}\langle k|V|j\rangle\frac{1}{E_n - E_j^0}\langle j|V|m\rangle\frac{1}{E_n - E_m^0}\langle m|V|n\rangle$$

$$+ \dots$$

Ekki veldisröð í λ því $E_n(\lambda)$, en ef liðirnir $\frac{1}{E_n - E_i^0}$ eru liðaðir í λ-röð fæst Rayleigh-Schrödinger röðin

3

Jafna (i) getur gefið okkur

$$(E_n - E_n^0)\underbrace{\langle n|N\rangle}_{=1} = \lambda\langle n|V|N\rangle$$

eða

$$E_n = E_n^0 + \lambda\langle n|V|N\rangle$$

notum hér (ii) t.d. upp í 1. stig í λ, þá fæst

$$E_n = E_n^0 + \lambda\langle n|V|n\rangle + \lambda^2\sum_m{}' \frac{|\langle m|V|n\rangle|^2}{E_n - E_m^0}$$

óbein jafna f. E_n

Ólínuleg jafna fyrir E_n. Aðferðin gæti boðið hraðari samleitni

Er í raun summa af vissum völdum liðum í öllum veldum af λ

Almennt þarf að huga að og athuga hvort einhver endanleg summa brýtur einhver varðveislulögmál eða samhverfu. Það gerist ekki sjálfkrafa!

4

fín~~upp~~bygging vetnis

Fínbyggingarfastinn er

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

Víddarlaus mælikvarði á styrk víxlverkunar hleðslu við rafsegulsvið. QED

Orkuróf vetnis

$$E_n = -R_y\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3,$$

$$R_y = \left\{\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right\}$$

$\to O(R_y) = \alpha^2 mc^2$

(enda rafsegulvíxlverkun)

Fínbygging: afstæðisleiðrétting, spunabrautar víxlv.

$\to \alpha^4 mc^2$

Hliðrun Lamb's: skömmtun rafsegulsviðs

$\to \alpha^5 mc^2$

Ofurfínbygging: segulvægi róteinda og rafeinda

$\to \left(\frac{m_e}{m_p}\right)\alpha^4 mc^2$

5

Afstæðileg leiðrétting

Við sleppum hér leiðréttingum vegna endanlegs massa róteinda.

Nákvæm lausn á Dirac jöfnunni getur okkur allar þessar „leiðréttingar", en aukin skilningur á þeirri lausn fæst með truflanareikningi hér.

fyrir heildarorkuna fæst

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

$$E = mc^2\sqrt{\frac{p^2}{m^2c^2}+1}$$

liðum fyrir $p^2 \ll m^2c^2$

$$\to E \simeq mc^2\left\{1+\frac{1}{2}\frac{p^2}{m^2c^2}-\frac{1}{8}\frac{p^4}{m^4c^4}\right\}$$

$$= mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$$

því er lægsta leiðrétting hreyfiorkunnar

$$H_r' = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

Mörg ástönd vetnisatómsins eru margföld þ.a. við getum búist við að þurfa að nota truflanareikning fyrir margföld ástönd

6

En H_r' er með kúlusamhverfu og $n, l,$ og m eru því góðar skammtatölur → notum truflanareikning fyrir einföld ástönd

fyrir ótrufluðu ástöndin gildir

$$\left\{\frac{p^2}{2m}+V\right\}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\to p^2|\psi\rangle = 2m(E-V)|\psi\rangle$$

nýtum það fyrir 1. stigs truflun

$$E_r^1 = \langle nlm|H_r'|nlm\rangle$$

$$= \langle H_r'\rangle$$

$$E_r^1 = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle p^4\rangle$$

$$= -\frac{1}{8m^3c^2}\langle p^2\psi|p^2\psi\rangle$$

$$\to -\frac{1}{2mc^2}\langle (E-V)^2\rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 - 2E_n\langle V\rangle + \langle V^2\rangle\right]$$

fyrir vetni er

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

7

og því

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 2E_n\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle\right]$$

En nú má nota að

$$R_y = \frac{me^4}{8h^2\epsilon_0^2}, \quad a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \quad \to R_y\cdot a = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

↑ Rydbergorka ↑ Bohrgeisli

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 4E_nR_y\left\langle\frac{a}{r}\right\rangle + 4R_y^2\left\langle\frac{a^2}{r^2}\right\rangle\right]$$

og fyrir vetni

$$\left\langle\frac{a}{r}\right\rangle = \frac{1}{n^2} \qquad \left\langle\frac{a^2}{r^2}\right\rangle = \frac{1}{(l+\frac{1}{2})n^3}$$

8

og því

$$\boxed{E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\left\{\frac{R_y^2}{n^4} - \frac{4R_y^2}{n^2}\cdot\frac{1}{n^2} + 4R_y^2\frac{1}{(l+\frac{1}{2})n^3}\right\} = -\frac{R_y^2}{2mc^2}\frac{1}{n^4}\left\{\frac{4n}{(l+\frac{1}{2})} - 3\right\}} \quad (1)$$

Höfum í huga að $R_y/mc^2 \sim 2.7\cdot10^{-5}$

En hér sést munur á orku fyrir t.d. $n=2$ $l=0$ og $l=1$ → margfeldni s og p-ástanda hverfur

Griffiths bendir á að p^4 sé ekki Hermitískur virki fyrir $l=0$ (vandi með hegðun þ. $r\to 0$), en niðurstaðan E_r^1 er í samræmi við Dirac-jöfnuna.

Spuna-brautar víxlverkun

Rafeind hefur segulvægi

$$\bar{\mu}_e = -\frac{e}{m}\bar{S}$$

Þetta segulvægi víxlverkast við segulsvið

$$H = -\bar{\mu}\cdot\bar{B}$$

Rafeindin sér hlaðna róteindina í kjarnanum á hreyfingu -> straumur -> segulsvið

Þegar þessu er réttilega lýst með afstæðiskenningu

fæst

$$H'_{so} = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\bar{S}\cdot\bar{L}$$

Þennan lið má líka finna með því að leiða Dirac jöfnuna í $(\frac{v}{c})$-röð.

Þessi víxlverkun leiðir til þess að $\bar{L}$ og $\bar{S}$ varðveitast ekki lengur heldur heildarhverfiþunginn

$$\bar{J} = \bar{L} + \bar{S}$$

því

$$[H'_{so}, \bar{L}] \neq 0, \quad [H'_{so}, \bar{S}] \neq 0$$

$$H'_{so} = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\bar{S}\cdot\bar{L}$$

$$= R_y\cdot a\,\frac{1}{m^2c^2r^3}\bar{S}\cdot\bar{L}$$

$$= \frac{R_y\cdot a}{mc^2 a}\underbrace{\frac{\hbar^2}{ma^2}}_{2R_y}\frac{1}{\left(\frac{r^3}{a^3}\right)}\left(\frac{\bar{S}\cdot\bar{L}}{\hbar^2}\right)$$

$$= \frac{R_y}{mc^2}\cdot 2R_y\cdot\left(\frac{a}{r}\right)^3\left(\frac{\bar{S}\cdot\bar{L}}{\hbar^2}\right)$$

Svo fæst í viðbót

$$[L^2, H'_{so}] = 0$$

$$[S^2, H'_{so}] = 0$$

þess vegna eru eiginástönd L_z og S_z ekki góð ástönd, en eiginástönd L^2, S^2, J^2 og J_z eru það

$$J^2 = (\bar{L}+\bar{S})\cdot(\bar{L}+\bar{S})$$
$$= L^2 + S^2 + 2\bar{L}\cdot\bar{S}$$

$$\to \boxed{\bar{L}\cdot\bar{S} = \frac{1}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)}$$

Eigingildi $\bar{L}\cdot\bar{S}$ eru því

$$\frac{\hbar^2}{2}\left\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right\}$$

í viðbót fæst

$$\left\langle\left(\frac{a}{r}\right)^3\right\rangle = \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)n^3}$$

og við fáum

$$\boxed{E^1_{so} = \langle H'_{so}\rangle = \left(\frac{R_y}{mc^2}\right)\frac{R_y}{n^3}\left\{\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)}\right\}} \quad (2)$$

notum nú að $j = l \pm \frac{1}{2}$ og leggjum saman (1) og (2)

$$\boxed{E^1_{fs} = E^1_r + E^1_{so} = \frac{1}{2}\left(\frac{R_y}{mc^2}\right)\frac{R_y}{n^4}\left[3 - \frac{4n}{j+\frac{1}{2}}\right]}$$

fine structure

eða orkustig vetnis eru því samkvæmt 1. stigs truflun

$$\boxed{E_{nj} = -\frac{R_y}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left\{\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right\}\right]}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c} = 2R_y\cdot a\,\frac{1}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \quad \frac{R_y}{mc^2} = \frac{1}{2}\alpha^2$$

Section 6.3: The Fine Structure of Hydrogen 275

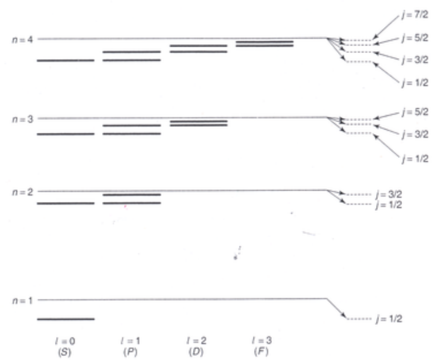


FIGURE 6.9: Energy levels of hydrogen, including fine structure (not to scale).

← Klofnun með t.t. j

ástöndin $|j\, m_j\rangle$ verður að skrifa sem samantekt af $|l\, m_l\rangle|s\, m_s\rangle$ með Clebsch-Gordan stuðlum

(1)

Hrif Zeemans

Ytra segulsvið hefur áhrif á hreyfingu rafeindar í vetnisatómi. Fyrir svið á tilraunastofu 0-20T eru áhrifin mest á hverfiþunga-byggingu ástandanna. Í efni með virkan rafeindamassa miklu minni en m_e eru veruleg áhrif á alla brautarhreyfinguna, líka r-þáttinn.

Línuleg áhrif $\bar{B}_{ext}$, (B^2-hrifum sem meðal annars leiða til Landau-stiga er sleppt hér)

$$H'_Z = -(\bar{\mu}_\ell + \bar{\mu}_s)\cdot \bar{B}_{ext}$$

$$\bar{\mu}_s = -\frac{e}{m}\bar{S} \qquad \bar{\mu}_\ell = -\frac{e}{2m}\bar{L}$$

(2)

Áður voru áhrif innra sviðs (vegna hreyfingar m.t.t. kjarnans) sem valda braut-spuna víxlverkun.

Ef $B_{ext} \ll B_{int}$ $\rightarrow$ þá er Zeeman hrifin lítil leiðrétting ofan á fínuppbygginguna

$B_{ext} \sim B_{int}$ $\rightarrow$ 1. stigs leiðrétting á margföldum ástöndum í hlutrúmi
⋮

$B_{ext} \gg B_{int}$ $\rightarrow$ Zeeman hrifin eru grunnhrifin með fínbygginguna ofan á sem litla truflun

(3)

Veik Zeemanhrif

$B_{ext} \ll B_{int}$

Góðar skammtatölur

n, ℓ, j, m_j en ekki m_ℓ og m_s

Munum að orkurófið með fínuppbyggingunni var

$$E_{nj} = -R_y\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

Óháð m_j, ástöndin eru margföld í m_j

Zeeman-truflunin mun eyða m_j-margfeldninni

$$E^1_Z = \langle n\ell j m_j | H'_Z | n\ell j m_j\rangle$$
$$= \frac{e}{2m}\bar{B}_{ext}\cdot\langle \bar{L} + 2\bar{S}\rangle$$

Hér er venja að skala orkuna á annan hátt, en

$$E^1_Z = \frac{\hbar}{2}\left(\frac{eB_{ext}}{m}\right)\frac{\bar{B}_{ext}}{B_{ext}}\cdot\frac{\langle \bar{L}+2\bar{S}\rangle}{\hbar}$$

$$= \hbar\omega_c \cdot \hat{z}\cdot \frac{\langle \bar{L}+2\bar{S}\rangle}{\hbar}\cdot\frac{1}{2}$$

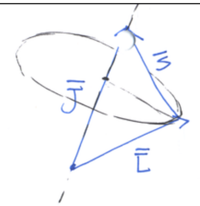
t.d.

Sígild tíðni hringhreyfingar

(4)

þurfum að reikna

$$\langle \bar{L} + 2\bar{S}\rangle$$



$$\bar{L} = \bar{J} - \bar{S}$$
$$\rightarrow \bar{L} + 2\bar{S} = \bar{J} + \bar{S}$$

Höfum engar góðar lýsingar á $\langle \bar{S}\rangle$, en

$$\bar{S}_{ave} = \frac{(\bar{S}\cdot\bar{J})}{J^2}\bar{J}$$

meðal ofanvarp $\bar{S}$ á $\bar{J}$

$\bar{S}\cdot\bar{J}$ fæst líka frá $\bar{L} = \bar{J} - \bar{S}$ með

$$L^2 = J^2 + S^2 - 2\bar{J}\cdot\bar{S}$$

$$\rightarrow \bar{S}\cdot\bar{J} = \frac{1}{2}\left(J^2 + S^2 - L^2\right)$$
$$= \frac{\hbar^2}{2}\left\{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)\right\}$$

Og því

$$\langle \vec{L}+2\vec{S}\rangle = \langle \vec{J}+\vec{S}\rangle$$

$$= \left\langle \left(1+\frac{\vec{S}\cdot\vec{J}}{J^2}\right)\vec{J}\right\rangle$$

$$= \underbrace{\left[1+\frac{j(j+1)-l(l+1)+\frac{3}{4}}{2j(j+1)}\right]}_{\text{Landé g-stuðull}} \langle \vec{J}\rangle$$

$$\rightarrow E_Z^1 = \mu_B g_J B_{ext}\, m_J$$

þegar við setjum $\vec{B}_{ext} = B_{ext}\hat{z}$

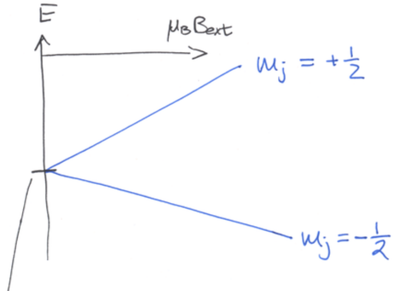
$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 5.788\cdot 10^{-5}\,\mathrm{eV/T}$$

Bohr segulvægiseining

Grunnástandið $(n=1, l=0, j=\tfrac{1}{2})$

$\rightarrow g_J = 2$

Klofnar í tvö stig



$$-Ry\left(1+\frac{\alpha^2}{4}\right) \pm \mu_B B_{ext}$$

Sterkt Zeeman hrif

$$B_{ext} \gg B_{int}$$

$$\vec{B}_{ext} = \hat{z}\, B_{ext}$$

Góðar skammtatölur eru n, l, m_l og m_s

{ m_l og m_s eru miðað við z-átt, átt B_{ext}. m_j er það ekki, ekki varðveitt vegna vægis á það }

$$H_Z' = \frac{e}{2m} B_{ext}(L_z + 2S_z)$$

Án fínbyggingar fæst

$$E_{n m_l m_s} = -\frac{Ry}{n^2} + \mu_B B_{ext}\{m_l + 2m_s\}$$

Með fínbyggingu

Sama E_r^1 og áður fyrir spunabraut fæst

$$\langle \vec{S}\cdot\vec{L}\rangle = \underbrace{\langle S_x\rangle\langle L_x\rangle + \langle S_y\rangle\langle L_y\rangle}_{=0} + \langle S_z\rangle\langle L_z\rangle$$

$$= \hbar^2 m_l m_s$$

$$\rightarrow \boxed{E_{fs}^1 = \frac{Ry}{n^3}\alpha^2\left\{\frac{3}{4n} - \underbrace{\left[\frac{l(l+1)-m_l m_s}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)}\right]}_{=1 \text{ ef } l=0}\right\}}$$

Þegar Zeeman-truflunin er því svipuð um styrk og fs-truflunin þarf að vinna með truflun

$$H' = H_Z' + H_{fs}'$$

á óhnikaða H-atóminu

Fyrir $n=2$ þurfum við að vinna með 8 ástönd

$l=0 \quad (\rightarrow j = \tfrac{1}{2})$

$l=1 \quad \left(j = \tfrac{1}{2} \text{ og } \tfrac{3}{2}\right)$

$$\begin{array}{ll} & \quad\; j\; m_j \qquad\qquad\quad l\; m_l \quad s\; m_s \\ l=0 & \begin{cases} |1\rangle = |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = |0,0\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle \\ |2\rangle = |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = |0,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \end{cases} \\ l=1 & \begin{cases} |3\rangle = |\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\rangle = |1,1\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle \\ |4\rangle = |\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\rangle = |1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \\ |5\rangle = |\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}|1,1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \\ |6\rangle = |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\tfrac{1}{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \\ |7\rangle = |\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}|1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \\ |8\rangle = |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \end{cases} \end{array}$$

Clebsch-Gordan stuðlar

Í þessu hlutrúmi eru fylkjastök H_{fs}' öll á hornalínuformi

Ef $\gamma = \left(\frac{\alpha}{8}\right)^2 Ry$ og $\beta = \mu_B B_{ext}$ þá fæst fyrir

$$-W = \begin{pmatrix} 5\gamma-\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5\gamma+\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma-2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma+2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma-\frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma-\frac{1}{3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma+\frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma+\frac{\beta}{3} \end{pmatrix}$$

Lausnir verða

$$\epsilon_1 = E_2 - 5\gamma + \beta \qquad \epsilon_3 = E_2 - \gamma + 2\beta$$

$$\epsilon_2 = E_2 - 5\gamma - \beta \qquad \epsilon_4 = E_2 - \gamma - 2\beta$$

$$\epsilon_5 = E_2 - 3\gamma + \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 + \frac{2\gamma\beta}{3} + \frac{\beta^2}{4}}$$

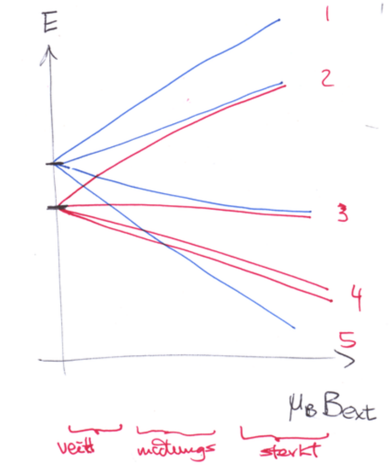
$$\epsilon_6 = E_2 - 3\gamma + \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 + \frac{2\gamma\beta}{3} + \frac{\beta^2}{4}}$$

$$\epsilon_7 = E_2 - 3\gamma - \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 - \frac{2\gamma\beta}{3} + \frac{\beta^2}{4}}$$

$$\epsilon_8 = E_2 - 3\gamma - \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 - \frac{2\gamma\beta}{3} + \frac{\beta^2}{4}}$$

9

Þegar lausnin fyrir lágt og miðlungs B_{ext} er skoðuð koma í ljós 2 4-klofin ástönd



Sterkt svið

$$E_{n m_l m_s} = -\frac{R_y}{n^2} + \mu_B B_{ext}(m_l + 2m_s)$$

$n = 2\,,\quad l = 0, 1$

$$\left.\begin{matrix} m_l = -1, 0, +1 \\ 2m_s = -1, +1 \end{matrix}\right\} \quad m_l + 2m_s = \begin{cases} -2 \\ -1 \\ 0 \\ +1 \\ +2 \end{cases}$$

fimmföld klofnun

10

Ofurfíngerð

Róteindin og rafeindin eru með segulvægi

$$\bar{\mu}_e = -\frac{e}{m_e}\bar{S}_e$$

$$\bar{\mu}_p = \frac{g_p e}{2m_p}\bar{S}_p$$

$g_p \approx 5.59$

Róteindin er samsett eind

Segulvægi veldur líka segulsviði

$$\bar{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3}\left\{3(\bar{\mu}\cdot\hat{r})\hat{r} - \bar{\mu}\right\} + \underbrace{\frac{2\mu_0}{3}\bar{\mu}\,\delta^3(\bar{r})}_{\text{markgildi fyrir punkteind}}$$

Segulvægi róteindar framleiðir segulsvið sem hefur áhrif á segulvægi rafeindar (ekki spuna-brautar víxlverkun)

segulvíxlverkun milli tveggja einda með segulvægi

hrein spunavíxlverkun

11

$$H'_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_e m_p}\left\{\frac{3(\bar{S}_p\cdot\hat{r})(\bar{S}_e\cdot\hat{r}) - \bar{S}_p\cdot\bar{S}_e}{r^3}\right\} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e}\bar{S}_p\cdot\bar{S}_e\,\delta^3(\bar{r})$$

$$\to E'_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e}\left\langle\frac{3(\bar{S}_p\cdot\hat{r})(\bar{S}_e\cdot\hat{r}) - \bar{S}_p\cdot\bar{S}_e}{r^3}\right\rangle + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e}\langle\bar{S}_p\cdot\bar{S}_e\rangle\,|\psi(0)|^2$$

Skoðum grunnástand vetnis

$$|\psi_{100}(0)|^2 = \frac{1}{(\pi a^3)}\,,\quad l = 0$$

þessi liður hverfur vegna kúlusamhverfu

12

$$\to E'_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{3\pi m_p m_e a^3}\langle\bar{S}_p\cdot\bar{S}_e\rangle$$

spunarnir tengjast saman, víxlverka $\to$ heildarspuni varðveitist $\bar{S} = \bar{S}_e + \bar{S}_p$

$$\bar{S}_p\cdot\bar{S}_e = \frac{1}{2}\left(S^2 - S_e^2 - S_p^2\right)$$

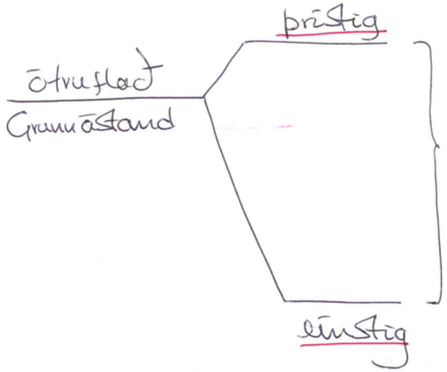
Báðar fermíeindir $\to$ $S_e^2 = S_p^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$

einstig : $s = 0$ $\quad s^2 = 0$

þrístig : $s = 1$ $\quad s^2 = 2\hbar^2$

$$E'_{hf} = \frac{4 g_p \hbar^4}{3 m_p m_e^2 c^2 a^4}\begin{cases} +\frac{1}{4} & \text{þrístig} \\ -\frac{3}{4} & \text{einstig} \end{cases}$$

13



$$\Delta E = \frac{4 g_p \hbar^4}{3 m_p m_e^2 c^2 a^4} \simeq 5.88\cdot 10^{-6}\ \text{eV}$$

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} \simeq 1420\ \text{MHz}$$

Tíðni ljóseindar milli orkustiganna í 1. stigs truflun

$$\frac{c}{\nu} = 21\ \text{cm} \quad \text{örbylgja}$$

1

Tímaháð truflun

Hingað til höfum við aðeins fjallað um tímaóháð mætti

$$V(\vec r,t) = V(\vec r)$$

leyst hreyfijöfnuna

$$i\hbar\partial_t\Phi = H\Phi$$

með aðgreiningu breytistærða

$$\Phi(\vec r,t) = \phi(\vec r)\, e^{-iEt/\hbar}$$

þar sem $\phi(\vec r)$ uppfyllir tímaóháðu jöfnu Schrödingers

$$H\phi = E\phi$$

Eina tímabreytingin sem við höfum séð er þegar upphafsástand kerfis er ekki eiginástand þess

Byrjum að skoða tímaháð mætti með truflanareikningi fyrir mjög einföld kerfi

↑ þægilegt að nota truflanareikning, því mörg hugtök og margt í aðferðafræði okkar var smíðað fyrir tímaóháð kerfi

2

Tvístiga kerfi

Til þess að einfalda umfjöllun okkar og ná betri skilningi á tímaþróun skoðum við tvístiga kerfi.

Ótruflaða og því „ekki tímaháða" kerfið er með tvö eiginástönd

$$H^0|a\rangle = E_a|a\rangle$$
$$H^0|b\rangle = E_b|b\rangle$$
$$\langle a|b\rangle = \delta_{ab}$$

Hvaða ástand sem er má skrifa sem samantekt þessara

$$|\Phi(0)\rangle = C_a|a\rangle + C_b|b\rangle$$

og ef H^0 er óháður tíma þá er tímaþróun þessa ástands

$$|\Phi(t)\rangle = C_a|a\rangle e^{-i\frac{E_a t}{\hbar}} + C_b|b\rangle e^{-i\frac{E_b t}{\hbar}}$$

Við segjum að $|C_a|^2$ séu líkur þess að eindin sé í ástandi a, í raun er $|C_a|^2$ líkurnar á því að orkumæling gefur niðurstöðurnar E_a

stöðlun: $\longrightarrow |C_a|^2 + |C_b|^2 = 1$

3

Þegar kveikt er á truflun

$$H'(t)$$

fæst

$$|\Phi(t)\rangle = C_a(t)|a\rangle e^{-i\frac{E_a t}{\hbar}} + C_b(t)|b\rangle e^{-i\frac{E_b t}{\hbar}}$$

því $\{|i\rangle, i=a,b\}$ er fullkominn grunnur og við gerum ráð fyrir $H'(t)$ sem getur ekki tekið kerfið út fyrir það rúm.

Við viljum ákvarða $C_a(t)$ og $C_b(t)$ með upphafsskilyrðum t.d.

$$C_a(0) = 1, \quad C_b(0) = 0$$

eindin (eða kerfið) er upphaflega í ástandi $|a\rangle$

Ef fyrir síðari tíma t_1 komi í ljós

$$C_a(t_1) = 0$$
$$C_b(t_1) = 1$$

þá segðum við að eindin eða kerfið hafi „farið" á ástand $|b\rangle$

Hér hafa þegar læðst inn truflana hugmyndir, tengdar 1. stigs truflun.

$H'(t)$, jafnvel þó það verki aðeins í takmarkaðan tíma, getur breytt orku kerfisins

↓

Við erum að opna lokaða kerfið okkar

Eftir að truflun hverfur aftur er líklegt að kerfið komist í stöðugt-ástand, sem er ekki líklega eigin ástand H^0

Vert er að hafa í huga að $H^0 + H'(t)$ hefur engin eigin ástönd ⟷ umfjöllun okkar er byggð á truflanareikningi

Hærri meðhöndlun truflunar en 1. stigs (líka stundum nákvæm....) gæti leitt til lýsingar þar sem áhrif H' koma ekki aðeins fram í fordulíkum milli $|a\rangle$ og $|b\rangle$ heldur líka í breikkun orkustiganna og hliðrun þeirra

Skoðum tvístiga kerfið okkar

$$i\hbar\partial_t|\Phi(t)\rangle = H|\Phi(t)\rangle$$

með $\quad H = H^0 + H'$

Reynum lausnina

$$|\Phi(t)\rangle = C_a(t)|a\rangle e^{-i\omega_a t} + C_b(t)|b\rangle e^{-i\omega_b t}$$

þ.s. $\quad \omega_i = \frac{E_i}{\hbar}$

$$i\hbar\Big\{\dot C_a|a\rangle e^{-i\omega_a t} + \dot C_b|b\rangle e^{-i\omega_b t} + C_a|a\rangle(-i\omega_a)e^{-i\omega_a t} + C_b|b\rangle(-i\omega_b)e^{-i\omega_b t}\Big\}$$

$$= C_a H^0|a\rangle e^{-i\omega_a t} + C_b H^0|b\rangle e^{-i\omega_b t} + C_a H'|a\rangle e^{-i\omega_a t} + C_b H'|b\rangle e^{-i\omega_b t}$$

sem einfaldast sem

$$i\hbar\Big\{\dot C_a|a\rangle e^{-i\omega_a t} + \dot C_b|b\rangle e^{-i\omega_b t}\Big\} = C_a H'|a\rangle e^{-i\omega_a t} + C_b H'|b\rangle e^{-i\omega_b t}$$

Innföldum með $\langle a|$

$$\hookrightarrow \quad i\hbar\dot C_a e^{-i\omega_a t} = C_a\langle a|H'|a\rangle e^{-i\omega_a t} + C_b\langle a|H'|b\rangle e^{-i\omega_b t}$$

tökum $\quad H'_{ij} = \langle i|H'|j\rangle, \quad H'_{ji} = (H'_{ij})^*$ hermískur virki

margföldum með $\quad -i\frac{e^{-i\omega_a t}}{\hbar}$:

$$\dot C_a = -\frac{i}{\hbar}\Big\{C_a H'_{aa} + C_b H'_{ab}e^{-i(\omega_b-\omega_a)t}\Big\}$$

Samskonar meðhöndlun leiðir til

$$\dot C_b = -\frac{i}{\hbar}\Big\{C_b H'_{bb} + C_a H'_{ba}e^{+i(\omega_b-\omega_a)t}\Big\}$$

Skilgreinum tíðnina

$$\omega_0 = \frac{E_b - E_a}{\hbar}$$

gerum ráð fyrir að $E_b > E_a$ þó það sé ekki nauðsynlegt

þá erum við með

$$\boxed{i\hbar\partial_t\begin{pmatrix} C_a \\ C_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H'_{aa} & H'_{ab}e^{-i\omega_0 t} \\ H'_{ba}e^{i\omega_0 t} & H'_{bb} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_a \\ C_b \end{pmatrix}}$$

Jafngilda jöfnu Schrödingers fyrir tvístiga kerfið okkar án nálgunar

Við munum oftast vinna með kerfi sem uppfylla að $H'_{aa} = 0$ og $H'_{bb} = 0$

Truflanaröð

Við getum heildað jöfnuna

Skrifum hana fyrst sem

$$i\hbar\, d_t \bar{C}(t) = \underbrace{\mathbb{H}'}_{\text{fylki}}\, \underbrace{\bar{C}(t)}_{\text{vigur}}$$

heildun gefur

$$i\hbar \int_0^t dt'\, d_{t'} \bar{C}(t') = \int_0^t dt'\, \mathbb{H}'(t') \bar{C}(t')$$

$$i\hbar \left\{ \bar{C}(t) - \bar{C}(0) \right\} = \int_0^t dt'\, \mathbb{H}'(t') \bar{C}(t')$$

eða

$$\boxed{\bar{C}(t) = \bar{C}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t ds\, \mathbb{H}'(s) \bar{C}(s)}$$

Volterra heildisjafna af annarri tegund

Þær má leysa með Laplace ummyndun, samleitinni Fredholm röð, eða Neumann röð.

Eins má leysa þær með fallagrunni, eða tímaneti sem algebrískar jöfnur

$$Ax = b$$

Neumann röð fæst með ítrun jöfnunnar

0. stigs

$$\bar{C}^{(0)}(t) = \bar{C}(0)$$

1. stigs

$$\bar{C}^{(1)}(t) = \bar{C}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t ds\, \mathbb{H}'(s) \bar{C}^{(0)}(s) = \left\{ 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t ds\, \mathbb{H}'(s) \right\} \bar{C}(0)$$

2. stigs

$$\bar{C}^{(2)}(t) \qquad \left\{ 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t ds\, \mathbb{H}'(s) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t ds \int_0^s du\, \mathbb{H}'(s) \mathbb{H}'(u) \right\} \bar{C}(0)$$

Ef $H'_{aa} = 0$ og $H'_{bb} = 0$

og $C_a(0) = 1$, $C_b(0) = 0$, $\bar{C}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

þá verður þetta

0. stigs

$$\left. \begin{aligned} C_a^{(0)}(t) &= 1 \\ C_b^{(0)}(t) &= 0 \end{aligned} \right\} \text{engin breyting}$$

1. stigs

$$\left. \begin{aligned} C_a^{(1)}(t) &= 1 \\ C_b^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds\, H'_{ba}(s) e^{i\omega_0 s} \end{aligned} \right\} \text{leyst beint úr jöfnunum á síðu 9}$$

2. stigs

$$C_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t ds \int_0^s du\, H'_{ab}(s) H'_{ba}(u)\, e^{-i\omega_0 (s-u)}$$

$$C_b^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds\, H'_{ba}(s)\, e^{i\omega_0 s} \qquad \leftarrow \text{sama og } C_b^{(1)}$$

$$|C_a^{(1)}(t)|^2 + |C_b^{(1)}(t)|^2 \neq 1, \text{ en } = 1$$ ef 2. stigs liðum í H' er sleppt

Við munum síðan beita þessum truflanareikningi á vel þekkt kerfi

Samleitni Neumann raðar er ekki tryggð

Mjög athyglisvert að bera saman niðurstöður truflanareikn. og nákvæmar

Hreintóna truflun

Skoðum áhrif truflunar

$$H'(\vec{r},t) = V(\vec{r})\cos(\omega t)$$

þ.a.

$$H'_{ab} = V_{ab}\cos(\omega t)$$

þar sem

$$V_{ab} = \langle a|V|b\rangle$$

Ekki alveg hreintóna því hér er kveikt á truflun þ. $t=0$

Hörð – mjúk ákveiking

. . . . . .

Beitum 1. stigs truflun og gerum ráð fyrir að $V_{aa}=0$, $V_{bb}=0$

Upphafsskilyrðin voru

$$C_a(0)=1\,,\quad C_b(0)=0$$

$$C_b(t) \simeq -\frac{i}{\hbar}\int_0^t ds\, H'_{ba}(s)\, e^{i\omega_0 s}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}V_{ba}\int_0^t ds\, \cos(\omega s)\, e^{i\omega_0 s}$$

$$= -\frac{iV_{ba}}{2\hbar}\int_0^t ds\left\{e^{i(\omega_0+\omega)s}+e^{i(\omega_0-\omega)s}\right\}$$

$$= -\frac{V_{ba}}{2\hbar}\left\{\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t}-1}{\omega_0+\omega}+\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{\omega_0-\omega}\right\}$$

Við viljum athuga viðbrögð kerfisins nærri hermu þegar $\omega\sim\omega_0 \longrightarrow \omega_0+\omega >> |\omega_0-\omega|$

Sérstaklega ef við erum að hugsa um ω_0 sem samsvarar sýnilegu ljósi (yfir í innrautt)

$$\to C_b(t) \simeq -\frac{V_{ba}}{2\hbar}\left\{\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{\omega_0-\omega}\right\}$$

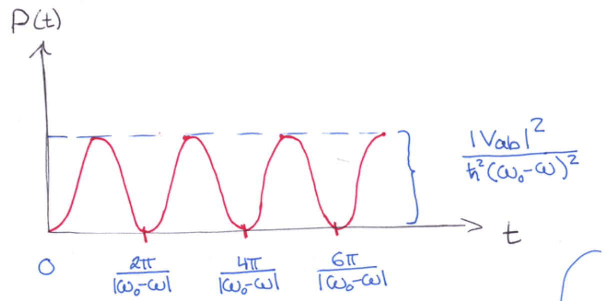
hermuliður, hinn liðurinn er andhermuliður

$$= -\frac{V_{ba}}{2\hbar}\frac{e^{i(\omega_0-\omega)\frac{t}{2}}}{\omega_0-\omega}\left\{e^{i(\omega_0-\omega)t/2}-e^{-i(\omega_0-\omega)t/2}\right\}$$

$$= -i\frac{V_{ba}}{\hbar}\frac{\sin\left[\frac{(\omega_0-\omega)t}{2}\right]}{\omega_0-\omega}\,e^{i(\omega_0-\omega)\frac{t}{2}}$$

Því fæst fyrir færslulíkurnar

$$\boxed{P_{a\to b}(t) = |C_b(t)|^2 \simeq \frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2\left[\frac{(\omega_0-\omega)t}{2}\right]}{(\omega_0-\omega)^2}}$$



$\frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2(\omega_0-\omega)^2} << 1$ vegna truflanareiknings, lítil truflun

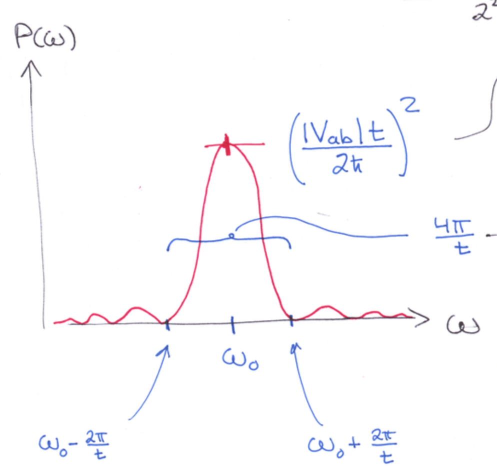
Þetta er líka eiginleiki nákvæmu lausnarinnar, en með hliðraðri tíðni „Rabi flopping"

Líkindi færslu eru lotubundin

Því mætti hugsa sér að hámarka færslulíkindi með því að stöðva truflun á réttu augnabliki

Hvað með hermunálgunina?

$$P_{a\to b}(t) \simeq \frac{|V_{ab}|^2 t^2}{(2\hbar)^2}\;\frac{\sin^2\left[\frac{(\omega_0-\omega)t}{2}\right]}{\frac{(\omega_0-\omega)^2t^2}{2^2}}$$



vex endalaust með tímanum, en truflanalýsingin er ekki gild löngu áður en hæðin verður 1

toppur þrengist með tímanum

$$\boxed{\text{Niðurstöðunum er aðeins hægt að treysta í skamman tíma}}$$

Víxlverkun við rafsegulbylgju

5

fyrir langbylgjunálgun

$\lambda >> a$: Bohr geisli

sýnilegt ljós . . . .

og veikt rafsegulsvið víxlverkast rafeind í atómi aðallega við rafsviðshluta bylgjunnar.

Skoðum bylgju í $\hat{z}$-stefnu með línulega skautað rafsvið

$$\vec{E} = E_0 \cos(\omega t) \cdot \hat{z}$$

Víxlverkunarliðinn, truflunina má þá nálga með

$$H' = -q E_0 z \cos(\omega t)$$

hleðsla rafeindar

Víxlverkunin er við rafstöðumættið V þ.e. $H' = qV$

því fáum við

$$H'_{ba} = -\wp E_0 \cos(\omega t)$$

$\hookrightarrow \wp = q\langle b|z|a\rangle$

tvískautsvægi

Síðar sjáum við að

$$\wp = q\langle b|z|a\rangle$$

setur kvaðir á fjölda möguleika vegna samhverfu

$\updownarrow$

valreglur

Eins sést að útlit $\wp$ er afstaða þess að við gerum ráð fyrir að hornalínustök H' hverfi

Ísog, örvuð geislun og sjálfgeislun

6

Við byrjuðum með $\bar{c}(0) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

Eindin eða kerfið er í ástandi $|a\rangle$, ástand $|b\rangle$ er ósetið, $C_a(0)=1$, $C_b(0)=0$

Fordúna með líkunum

$$P_{a\to b}(t) = \left(\frac{|\wp| E_0}{\hbar}\right)^2 \frac{\sin^2\left[\frac{(\omega_0-\omega)t}{2}\right]}{(\omega_0-\omega)^2}$$

má túlka sem ísog orku $E = \hbar\omega \approx \hbar\omega_0 = (E_b - E_a)$. Ef við værum með skammtaða rafsegulfræði, gætum við sagt ísog ljóseindar

7

Ef við byrjum með eindina eða kerfið í örvuðu ástandi,

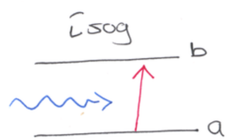
$C_a(0) = 0$ og $C_b(0) = 1$

þá fengjum við alveg sömu niðurstöðurnar

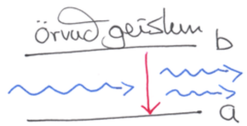
$$P_{b\to a}(t) = P_{a\to b}(t)$$

> Rafsegulbylgjan veldur bæði ísogi orku og örvar geislun hennar

ísog

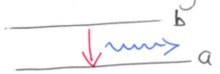


örvuð geislun



þess vegna er ljósmögnun til

Til viðbótar kemur sjálfgeislun



vegna núllpunktsflökt skammtaðs rafsegulsviðs

sviðið hverfur aldrei alveg

$\to$ öll geislun er örvuð geislun

Dofnun

8

Okkar 1. stigs truflun sýnir að við getum aðeins lýst kerfinu í skamman endanlegan tíma.

Sama gildir um næstu stig truflanareiknings

Litrófslínur hafa breidd, sem í öfugu hlutfalli við líftíma örvaða ástandsins. Orka þeirra hliðrast líka.

Líftíminn eða meðalævi gæti komið fram sem dofnun

$$e^{-\Gamma t}$$

þegar $t \to \infty$

þar sem engin góð ráð er til sem lýsir þannig dofnun fyrir $t \to \infty$ er ljóst að þessir eiginleikar atómkerfa í tengslum við rafsegulsvið eða hvít verða ekki lýst með truflanareikningi

því þarf aðrar aðferðir þar, sjá

Wigner-Weißkopf - líkanið

Heitler-Ma — -||-

Nakajima-Zwanzig

skammtaljósfr. opin kerfi . . .

Ósamfasa truflanir

Orkuþéttni rafsegulbylgju er

$$u = \frac{\epsilon_0 E^2}{2} + \frac{B^2}{2\mu_0}$$

Þetta má umskrifa

$$u = \frac{\epsilon_0 E_0^2}{2}$$

þegar E- og B-þættir eru teknir í meðaltalo yfir eina lotu. Því er

$$P_{b\to a}(t) = \frac{2u}{\epsilon_0\hbar^2}|\wp|^2 \frac{\sin^2\left[\frac{(\omega_0-\omega)t}{2}\right]}{(\omega_0-\omega)^2}$$

Þetta gildir fyrir eina tíðni ω

Við búumst við að kerfið verði fyrir rafsegulgeislun með tíðni rófi þ.a.

$$u \to \underbrace{\rho(\omega)d\omega}$$

orkuþéttnin á tíðnibilinu $d\omega$

og

$$P_{b\to a}(t) = \frac{2}{\epsilon_0\hbar^2}|\wp|^2 \int_0^\infty d\omega\, \rho(\omega)\left\{\frac{\sin^2\left[\frac{(\omega_0-\omega)}{2}t\right]}{(\omega_0-\omega)^2}\right\}$$

Gerum ráð fyrir að tíðnirófið sé mjög breitt (flatt), en fallið innan heildisins er með mjög sterkan topp í $\omega \approx \omega_0$. Því fæst

$$P_{b\to a}(t) \simeq \frac{2|\wp|^2}{\epsilon_0\hbar^2}\rho(\omega_0)\int_0^\infty \frac{\sin^2\left[\frac{(\omega_0-\omega)}{2}t\right]}{(\omega_0-\omega)^2}d\omega$$

heildið má meta með

$$\int_0^\infty \cdots\cdots \to \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \pi$$

$$\to P_{b\to a}(t) \simeq \frac{\pi|\wp|^2}{\epsilon_0\hbar^2}\rho(\omega_0)t$$

Afleiðing 1. stigs truflunar að $P_{a\to b}$ vex án takmarkana með t

Hér er slátturinn (flopping) týndur, líðast í burtu þegar kerfið er örvað með breiðu tíðnirófi rafsegulbylgna

forskuhraðinn $R \equiv \frac{dP}{dt}$ verður fasti

$$R_{b\to a} = \frac{\pi}{\epsilon_0\hbar^2}|\wp|^2\rho(\omega_0)$$

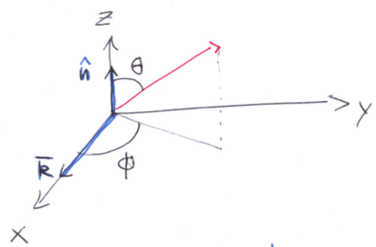
Viljum geta haft bylgjurnar úr öllum áttum, þ.a. í stað $|\wp|^2$ komi meðaltal $|\bar\wp\cdot\hat n|^2$

þ.s.

$$\bar\wp \equiv q\langle b|\bar r|a\rangle$$

meðaltal

Kúluhnit, bylgjan berst $\hat{k}$-stefnu, $\hat n$ er samsíða $\hat z$, og $\bar\wp$ skilgreinir hornin θ og φ



$\bar\wp$ er fast og meðaltalið er yfir öll $\hat k$ og $\hat n$ þ.a. $\hat k \perp \hat n$ → yfir θ og ϕ

$$\bar\wp\cdot\hat n = \wp\cos\theta$$

$$|\bar\wp\cdot\hat n|^2_{ave} = \frac{1}{4\pi}\int \sin\theta\, d\theta\, d\phi\, |\bar\wp|^2\cos^2\theta$$

$$= \frac{|\bar\wp|^2}{4\pi}\left(-\frac{\cos^3\theta}{3}\right)\Big|_0^\pi (2\pi) = \frac{1}{3}|\bar\wp|^2$$

→ Forskuhraði örvaðrar forsku $b\to a$ vegna víxlverkunar við ósamfasa, óskautaðs ljóss úr öllum áttum er

$$\boxed{R_{b\to a} = \frac{\pi}{3\epsilon_0\hbar^2}|\bar\wp|^2\rho(\omega_0)}$$

Sértilfelli af gullnu reglu Fermis

Valreglur

Forsendur voru alltaf háðar $\langle a|F|b\rangle$

Nálgunin fyrir víxlverkunina notaða hér milli rafeindar og ljóss er tvískauts-nálgun.

Þegar tillit er tekið til breytingar rafsegulsviðsins í staðarrúminu koma í ljós hærri stigs liðir

Raf fjórskaut, segul tvískaut og segul fjórskaut......

Allir þessir liðir hafa mism. fylkjastök

Við skoðum eiginleika raftvískauts fylkjastaksins hér. Það er mjög oft 0

→ þá eru færslur milli $|a\rangle$ og $|b\rangle$ bannaðar í fyrsta stigs nálgun

↓

Valreglur fyrir færslur

(1)

Til eru mjög almennar reglur t.þ.a. reikna fylkjastök

Wigner-Eckhart setning,

en við skoðum kúlusamhverfu fyrir einfalda ástönd atóms

$$\langle n'l'm'|\vec r|nlm\rangle$$

m og m'

$$[L_z,x]=i\hbar y,\quad [L_z,y]=-i\hbar x$$

$$[L_z,z]=0$$

$$0=\langle n'l'm'|[L_z,z]|nlm\rangle$$

$$=\langle n'l'm'|(L_z z-zL_z)|nlm\rangle$$

$$=\langle n'l'm'|(m'\hbar z-zm\hbar)|nlm\rangle$$

$$=(m'-m)\hbar\langle n'l'm'|z|nlm\rangle$$

→ annaðhvort $m=m'$ eða $\langle n'l'm'|z|nlm\rangle=0$

$\hookrightarrow$ $\langle n'l'm'|z|nlm\rangle=0$ ef $m\neq m'$

$$\langle n'l'm'|[L_z,x]|nlm\rangle$$

$$=(m'-m)\hbar\langle n'l'm'|x|nlm\rangle$$

$$=i\hbar\langle n'l'm'|y|nlm\rangle$$

→ $(m'-m)\langle n'l'm'|x|nlm\rangle=i\langle n'l'm'|y|nlm\rangle$

eins fæst

$$(m'-m)\langle n'l'm'|y|nlm\rangle=-i\langle n'l'm'|x|nlm\rangle$$

$\hookrightarrow$ annaðhvort $(m'-m)^2=1$ eða

$\langle n'l'm'|x|nlm\rangle=\langle n'l'm'|y|nlm\rangle=0$

(2)

→ $\boxed{\text{Aðeins færslur með } \Delta m=\pm 1 \text{ eða } 0}$

Tvískautsfærslur

Raftvískaut

Eins er sýnt í kennslubókinni að fyrir sömu færslur verður að gilda að

$$\boxed{\Delta l=\pm 1}$$

Liðir með hærri skauta nálgun koma með aðrar valreglur, en eru almennt veikari eftir því sem stig skautsins er hærra

Færsla sem er bönnuð 1. stig rafskauts færsla getur verið leyfð sem 1. stigs segultvískauts eða raf fjórskauts færsla

NMR-færslur — segultvískaut

Grænu línan í norðurljósum er raf fjórskauts færsla með $\Delta l=2$

(3)

Skoðum dæmi þar sem nákvæm lausn er möguleg

$$a^\dagger=a_+,\quad a=a_-$$

$H_0=\hbar\omega(a^\dagger a+\frac{1}{2})$ hreintóna sveifill

með þekkt ástönd og róf

$$E_n=\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2}),\quad n=0,1,2,\dots$$

Gerum ráð fyrir tímaháðri truflun

$$H'(t)=\hbar\Omega(a^\dagger+a)\Theta(t)$$

Heaviside þrepafallið

$$\Theta(t)=\begin{cases}0 & \text{ef } t<0\\ 1 & \text{ef } t>0\end{cases}$$

Kveikt er á truflunini klukkan $t=0$ → þess vegna tímaháð truflun, $x\sim a^\dagger+a$ → ytra rafsvið

Ef truflunin væri alltaf til staðar þá er ekkert tímaháð og við getum reiknað nýja orkuróf og ástöndin með tímaóháðum truflanareikningi

Stark-hrif

$$E_n^{(1)}=0,\quad E_n^{(2)}\neq 0$$

↑

Vegna samhverfu

$$E_n^{(1)}\sim\langle n|x|n\rangle=0$$

(4)

Ef við finnum nákvæma tímaháða lausn hljótum við að sjá hvernig truflanareikningur bregst þ. truflanarstofnin stækkar

Viljum leysa

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = (H_0+H'(t))|\Psi(t)\rangle$$

með upphafsskilyrðum

$$|\Psi(0)\rangle = |0\rangle$$

$$H = H_0 + \lambda(a^\dagger+a)\hbar\omega$$

ef $t\geq 0$ og $\lambda = \frac{\hbar\Omega}{\hbar\omega}$

Vitum að í afsviðið veldur hliðrun eindar, reynum því hliðrunarvirkjann

$$U(-\lambda) = e^{\lambda(a-a^\dagger)}$$

Athugum aðeins, almennt gildir

$$e^{\lambda A}Be^{-\lambda A} = B + \lambda[A,B] + \frac{\lambda^2}{2!}[A,[A,B]] + \dots\dots$$

$$[a-a^\dagger, a] = -[a^\dagger, a] = 1$$

$\rightarrow$

$$U(-\lambda)aU^\dagger(-\lambda) = a+\lambda$$

$$U(-\lambda)a^\dagger U^\dagger(-\lambda) = a^\dagger+\lambda$$

því fæst

$$U(-\lambda)H_0U^\dagger(-\lambda) = H_0 + \lambda\hbar\omega(a^\dagger+a) + \lambda^2\hbar\omega = H + \lambda^2\hbar\omega$$

Við höfum fundið ummyndun milli H_0 og H, fyrir utan fasta

Veljum því

$$|\Psi(t)\rangle = |\phi(t)\rangle e^{i\lambda^2\omega t}$$

og reynum í hreyfijöfnunni

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = (H_0+H'(t))|\Psi(t)\rangle$$

$$i\hbar\left\{\partial_t|\phi(t)\rangle + i\lambda^2\omega|\phi(t)\rangle\right\}e^{i\lambda^2\omega t} = \left\{H_0+\lambda\hbar\omega(a^\dagger+a)\right\}|\phi(t)\rangle e^{i\lambda^2\omega t}$$

$$= \left\{U(-\lambda)H_0U^\dagger(-\lambda) - \lambda^2\hbar\omega\right\}|\phi(t)\rangle e^{i\lambda^2\omega t}$$

$$\rightarrow i\hbar\partial_t|\phi(t)\rangle = U(-\lambda)H_0U^\dagger(-\lambda)|\phi(t)\rangle$$

eða margfalda með $U^\dagger(-\lambda)$ frá vinstri gefur

$$\boxed{i\hbar\partial_t|\alpha(t)\rangle = H_0|\alpha(t)\rangle, \quad |\alpha(t)\rangle = U^\dagger(-\lambda)|\phi(t)\rangle}$$

þetta er jafnan fyrir einfaldan hreintóna sveifil við þekkjum lausnir hennar og tímaþróun

$$\rightarrow |\alpha(t)\rangle = \sum_n C_n e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$$

Við viljum finna $|\Psi(t)\rangle$ og verðum því að ummynda til baka

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\lambda^2\omega t}|\phi(t)\rangle = e^{i\lambda^2\omega t}U(-\lambda)|\alpha(t)\rangle = e^{i\lambda^2\omega t}U(-\lambda)\sum_n C_n e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$$

(Við áttum líka eftir að finna C_n-in samkvæmt upphafsskilyrðum)

En fyrst þurfum við að nota eina mikilvæga virkjasetn. enn

Ef $[A,[A,B]] = 0$ og $[B,[A,B]] = 0$

$$\rightarrow e^{A+B} = e^Ae^Be^{-\frac{1}{2}[A,B]} = e^Be^Ae^{+\frac{1}{2}[A,B]}$$

$$U(-\lambda) = e^{-\lambda(a^\dagger-a)} = e^{-\lambda a^\dagger}e^{\lambda a}e^{-\lambda^2/2} = e^{\lambda a}e^{-\lambda a^\dagger}e^{\lambda^2/2}$$

$\rightarrow$ Vitum að $|\Psi(0)\rangle = |0\rangle$, finnum C_n

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\lambda^2\omega t}U(-\lambda)|\alpha(t)\rangle$$

$$\rightarrow |\Psi(0)\rangle = U(-\lambda)|\alpha(0)\rangle$$

$$\rightarrow |0\rangle = U(-\lambda)|\alpha(0)\rangle$$

$$|\alpha(0)\rangle = U^{+}(-\lambda)|0\rangle$$
$$= e^{\lambda a^{+}} e^{-\lambda a}|0\rangle e^{-\lambda^2/2}$$
$$= \underbrace{e^{\lambda a^{+}}|0\rangle}\, e^{-\lambda^2/2}$$
$$= e^{-\lambda^2/2}\left\{\sum_n \frac{(\lambda a^{+})^n}{n!}\right\}|0\rangle$$
$$= e^{-\lambda^2/2}\left\{\sum_n \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\underbrace{\frac{(a^{+})^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle}\right\}$$
$$= e^{-\frac{\lambda^2}{2}}\sum_n \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

Þetta kallast samfasa ástand, sem það eigið eftir að læra um síðar

En við höfðum líka

$$|\alpha(0)\rangle = \sum_n C_n|n\rangle$$

$$\rightarrow \quad \boxed{C_n = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}e^{-\lambda^2/2}}$$

$$|\alpha(t)\rangle = \sum_n \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle e^{-\lambda^2/2}$$
$$= \sum_n \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}|n\rangle e^{-\lambda^2/2}$$
$$= e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{\lambda^n e^{-i\omega n t}}{\sqrt{n!}}|n\rangle e^{-\lambda^2/2}$$
$$= e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle e^{-\lambda^2/2}$$

(9)

og að lokum

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\lambda^2\omega t - \lambda^2/2}\, U(-\lambda)\, e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

Nú getum við spurt t.d. hverjar eru líkur þess að eindin haldist í $|0\rangle$? Viljum þá reikna $\langle 0|\psi(t)\rangle$

Notum þar að $\quad \langle 0|U(-\lambda) = e^{-\lambda^2/2}\sum_m \frac{\lambda^m}{\sqrt{m!}}\langle m|$

$$\rightarrow \langle 0|\psi(t)\rangle = e^{-\lambda^2} e^{i\lambda^2\omega t - i\omega t/2} \sum_{nm} \frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n \lambda^m}{\sqrt{m!\,n!}}\langle m|n\rangle$$
$$= e^{-\lambda^2} e^{i\omega(\lambda^2-\frac{1}{2})t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda^2 e^{-i\omega t})^n}{n!} = e^{-\lambda^2 + i\omega(\lambda^2-\frac{1}{2})t}\exp\{\lambda^2 e^{-i\omega t}\}$$
$$= e^{i\omega(\lambda^2-\frac{1}{2})t}\exp\{\lambda^2(e^{-i\omega t}-1)\}$$

(10)

Því getum við fundið

$$|\langle 0|\psi(t)\rangle|^2 = \exp\{\lambda^2(e^{i\omega t}-1)+\lambda^2(e^{-i\omega t}-1)\}$$
$$= \exp\{-2\lambda^2+\lambda^2(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})\}$$
$$= \exp\{-2\lambda^2+2\lambda^2\cos(\omega t)\}$$
$$= \exp\{-2\lambda^2(1-\cos(\omega t))\}$$
$$= \exp\left\{-4\lambda^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)\right\}$$

$$\rightarrow \boxed{P_{0\to 0}(t) = |\langle 0|\psi(t)\rangle|^2 = \exp\left\{-4\lambda^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)\right\}}$$

$$P_{0\to \text{ekki } 0}(t) = 1 - P_{0\to 0}(t)$$
$$= 1 - \exp\left\{-4\lambda^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)\right\}$$

Liðun gefur röð

$$P_{0\to 0}(t) \xrightarrow[\lambda\to 0]{} 1 - 4\lambda^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) + 8\lambda^4\sin^4\left(\frac{\omega t}{2}\right) - \frac{32}{3}\lambda^6\sin^6\left(\frac{\omega t}{2}\right) + O(\lambda^8)$$

(11)

* Endanleg truflanaröð getur leitt til líkinda sem verða stærri en 1 eða minni en 0 þegar λ verður stórt

* Nákvæm lausn og truflanalausnir sýna „Rabi slátt"

fyrir veika truflun er sláttur nákvæmu lausnarinnar nærri því að fylgja $1-4\lambda^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$, en fyrir sterka truflun verða sveiflurnar mjög ósamhverfar

↳ Sterk truflun → eindin er mest af tímanum utan $|0\rangle$-ástandsins, enda mörg ástönd til þess að eyða tíma í

* Enginn raunverulegur líftími getur sést í þessu kerfi. Ástöndin eru teljanlega mörg, því mun kerfið alltaf geta komið aftur í upphafsástand, sérstakt orkuróf ↔ jafndreift veldur því að Rabi-tíðnin er ekki hliðruð

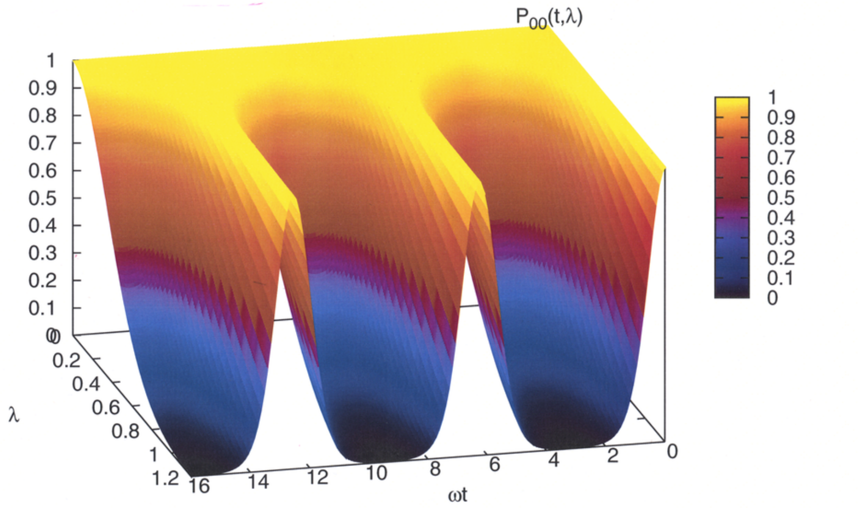
(12)

13

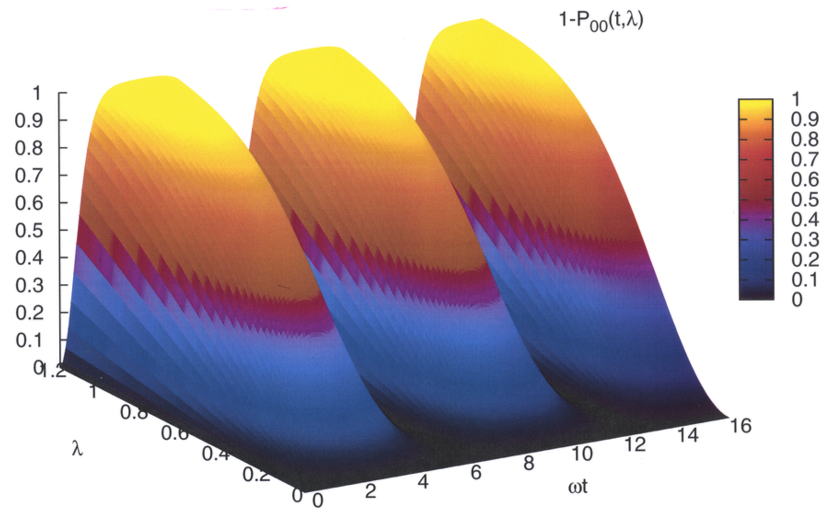
* Til þess að finna „meðalævi" þarf sérhver þáttur kerfisins að hafa samfelld orkuástönd -> endurkomutími kerfis verður óendanlegur

* Með rófsvíddinni kemur vorka inn í kerfið -> blandað ástand

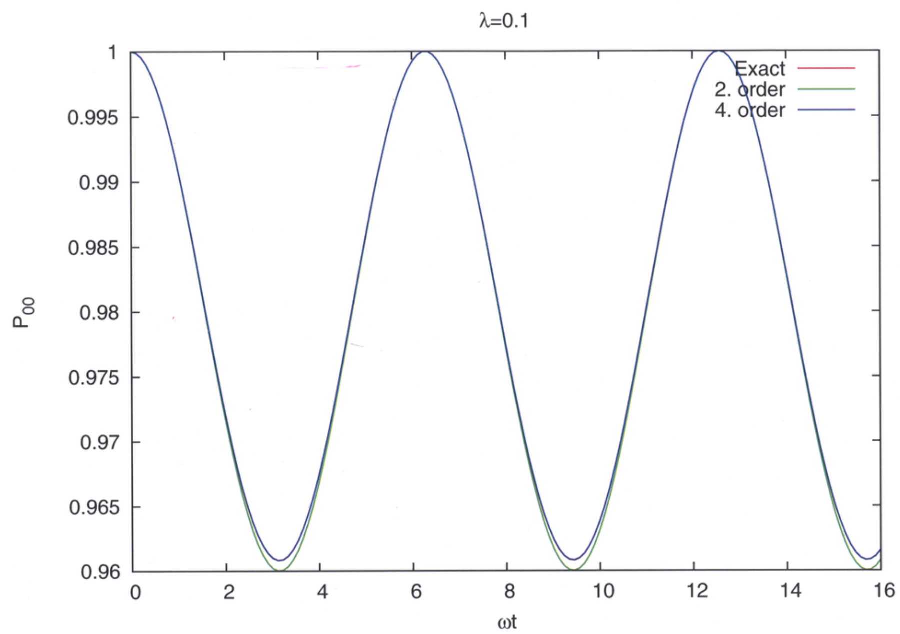
14



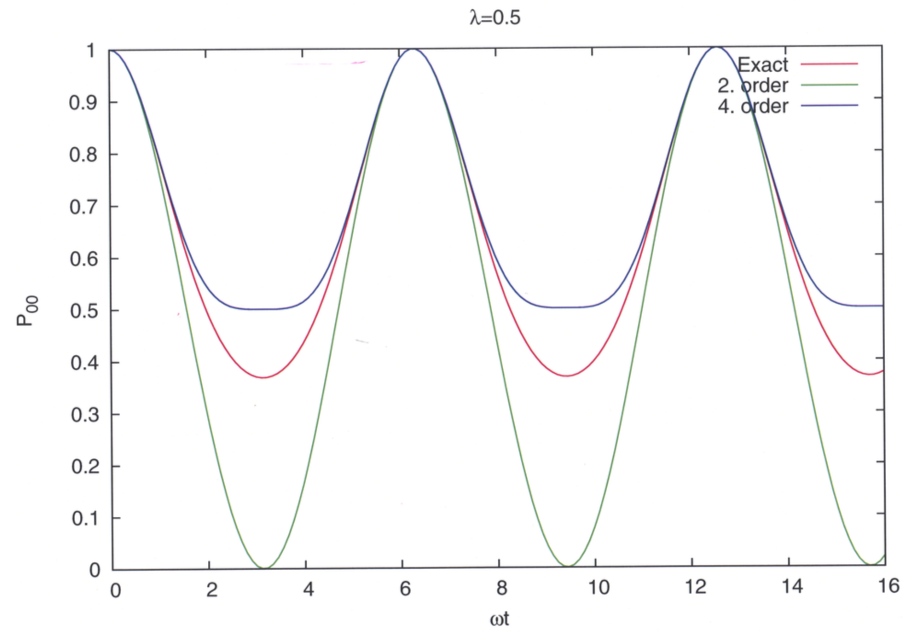
15



16

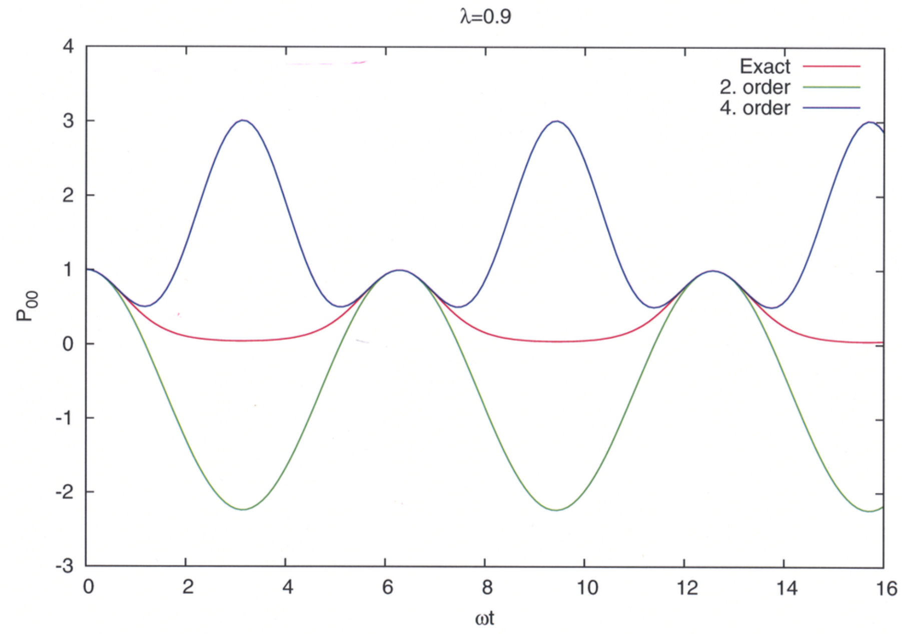


(17)



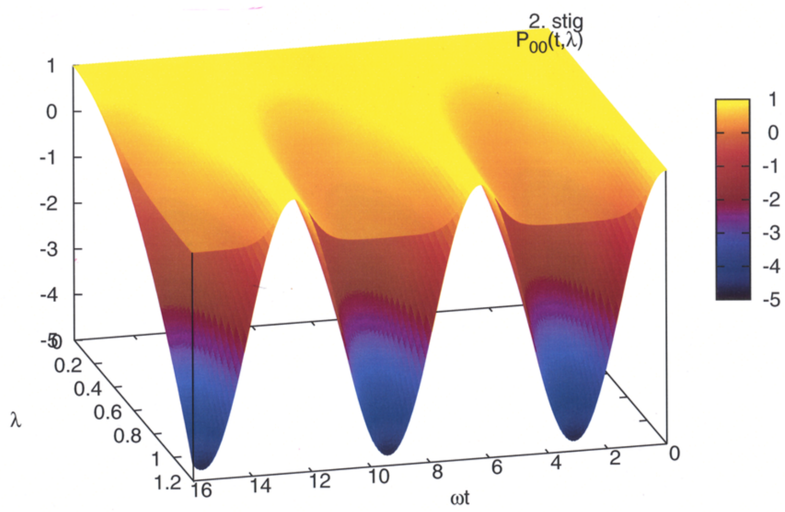
λ=0.5
Exact
2. order
4. order
P_{00}
ωt

(18)



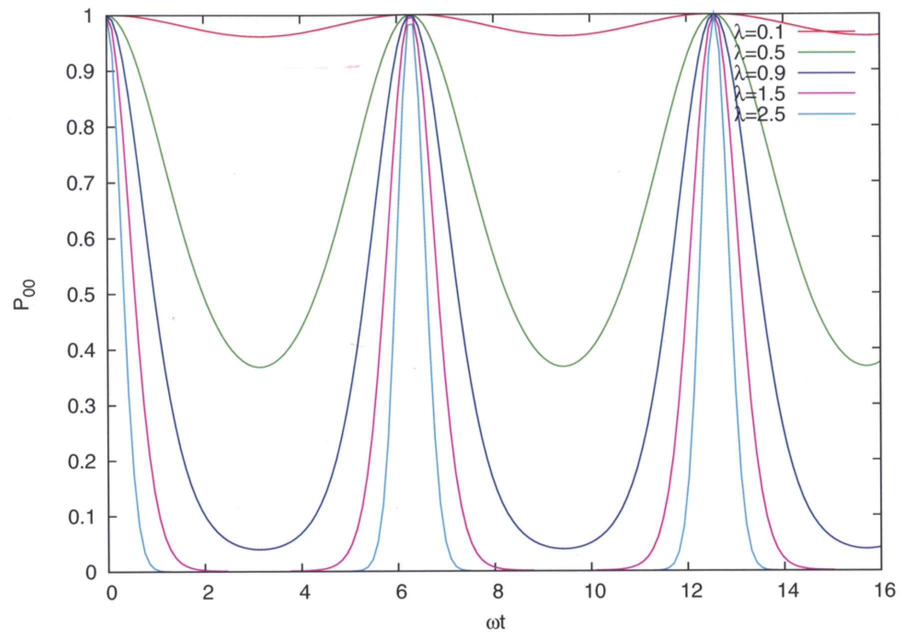
λ=0.9
Exact
2. order
4. order
P_{00}
ωt

(19)



2. stig
$P_{00}(t,\lambda)$
λ
ωt

(20)



λ=0.1
λ=0.5
λ=0.9
λ=1.5
λ=2.5
P_{00}
ωt

Hnikun

Höfum eitthvert kerfi lýst með Hamiltonvirkjanum H. Um orku grunnástandsins gildir

$$\boxed{E_{gs} \le \langle\psi|H|\psi\rangle = \langle H\rangle}$$

fyrir hvaða staðlaða ástand $|\psi\rangle$ sem er,

Grunnástandið lágmarkar væntigildi H, sönnun

Liðum $|\psi\rangle$ í eiginástandagrunni H

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n|n\rangle \quad , \quad H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$|\psi\rangle$ er staðlað $\to$

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n,m} C_m^* C_n \langle m|n\rangle$$

$$= \sum_n |C_n|^2$$

því eiginástönd H er stöðluð

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$$

$$\langle H\rangle = \sum_{n,m} C_m^* C_n \langle m|H|n\rangle$$

$$= \sum_n E_n |C_n|^2$$

Grunnástandið hefur lægstu orkuna

$\to$ $E_{gs} \le E_n$ fyrir öll n

$$\to \langle H\rangle \ge E_{gs}\underbrace{\sum_n |C_n|^2}_{=1} = E_{gs}$$

Þegar við leystum Schrödinger jöfnuna í endanlegum grunni (stofnum) vorum við að nota N-stika hnikun

Með hnikunarreikningi metum við efri mörk orku grunnástands.

Hnika reikning má beita á einnar eindar og fjöleinda kerfi.

Við getum fundið grunnástand eða örvuð ástönd.

Skoðum nokkur dæmi um einfaldan hnikareikning til þess að finna grunnástand í einnar eindar kerfi

Hreintóna sveifill

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}d_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x$$

Við þekkjum rétta grunnástandið með orkuna $E_{gs} = \hbar\omega/2$

Reynum ágiskun fyrir bylgjufallið

$$\psi(x) = Ae^{-bx^2}$$

Normum

$$1 = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-2bx^2} = |A|^2\sqrt{\frac{\pi}{2b}}$$

$$\to A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

Þurfum að finna $\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle$

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-bx^2}\left\{\frac{d^2}{dx^2}e^{-bx^2}\right\}$$

$$= \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

$$\langle V\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-2bx^2}x^2 = \frac{m\omega^2}{8b}$$

því fæst

$$\langle H\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b}$$

Lágmarkið ætti að fást fyrir rétt b

$$\frac{d}{db}\langle H\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b^2} = 0$$

$$\to \boxed{b = \frac{m\omega}{2\hbar}}$$

notum í $\langle H\rangle$ og fáum

$$\langle H\rangle_{min} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

eins og búist var við.

Hér var Gauss fallið, hnikafallið, rétt ágiskun, en hvað gerist þegar tilraunafallið er ekki rétta lausnin?

Delta brunnur

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}d_x^2 - \alpha\delta(x)$$

Rétta grunnástandsorkan er

$$E_{gs} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

Reynum hér aftur sama Gauss fallið og áður

$$\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}e^{-bx^2}$$

Höfum aftur

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

og reiknum

$$\langle V\rangle = -\alpha|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-2bx^2}\delta(x)$$

$$= -\alpha|A|^2 = -\alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

$$\to \langle H\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

Finnum lágmark

$$\frac{d}{db}\langle H\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}} = 0$$

$$\hookrightarrow b = \frac{2m^2\alpha^2}{\pi\hbar^4}$$

5

og

$$\langle H\rangle_{min} = -\frac{m\kappa^2}{\pi\hbar^2}$$

$$> E_{gs} = -\frac{m\kappa^2}{2\hbar^2}$$

$$\frac{\langle H\rangle_{min}}{E_{gs}} = \frac{2}{\pi}$$

$$\to \langle H\rangle_{min} = \frac{2}{\pi}E_{gs}$$

$$\approx 0.64\cdot E_{gs}$$

Góð: Sæta slam válgum, hana má bæta með betra ágiskunarfalli

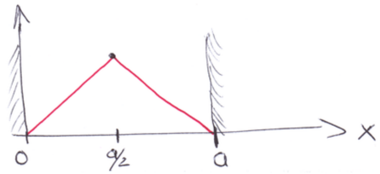
Hægt er að nota óvenjuleg bylgjufall sem ágiskun

Óendanlegur brunnur

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ef } 0<x<a \\ \infty & \text{annars}\end{cases}$$

Reynum

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax & \text{ef } 0\le x\le \frac{a}{2} \\ A(a-x) & \text{ef } \frac{a}{2}\le x\le a \\ 0 & \text{annars}\end{cases}$$



6

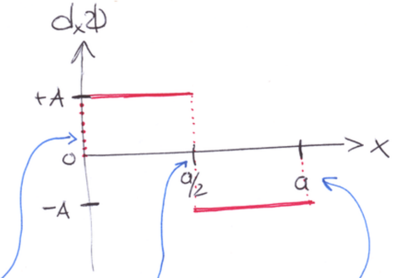
Engin hnikastiki, en við fáum þó eitt orkugildi

Normum

$$1 = |A|^2\left\{\int_0^{a/2}dx\,x^2 + \int_{a/2}^{a}dx\,(a-x)^2\right\} = |A|^2\frac{a^3}{12} \longrightarrow A = \frac{2}{a}\sqrt{\frac{3}{a}}$$

Athugum afleiðu $\psi(x)$

$$d_x\psi(x) = \begin{cases} A & \text{ef } 0<x<\frac{a}{2} \\ -A & \text{ef } \frac{a}{2}<x<a \\ 0 & \text{annars}\end{cases}$$



$$d_x^2\psi = A\delta(x) - 2A\delta\left(x-\frac{a}{2}\right) + A\delta(x-a)$$

7

$$\langle H\rangle = -\frac{\hbar^2A}{2m}\int_0^a dx\,\psi(x)\,d_x^2\psi(x)$$

$$= -\frac{\hbar^2A}{2m}\int_0^a dx\left\{\delta(x) - 2\delta\left(x-\frac{a}{2}\right) + \delta(x-a)\right\}\psi(x)$$

$$= -\frac{\hbar^2A}{2m}\left\{\psi(0) - 2\psi\left(\frac{a}{2}\right) + \psi(a)\right\} = \frac{\hbar^2A^2a}{2m} = \frac{12\hbar^2}{2ma^2}$$

og því

$$\langle H\rangle = \frac{12\hbar^2}{2ma^2} > \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = E_{gs} \qquad \frac{\langle H\rangle}{E_{gs}} \simeq 1.22$$

Hér má fá smá vert í magann, vegna meðhöndlunar á δ-fallinu í endapunkti bils, en bylgjufallið með jaðarskilyrði $\psi(0)=0$ og $\psi(a)$ bjargar því

nokkuð gott miðað við valið á ψ, það er þó samhverft og ekki með núllstöð innan brunns

8

Grunnástand helíns

Tvær rafeindir bundnar í kjarnmætti

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left\{\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|\vec r_1-\vec r_2|}\right\}$$

Mælda grunnástandsorkan er

$$E_{gs} = -78.975\ \text{eV}$$ (Jónunarorka fyrir 2 rafeindir er þá $-E_{gs}$)

Hversu nærri komumst við með hnikareikningi (einföldum)

Við höldum H eins og það er, og reynum að finna góða ágiskun fyrir bylgjufall

Vandræðin koma frá fráhrindingunni

$$V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec r_1-\vec r_2|}$$

9

Ef bylgjufall er valið sem væri rétt lausn án þessa liðar

$$\psi_0(\vec r_1,\vec r_2) = \psi_{100}(\vec r_1)\,\psi_{100}(\vec r_2) = \frac{8}{\pi a^3}\, e^{-2(r_1+r_2)/a}$$

bylgjufall vetnis atóms

fæst orkan -109 eV $= -8\,R_y$, sem er nokkuð fjarri réttu gildi

Hún fæst fyrir H-virkja án fráhrindingar.

$\boxed{\text{Við getum því spurt hvaða orka fæst þegar við notum } \psi_0(\vec r_1,\vec r_2) \text{ sem ágiskunarfall fyrir óbreytt } H\text{, helíumatóms}}$

Heppilega

$$H|\psi_0\rangle = \{8E_1 + V_{ee}\}|\psi_0\rangle \to \langle H\rangle = 8E_1 + \langle V_{ee}\rangle$$

10

þar sem

$$\langle V_{ee}\rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \int d\vec r_1 d\vec r_2 \,\frac{e^{-4\frac{(r_1+r_2)}{a}}}{|\vec r_1-\vec r_2|}$$

Það hentar til hliðsjónar að fara Griffiths í bókinni, ég ætla að leyfa mér að nota eftirfarandi jöfnu

$$\frac{1}{|\vec r_1-\vec r_2|} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \frac{1}{2l+1}\left(\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}\right) Y^*_{lm}(\theta_2,\phi_2)\, Y_{lm}(\theta_1,\phi_1)$$

$r_< = \min(r_1,r_2)$

$r_> = \max(r_1,r_2)$

Ástæðan er að

$$e^{-4\frac{(r_1+r_2)}{a}} = e^{-\frac{4r_1}{a}}\, e^{-\frac{4r_2}{a}}$$

og

$$\int d\Omega\, Y_{lm}(\theta,\phi) = \begin{cases} 0 & \text{ef } m,l \neq 0 \\ \neq 0 & \text{annars, ef } m,l = 0 \end{cases}$$

11

Horn hluti heildanna aðgreinist því og verður einfaldur

$$\langle V_{ee}\rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 (4\pi)^2 \int r_1^2 dr_1\, r_2^2 dr_2\, e^{-\frac{4r_1}{a}} e^{-\frac{4r_2}{a}} \left(\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}\right)$$

$$= \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \left\{ \int_0^\infty r_1^2 dr_1\, e^{-\frac{4r_1}{a}} \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2\, e^{-\frac{4r_2}{a}}\, r_2^0 + \int_0^\infty r_1^2 dr_1\, e^{-\frac{4r_1}{a}}\, r_1^0 \int_{r_1}^\infty r_2^2 dr_2\, e^{-\frac{4r_2}{a}} \frac{1}{r_2} \right\} (4\pi)^2$$

$$= \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \left\{ \int_0^\infty du\, u\, e^{-\frac{4u}{a}} \int_0^u dv\, v^2 e^{-\frac{4v}{a}} + \int_0^\infty du\, u^2 e^{-\frac{4u}{a}} \int_u^\infty dv\, v\, e^{-\frac{4v}{a}} \right\} (4\pi)^2$$

12

$$= \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \left[\int_0^\infty du\, u\, e^{-\frac{4u}{a}} \left\{ \frac{a^3}{32} - \frac{(8au^2 + 4a^2u + a^3)}{32} e^{-\frac{4u}{a}} \right\} + \int_0^\infty du\, u^2 e^{-\frac{8u}{a}} \frac{(4au + a^2)}{16} \right] \cdot (4\pi)^2$$

$$= \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \left\{ \frac{5a^5}{8192} + \frac{5a^5}{8192} \right\} = \frac{5}{4a}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)$$

$$= -\frac{5}{2} E_1 = 34\,\text{eV}$$

$$\to \langle H\rangle = -109\,\text{eV} + 34\,\text{eV} = -75\,\text{eV}$$

mjög nærri réttu gildi ~ -79 eV

13

Betri lausnir hafa verið fundnar með því að nota ágiskunar föll með fleiri hnútum stöðum

Auðvelt er að útbúa grunn samsettan úr Slaterákveðum tveggja ástanda vetnisatómsins (marga) og setja H_{ij} á hornalínu form innan þess grunns

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_i(\bar{r}_i) & \psi_j(r_i) \\ \psi_i(r_j) & \psi_j(r_j) \end{vmatrix}$$

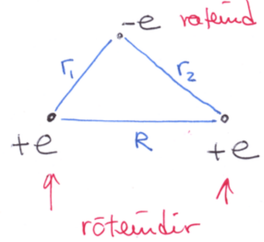
þ.s. i stendur fyrir nlm

⋮

1

Sameindin H_2^+

Getum við fundið bundið ástand fyrir H_2^+?



Gerum fyrst ráð fyrir því að kjarnarnir hreyfist ekki til

Hamiltonvirkinn er þá fyrir rafeindina

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$$

Ef við giskum á bylgjufall sem bindur rafeindina → betri ágiskun gefur bindiorkuna.

Bylgjufallið smíðum við með því að hugsa okkur eina rafeind bundna um eina róteind með bylgjufall

$$\psi_0(\bar{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

Síðan er önnur róteind færð að kerfinu. Ef hún er utan Bohr geisla a frá

2

fyrstu róteindinni hefur hún ekki mikil áhrif á bylgjufallið

↓

Reynum lausn sem er línuleg samantekt atóm ástanda (LCAO)

$$\psi(r_1 r_2) = A\left[\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)\right]$$

fyrst þarf að norma fallið

$$1 = \int d\bar{r}\, |\psi|^2$$

$$= A^2\left\{ \int d\bar{r}\, |\psi_0(r_1)|^2 + \int d\bar{r}\, |\psi_0(r_2)|^2 + 2\int d\bar{r}\, \psi_0(r_1)\psi_0(r_2) \right\}$$

$$= A^2\left\{ 1 + 1 + 2I \right\}$$

þ.s.

$$I = \frac{1}{\pi a^3}\int d\bar{r}\, e^{-\frac{r_1+r_2}{a}}$$

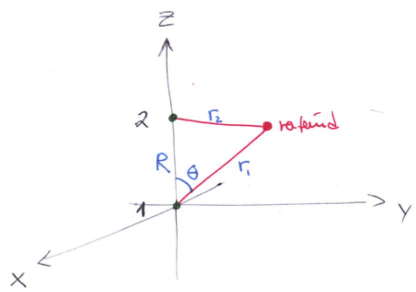
Við notuðum stöðlun ψ_0 án þess að tilgreina hnitakerfið, en t.þ.a. reikna I, skörunar heildið, þarf að ákveða hnitakerfi

3

Reynum kúluhnit, sett með miðju á róteind 1 og 2 á z-ás

$$r_1 = r$$

$$r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta}$$



$$I = \frac{1}{\pi a^3}\int r^2 dr\, d\phi \sin\theta\, d\theta\, e^{-\frac{r}{a}} \cdot e^{-\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\theta}\,\frac{1}{a}}$$

ϕ heildið gefur 2π, þar sem fallið sem heildað á er ekki háð ϕ

Skoðum θ-heildið

Notum breytuskipti

$$y = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta}$$

$$\to dy^2 = 2y\,dy = 2rR\sin\theta\, d\theta$$

4

því fæst

$$\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, e^{-\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\theta}\,\frac{1}{a}} = \frac{1}{rR}\int_{|r-R|}^{r+R} y\,dy\, e^{-\frac{y}{a}}$$

$$= -\frac{a}{rR}\left\{ e^{-\frac{r+R}{a}}(r+R+a) - e^{-\frac{|r-R|}{a}}(|r-R|+a)\right\}$$

þar sem ég hef notað

$$\int y\,dy\, e^{-\frac{y}{a}} = \{-ay-a^2\}e^{-\frac{y}{a}}$$

því fæst

$$I = \frac{2}{a^2R}\left\{ -e^{-\frac{R}{a}}\int_0^\infty r\,dr\,(r+R+a)e^{-\frac{2r}{a}} + e^{-\frac{R}{a}}\int_0^R r\,dr\,(R-r+a) + e^{\frac{R}{a}}\int_R^\infty r\,dr\,(r-R+a)e^{-\frac{2r}{a}} \right\}$$

5

og að lokum

$$I = e^{-\frac{R}{a}}\left\{1+\left(\frac{R}{a}\right)+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a}\right)^2\right\}$$

Skörunarheildið $I \to 1$ þegar $R \to 0$, alger skörun

$I \to 0$ þegar $R \to \infty$, engin skörun

En, við verðum að reikna normunina A,

$$1 = |A|^2\{1+1+2I\} \;\to\; |A|^2 = \frac{1}{2(1+I(R))}$$

Viljum halda A, sem falli af R til þess að geta séð hvað gerist þegar R er hnikað seinna

6

Við þurfum að reikna $\langle\psi|H|\psi\rangle$

Munum að

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}\right\}\psi_0(r_1) = E_1\psi_0(r_1), \quad E_1 = -R_y\frac{1}{1} = E_1 = -13.6\,\mathrm{eV}$$

↑ og samskonar fyrir r_2

því fæst

$$H\psi = A(R)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)\right\}[\psi_0(r_1)+\psi_0(r_2)]$$

$$= E_1\psi - A\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left\{\frac{1}{r_2}\psi_0(r_1) + \frac{1}{r_1}\psi_0(r_2)\right\}$$

blandaðir liðir í r_1 og r_2 sem fóru ekki inn í E_1

7

og væntigildið verður

$$\langle H\rangle = E_1 - 2|A|^2\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left\{\langle\psi_0(r_1)|\frac{1}{r_2}|\psi_0(r_1)\rangle + \langle\psi_0(r_1)|\frac{1}{r_1}|\psi_0(r_2)\rangle\right\}$$

skilgreinum

$$D \equiv a\langle\psi_0(r_1)|\frac{1}{r_2}|\psi_0(r_1)\rangle$$

Beina heildið

$$X = a\langle\psi_0(r_1)|\frac{1}{r_1}|\psi_0(r_2)\rangle$$

Skipta heildið

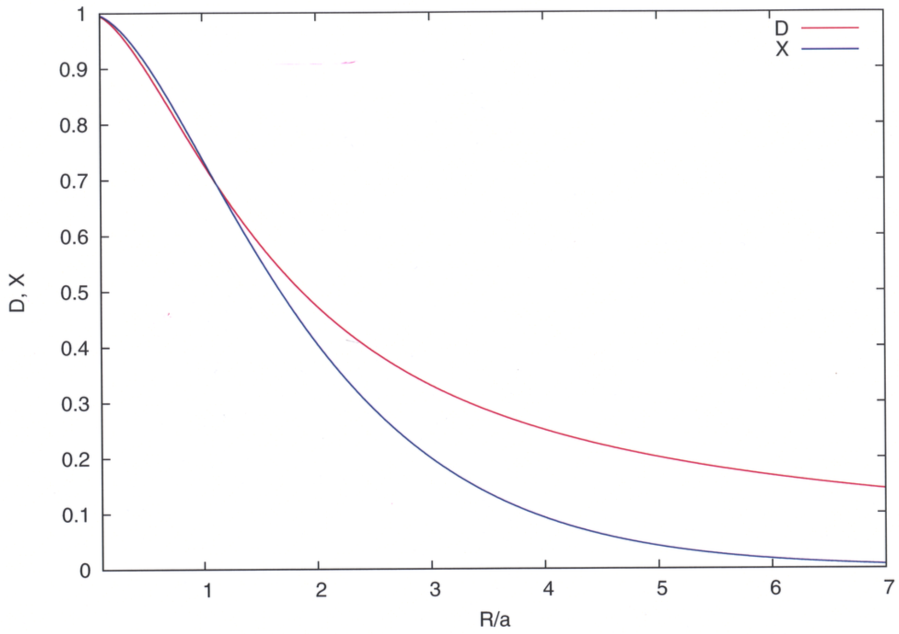
Heildun gefur (Dæm 7.6)

$$D = \frac{a}{R} - \left(1+\frac{a}{R}\right)e^{-2R/a}$$

$$X = \left(1+\frac{R}{a}\right)e^{-\frac{R}{a}}$$

Skoðum eiginleika D og X á grafi

8



9

Setjum allt saman og fáum

$$\langle H \rangle = \left\{ 1 + 2\frac{(D+X)}{(1+I)} \right\} E_1$$

Raunveruleg orka grunnástandsins er lægri en $\langle H \rangle$

Við verðum að taka með fráhrindikraft róteindanna

$$V_{pp} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} = -\frac{2a}{R} E_1$$

Heildarorka kerfisins er þá, ef við notum

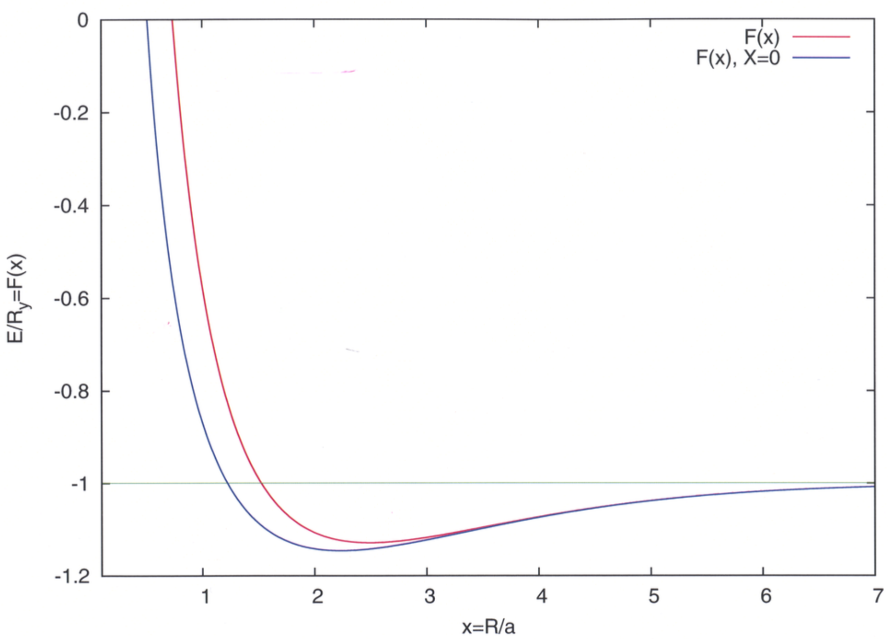
$$x \equiv \frac{R}{a}$$

$$E(x) = R_y F(x)$$

með

$$F(x) = -1 + \frac{2}{x} \left\{ \frac{\left(1 - \frac{2x^2}{3}\right) e^{-x} + (1+x) e^{-2x}}{1 + \left(1 + x + \frac{x^2}{3}\right) e^{-x}} \right\}$$

10



11

Við finnum bundið ástand því $F(x) < -1$ á takmörkuðu svæði

$F(x) = \frac{E}{R_y} \rightarrow F(x) = -1$ er lægsta orka ójónaðs vetnis og frjálsrar róteindar

Samkvæmt grafinu virðist

$R_0 \sim 2{,}4a \sim 1{,}3$ Å (tilraunagildi er 1.06 Å)

Bindiorkan $\sim 1{,}8$ eV (tilraun gefur 2.8 eV)

Bundna ástandið er samhverft $\leftrightarrow$ samgilt tengi

(12)

Síðan þarf að taka með hreyfingar róteindanna
Born-Oppenheimer nálgun. Venjulega er sagt að lægsta B-O nálgunin sé fyrir fastar róteindir, en við getum gert betur

$$H = H_e + H_{pp} + H_{pp\text{-}e}$$

$$H\Psi = E\Psi$$

H má ummynda eincka

$$S H S^{-1} S\Psi = E S\Psi$$

þar sem S er valið þ.a.

$$S(H_{pp} + H_{pp\text{-}e})S^{-1} = U_e$$

og U_e er á hornalínuformi

þá má umrita

$$(U_e + S H_e S^{-1}) S\Psi = E S\Psi$$

eða

$$(H_e + U_e + S[H_e, S^{-1}]) S\Psi = E S\Psi$$

Nú má væntanlega líta vixlliðinn sem truflun í lægstu nálgun

(13)

$$\boxed{(H_e + U_e)\varphi_0(e) = \varepsilon_0 \varphi_0(e)}$$

með $S\Psi = \varphi_0(e) \to \Psi = S^{-1}\varphi_0$

Ef nauðsynlegur truflunarstuðli finnst

Það er mögulegt að gera truflanaröð með t.t. hreyfinga róteindanna

Hér er mál að linni