

# V. Kvantmekanik

Werner Heisenberg och Erwin Schrödinger utvecklade var för sig kvantmekaniken i medlet av 1920-talet. Heisenbergs kvantmekanik arbetar med matriser och är något mera abstrakt. Schrödingers kvantmekanik brukar också kallas för vågmekanik, och är enklare att förstå. Båda teorierna leder till samma kvantfysik.

Våglösningarna till Schrödingers ekvation tolkades korrekt av M. Born 1926 som sannolikheter, inte materiella vågor.

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 1

## V.1. Schrödinger ekvationen

Den allmänna vågekvationen i en dimension är

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (V.1)$$

dar vågens hastighet är  $v$  och dess utslag från jämviktsläget är  $u = u(x, t)$ . Vågekvationen är en linjär differentialekvation (DE), så om  $u_1(x, t)$  och  $u_2(x, t)$  är två separata lösningar så är också summan  $u_1(x, t) + u_2(x, t)$  en lösning. I allmänhet gäller att om  $u_k(x, t)$  är en lösning, så är linjärkombinationen

$$\sum_k a_k u_k(x, t) \quad (V.2)$$

med godtyckliga koefficienter  $a_k$  den mest allmänna lösningen.

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 2

Notera att DE (V.1) är av andra ordningen i  $x$  och  $t$ , så för att bestämma en lösning behövs två initialvillkor för både  $x$  och  $t$ . Dessa kan väljas som

$$\underline{\hspace{2cm}} \quad u_k(x, t = 0), \quad \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{t=0} \quad \forall x \quad (V.3)$$

I förra kapitlet lärde vi oss att en partikel kan betraktas som ett vågpaket. För en fri partikel gäller en överlagring av ett oändligt antal fortskridande monokromatiska vågor, enligt

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{i(kx - \omega t)} \quad (V.4)$$

Notera att detta är en hypotes (ett antagande) och inte ett postulat.

Vi har

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dk (ik)^2 A(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) (-i\omega) e^{i(kx - \omega t)}$$

Men:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Vi kan skriva

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = - \int_{-\infty}^{\infty} dk \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right) A(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{E}{\hbar} A(k) e^{i(kx - \omega t)} = i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Detta ger oss genast att

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (\text{V.5})$$

som alltså tycks vara en sorts energi.

DE (V.5) är **Schrödinger ekvationen för en fri partikel**.

Enligt klassisk mekanik gäller för en fri icke-relativistisk partikel att

$$\frac{p^2}{2m} = E \quad (\text{V.6})$$

Det ser alltså ut som om rörelsemängden  $p$  kvadrerad och energin  $E$  ser ut att vara operatorer som verkar på vågfunktionen, åtminstone för fallet med en fri partikel i en dimension:

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ × 5

$$p^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (\text{V.7})$$

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{V.8})$$

I fallet att partikeln rör sig under inverkan av en potential  $V$  kan man motivera följande form för SE (Schrödinger ekvationen):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (\text{V.9})$$

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ × 6

## V.2. Sannolikhetsolkningen

SE innehåller den imaginära enheten  $i$ . Detta betyder att vågfunktionen  $\Psi$  kommer att vara komplex (komplexvärd), och alltså inte kan vara mätbar i sig. Nåt som nog är mätbart är t.ex.  $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ . Här avser  $z^*$  **komplekonjugering** av  $z$ , d.v.s. om

$$z = x + iy$$

så har vi

$$z^* = x - iy$$

M. Borns tolkning av  $\Psi$  är att  $|\Psi|^2$  motsvarar en sannolikhets täthet,

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) \quad (\text{V.10})$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ × 7

Sannolikheten att finna partikeln som beskrivs av  $\Psi(x, t)$  i ett intervall med den infinitesimala längden  $dx$  blir då

$$P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (\text{V.11})$$

Generaliseringen är direkt

$$\int_{x_1}^{x_2} dx |\Psi(x, t)|^2 \quad (\text{V.12})$$

för ett ändligt intervall  $[x_1, x_2]$ .

För en sannolikhetsfördelning  $|\Psi(x, t)|^2$  måste vi kräva

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 \quad (\text{V.13})$$

vid varje tidpunkt  $t$ . Detta är vågfunktionens **normaliseringskrav**.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ × 8



### V.3. Stationära tillstånd

Vi vet att atomen har bestämda energitillstånd som inte förändras med tiden — spektrallinjerna sitter stilla på sina bestämda platser. Man säger att elektronernas tillstånd i detta fall är **stationära**.

Dylilka lösningar till SE kan fås genom att utnyttja lösningstekniken **separering av variabler**:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) \quad (V.17)$$

Notera att separeringen av variabler kommer att begränsa de lösningar vi kan hitta. En allmän lösning till SE behöver inte vara av den här formen.

Insättning i Schrödingerekvationen ger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \phi + V(x)\psi\phi = i\hbar\psi \frac{d\phi}{dt} \quad (V.18)$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ◀ ◊ ▶ ▶▶ ▶▶ ▶▶▶ ▶▶▶▶▶ X 11

Division med  $\psi\phi$  ger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = \frac{i\hbar}{\phi} \frac{d\phi}{dt} \quad (V.19)$$

Det vänstra ledet beror bara av  $x$ , och det högra bara av  $t$ . Då likheten måste gälla för alla värden på  $x$  och  $t$  **måste den enda allmänna lösningen vara att båda leden är konstanter**:

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi}{\psi} = \lambda = \text{konstant} \quad (V.20)$$

$$\frac{i\hbar}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = \lambda = \text{konstant} \quad (V.21)$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶▶ ▶▶▶▶▶ X 12

Vi löser först den tidsberoende ekvationen:

$$i\hbar \frac{d\phi}{dt} = \lambda\phi \quad (\text{V.22})$$

$$\Rightarrow \int \frac{d\phi}{\phi} = - \int \frac{i}{\hbar} \lambda dt \quad (\text{V.23})$$

$$\Rightarrow \ln \phi = -i\lambda t/\hbar \quad (\text{V.24})$$

och erhåller slutligen

$$\phi = e^{-i\lambda t/\hbar} \quad (\text{V.25})$$

Den tidsberoende delen är alltså en våg av formen

$$\cos \frac{\lambda}{\hbar} t - i \sin \frac{\lambda}{\hbar} t \quad (\text{V.26})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 13

Vinkelfrekvensen för vågen är

$$\omega = \frac{\lambda}{\hbar} \quad (\text{V.27})$$

Enligt relationen

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (\text{V.28})$$

kan vi nu säga att vågen har en energi

$$E = \hbar\omega = \lambda \quad (\text{V.29})$$

Alltså har vi

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 14

$$\frac{-\hbar^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi}{\psi} = E = \text{konstant} \quad (\text{V.30})$$

$$\frac{i\hbar \frac{d\phi}{dt}}{\phi} = E = \text{konstant} \quad (\text{V.31})$$

där lösningen för den tidsberoende delen är

$$\phi = e^{-iEt/\hbar} \quad (\text{V.32})$$

Vi kan nu skriva om ekvation (V.22) som

$$i\hbar \frac{d}{dt}\phi = E\phi \quad (\text{V.33})$$

Materiens Struktur I, 2013

◀▶◀▶◊▶▶▶▶ × 15

Detta är en egenvärdesekvation, alltså en ekvation av typen

$$[\text{operator}][\text{funktion}] = [\text{egenvärde}][\text{funktion}] \quad (\text{V.34})$$

Energioperatorn  $i\hbar d/dt$  har **egenvärdet**  $E$  för **egenfunktionerna**  $\phi(t)$  som satisfierar denna ekvation.

Den andra ekvationen ger oss

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi} \quad (\text{V.35})$$

och kallas för **den tidsberoende Schrödingerekvationen** (toSE). Vi noterar att även denna har formen av en egenvärdesekvation. Potentialen  $V(x)$  kommer att avgöra vilka tillåtna energier  $E$  vi kan ha — dessa energier fås som lösning av ekv. (V.35).

Materiens Struktur I, 2013

◀▶◀▶◊▶▶▶▶ × 16





Sannolikhetsföreteten blir

$$\begin{aligned}\Psi^* \Psi &= |a_1|^2 |\psi_1(x)|^2 + a_1^* a_2 e^{iE_1 t/\hbar} e^{-iE_2 t/\hbar} + a_2^* a_1 e^{iE_2 t/\hbar} e^{-iE_1 t/\hbar} \\ &\quad + |a_2|^2 |\psi_2(x)|^2\end{aligned}\tag{V.39}$$

$$\begin{aligned}&= |a_1|^2 |\psi_1(x)|^2 + |a_2|^2 |\psi_2(x)|^2 \\ &\quad + a_1^* a_2 e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} + a_2^* a_1 e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar}\end{aligned}\tag{V.40}$$

Notera att denna sannolikhetsföreteten beror på tiden. Om vi bara hade haft det ena tillståndet — antingen  $a_2 = 0$  eller  $a_1 = 0$  — hade vi fått en stationär lösning.

## V.4. Lösning av den tidsberoende Schrödinger ekvationen

I fortsättningen kommer vi att behöva lösningen  $\psi(x)$  av den tidsberoende Schrödinger ekvationen (toSE) då vi ser på några konkreta situationer, och därför löser vi den redan här.

toSE är en linjär differentialekvation av andra ordningen, som kan skrivas

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \psi(x) = 0\tag{V.41}$$

eller

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0\tag{V.42}$$

$$k^2 = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2}\tag{V.43}$$

Om  $E - V < 0$  fås

$$k = i \frac{\sqrt{2m|E - V|}}{\hbar} \quad (\text{V.44})$$

annars gäller

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar} \quad (\text{V.45})$$

Om potentialen är konstant och inte beror av  $x$ , så är alla koefficienter i toSE konstanta, och vi kan använda följande lösningsmetod.

Lösningen är allmänt

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad (\text{V.46})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 21

där  $C_1$  och  $C_2$  är (allmänt) komplexa koefficienter. Om  $k$  är reellt kan vi övergå till den trigonometriska formen

$$\psi(x) = D_1 \cos kx + D_2 \sin kx \quad (\text{V.47})$$

där  $D_1$  och  $D_2$  är komplexa koefficienter.

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 22

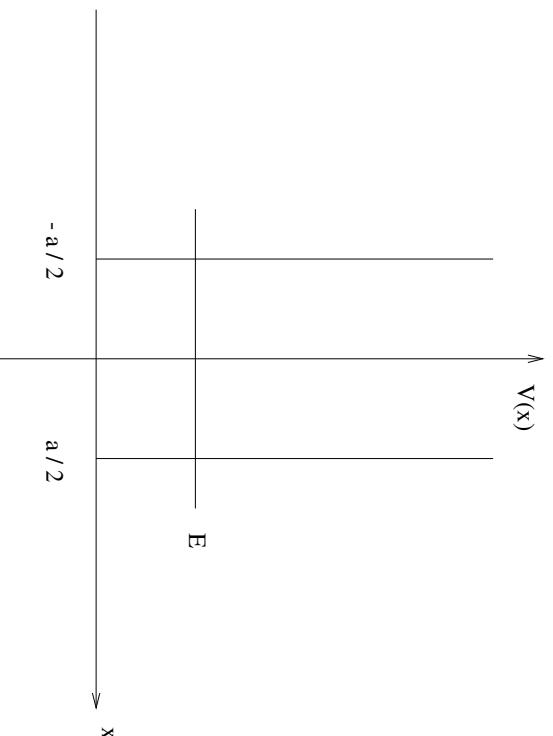
## V.5. Den endimensionella lådan med oändligt höga kanter

Låt en partikel med energi  $E$  befinna sig i en "potentiallåda"

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \text{ då } |x| < a/2 \\ \infty & , \text{ då } |x| > a/2 \end{cases} \quad (\text{V.48})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ X 23



Figur 1: Den oändligt höga "potentiallådan".

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ X 24





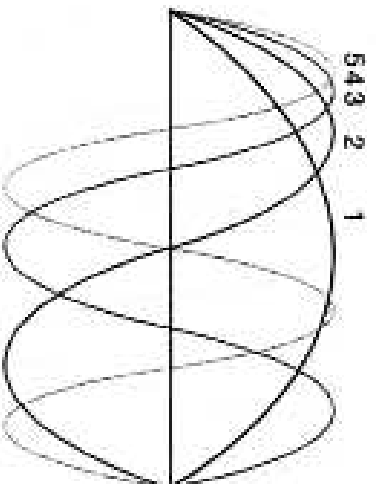
$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \\
&= \int_{-a/2}^{a/2} A^2 \cos^2 \frac{n\pi x}{a} dx \\
&= 2|A|^2 \frac{a}{n\pi} \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta d\theta \\
&= 2|A|^2 \frac{a}{n\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{2}(1 + \cos 2\theta) d\theta \\
&= 2|A|^2 \frac{a}{n\pi} \frac{\pi}{4}
\end{aligned}$$

som ger  $A = \sqrt{2n/a}$ . T.ex. den första vågfunktionen kan alltså skrivas

$$\Psi_1(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iE/h} \quad (\text{V.58})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 29



Figur 2: De första fem vågfunktionerna för partikeln i en låda.

Notera att energiskillnaden mellan nivåerna  $n$  och  $n + 1$  är

$$\Delta E = (2n + 1)E_1 \quad (\text{V.59})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 30

Den relativa energiskillnaden är

$$\frac{\Delta E}{E_n} = \frac{(2n+1)E_1}{n^2 E_1} \sim \frac{2}{n} \quad (\text{V.60})$$

för stora värden på  $n$ . Då  $n$  växer över alla gränser kommer den diskreta naturen hos  $\Delta E/E_n \rightarrow dE/E \rightarrow 0$  att försvinna och övergå i ett kontinuum. Korrespondensprincipen är alltså satisfierad.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ◀ ◊ ▶▶▶▶ × 31

## V.6. Paritet, noder, och ortogonalitet

Vi introducerar nu **paritetsoperatoren**  $P$ , som har den effekten på  $\Psi$  (och  $\psi$ ) att den speglar läget  $x$  genom origo, till  $-x$ . Man kan visa att om potentialen är symmetrisk kring origo så har egenfunktionerna till toSE alltid en bestämd **paritet**.<sup>1</sup> Man skriver

$$P_{op}\psi(x) = \psi(-x) = P\psi(x) \quad (\text{V.61})$$

Operera en gång till med  $P$ :

$$P_{op}^2\psi(x) = \psi(x) = P^2\psi(x)$$

$P$  har alltså egenvärdena 1 och  $-1$  för egenfunktionerna  $\psi(x)$  som uppfyller ekv. (V.61).

Man säger att  $\psi$  har jämn paritet om  $P = 1$  och udda paritet om  $P = -1$ .

För den endimensionella lådan med oändligt höga kanter:

<sup>1</sup>Om potentialen är symmetrisk kring  $x_0$  så är den tidsberoende Schrödingerekvationens lösningar egenfunktioner till den paritetsoperator som speglar läget kring  $x_0$ .

Materiens Struktur I, 2013

◀◀◀ ◊ ▶▶▶▶ × 32



$$\psi_n(-x) = \begin{cases} A \cos(-n\pi x/a) & , \text{då } n = 1, 3, 5, \dots \\ B \sin(-n\pi x/a) & , \text{då } n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (\text{V.62})$$

$$= \begin{cases} A \cos(n\pi x/a) & , \text{då } n = 1, 3, 5, \dots \\ -B \sin(n\pi x/a) & , \text{då } n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (\text{V.63})$$

Egenfunktionerna för udda kvanttal  $n$  har alltså pariteten  $+1$  och egenfunktionerna för jämnt kvanttal  $n$  har alltså pariteten  $-1$ .

Egenfunktionerna till toSE har också en annan egenskap: De är **ortogonala**, d.v.s.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{n'}^*(x) \psi_n(x) = 0, \quad \text{om } n' \neq n \quad (\text{V.64})$$

Detta bevisas inte här, då det kräver kunskap om s.k. hermitiska operatorer.

Man kan visa att ju fler noder (nollställen) en egenfunktion har, desto större är den energi som denna egenfunktion svarar mot:

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶ X 33

toSE:

flera noder  $\rightarrow$  större energi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (\text{V.65})$$

Multiplitera med  $\psi^*$  och integrera över hela rummet:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} + \int dx \psi^* V(x)\psi \quad (\text{V.66})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) \Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} + \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} + \int dx \psi^* V(x)\psi \quad (\text{V.67})$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} + \int dx \psi^* V(x)\psi \quad (\text{V.68})$$

Låt potentialen vara noll för enkelhetens skull.

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶ X 34

Om en funktion  $f(x)$  har en nod i  $x = x_n$  gäller  $f(x_n) = 0$  och  $df/dx > 0$  om funktionen är tilltagande i noden och  $df/dx < 0$  om funktionen är sjunkande i noden. I båda fallen gäller  $|df/dx|^2 > 0$  i noden. Ju flera noder desto mera bidrag till integralen i term 1 i ekv. (V.68).

Materiens Struktur I, 2013

◄◄ ◀ ◊ ▶▶ ▶▶ × 35

## V.7. Den endimensionella lådan med ändligt höga kanter

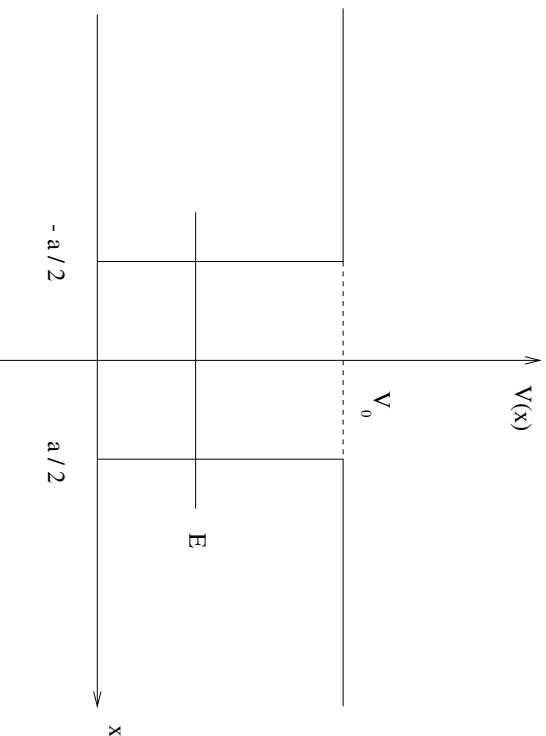
I detta exempel har vi en potential av följande utseende:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \text{ då } |x| < a/2 \\ V_0 > 0 & , \text{ då } |x| > a/2 \end{cases} \quad (\text{V.69})$$

Vi utgår från att  $E < V_0$ , d.v.s. klassiskt skulle partikeln vara fångad i "potentiallådan".

Materiens Struktur I, 2013

◄◄ ◀ ◊ ▶▶ ▶▶ × 36



Figur 3: Den ändligt höga "potentiallådan".

Fall 1: I intervallet  $x \in [-a/2, a/2]$  är toSE

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (\text{V.70})$$

eller

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (\text{V.71})$$

och lösningen helt allmänt

$$\psi(x) = A' \cos k_1 x + B' \sin k_1 x, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (\text{V.72})$$

Vi vill nu ha egenfunktionen för grundtillståndet. Den allmänna lösningen är en blandning av sinus- och cosinusfunktionerna. Vi vet från tidigare att den jämna lösningen (cos) har minst energi, så vi väljer

$$\psi_1(x) = A' \cos k_1 x \quad (\text{V.73})$$





Ekvation (V.80) löses grafiskt eller numeriskt — sök skärningspunkten mellan

$$y_1(E) = \tan \frac{\sqrt{2mE}a}{2\hbar}$$

och

$$y_2(E) = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ◀ ◊ ▶▶▶▶▶ × 43

## V.8. Den harmoniska oscillatorn

Vi introducerar nu den första icke-konstanta potentialen

$$V = \frac{1}{2}kx^2 \quad (\text{V.83})$$

Partikelns bana styrs nu av den harmoniska kraften  $F = -kx$  som ger upphov till en svängande (oskillerande) rörelse. toSE antar utseendet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi \quad (\text{V.84})$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀◀◀◊▶▶▶▶▶ × 44

Genom att skriva denna i formen

$$\frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \left( \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} x^2 - \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} \right) \psi \quad (\text{V.85})$$

och införa

$$\xi = \sqrt{\frac{\sqrt{mk}}{\hbar}} x = Cx \quad (\text{V.86})$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (\text{V.87})$$

och notera att

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 45

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} &= \frac{d}{dx} \left( \frac{d}{dx} \right) = \frac{d}{dx} \left( \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} \right) \\ &= \frac{d}{dx} \left( C \frac{d}{d\xi} \right) = C \frac{d}{d\xi} \left( C \frac{d}{d\xi} \right) \\ &= C^2 \frac{d^2}{d\xi^2} \end{aligned}$$

kan ekvation (V.85) skrivas som

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - \lambda^2)\psi \quad (\text{V.88})$$

En möjlig lösning är

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} \quad (\text{V.89})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 46







## V.9. Eigenvärden och egenfunktioner

I de tidigare sektionerna har vi löst toSE

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (\text{V.98})$$

där  $E$  är en konstant, och potentialen  $V(x)$  är given. Vi har sett att olika potentialer — hur de än ser ut — leder fram till diskreta (kvantiserade) lösningar för energin  $E$ , numrerade enligt ett heltalsindex.

Ekv. (V.98) är en **eigenvärdesekvation**, d.v.s. en ekvation av formen

$$\boxed{A_{op}\phi = a\phi} \quad (\text{V.99})$$

där  $A_{op} = A_{op}(\mathbf{x}, t)$  är en given operator,  $a$  en okänd **konstant**, och  $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$  är en okänd funktion. Lösningen av en dylik ekvation ger både  $a$  och  $\phi$  samtidigt,

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ X 51

I ekvationen

$$A_{op}\phi = a\phi$$

kallas  $a$  för **eigenvärdet** och  $\phi$  som uppfyller ekvationen ovan kallas **egenfunktioner**. I det allmänna fallet finns det en diskret mängd lösningar  $a_n, \phi_n(x, t)$  där  $n$  numererar lösningarna. Kombinationen  $a_n, \phi_n(x, t)$  kallas ofta för ett **egentillstånd** inom kvantmekaniken.

I det allmänna fallet befinner sig ett system i en superposition av alla tillåtna tillstånd. Detta motsvarar en linjärkombination:

$$\Psi = \sum_k c_k \psi_k \quad (\text{V.100})$$

Vad har  $c_k$ -koefficienterna i linjärkombinationen för betydelse, om någon?

$$\Psi = \sum_k c_k \psi_k \quad (\text{V.101})$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ X 52

Multiplitera med  $\Psi^*$  och integrera:

$$\int dx \Psi^* \Psi = \sum_k \sum_p c_p^* c_k \int dx \psi_p^* \psi_k \quad (\text{V.102})$$

P.g.a. normalisering har vi

$$\int dx \Psi^* \Psi = 1 \quad (\text{V.103})$$

Om egenfunktionerna är ortonormaliserade,

$$\int dx \psi_p^* \psi_k = \delta_{kp} \quad (\text{V.104})$$

får vi

$$\sum_k |c_k|^2 = 1 \quad (\text{V.105})$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀◀◀◀◀◀◀◀◀ × 53

Koefficienterna  $c_k$  uttrycker sannolikheten att systemet är i egentillståndet  $k$ .

Låt  $E_i, E_j$  vara två olika egenvärden till toSE, med egenfunktionerna  $\psi_i, \psi_j$ . Dessa uppfyller följande ekvationer:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_i}{dx^2} + V(x) \psi_i = E_i \psi_i \quad (\text{V.106})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_j^*}{dx^2} + V(x) \psi_j^* = E_j \psi_j^* \quad (\text{V.107})$$

Multiplitera den första med  $\psi_j^*$  och den andra med  $\psi_i$ , och subtrahera sedan ekvationerna:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_j^* \frac{d^2 \psi_i}{dx^2} + V(x) \psi_j^* \psi_i + \frac{\hbar^2}{2m} \psi_i \frac{d^2 \psi_j^*}{dx^2} - V(x) \psi_i \psi_j^* \\ & = (E_i - E_j) \psi_j^* \psi_i \end{aligned} \quad \begin{array}{l} (\text{V.108}) \\ (\text{V.109}) \end{array}$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀◀◀◀◀◀◀◀◀ × 54



## V.10. Väntevärden

Väntevärdet (medelvärdet) av  $A_1, A_2, \dots$  skrivs som

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i f_i A_i}{\sum_i f_i} = \sum_i g_i A_i \quad (\text{V.117})$$

där  $f_i, g_i$  är "vikterna", och vikterna  $g_i$  är normaliserade.

I det kontinuerliga fallet skriver man

$$\langle A \rangle = \frac{\int dx f(x) A(x)}{\int dx f(x)} \quad (\text{V.118})$$

Här kan  $x$  i integralen syfta på positionen, tiden, eller någon annan storhet över vilken man utför väntevärdet.

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶◆▶▶▶▶▶ X 57

För en klassisk partikel med positionen  $x$  vet vi alltid var den finns. Viktfunktionen är då  $A(x') = \delta(x - x')$  som är Diracs delta-funktion. Denna har egenskapen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \delta(t - t_0) f(t) = f(t_0) \quad (\text{V.119})$$

Väntevärdet är då

$$\langle x_{kl} \rangle = \frac{\int dx' \delta(x' - x) x'}{\int dx' \delta(x' - x)} = x \quad (\text{V.120})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◆▶▶▶▶▶ X 58



definierar man analogt med det klassiska fallet att **väntevärdet för en kvantmekanisk operator** är

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* A_{op} \Psi \quad (\text{V.130})$$

där  $\Psi$  är systemets vågfunktion.

Med  $\Psi = \sum_k c_k \psi_k$ , och  $A_{op} \psi_k = a_k \psi_k$  har vi alltså

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int dx \Psi^* A_{op} \Psi & (\text{V.131}) \\ &= \sum_k |c_k|^2 a_k & (\text{V.132}) \end{aligned}$$

Koefficienterna  $c_k$  uttrycker hur mycket egenvärdet för tillståndet  $k$  viktas in i det totala väntevärdet.

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 61

Notera att om ett system befinner sig i ett specifikt egentillstånd  $k_0$  (d.v.s. med 100% sannolikhet):

$$\langle A \rangle = \int dx \Psi^* A_{op} \Psi = a_{k_0} \quad (\text{V.133})$$

Notera:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* x \Psi \quad (\text{V.134})$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* x^2 \Psi \quad (\text{V.135})$$

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 62

Dessa är i allmänhet olika, så det finns inget enkelt samband mellan väntevärdet för  $x$  och  $\langle x^2 \rangle$ . Men i klassisk mekanik har vi:

$$\langle x_{kl}^2 \rangle = \frac{\int dx' \delta(x' - x) (x')^2}{\int dx' \delta(x' - x)} = x^2 \quad (\text{V.136})$$

Detta gäller alltså inte för kvantmekaniska väntevärden.

Osäkerheten i  $x$  kan beräknas på följande sätt:

$$(\Delta x)^2 = E[(x - \langle x \rangle)^2] = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle - (\langle x - \langle x \rangle \rangle)^2 \quad (\text{V.137})$$

$$= \langle x^2 - 2x \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle - (\langle x \rangle - \langle \langle x \rangle \rangle)^2 \quad (\text{V.138})$$

$$= \langle x^2 \rangle - 2 \langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \quad (\text{V.139})$$

$$= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (\text{V.140})$$

$$= \text{Var}(x) \quad (\text{V.141})$$

som är variansen för  $x$ .

För vilken som helst storhet  $A$  gäller att osäkerheten  $\Delta A$  uppfyller

$$\boxed{(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \quad (\text{V.142})$$





$$p_{op} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

(V.152)

Notera också att

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* p_{op}^2 \Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) \quad (\text{V.153})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶◆▶▶▶▶▶ X 67

Väntevärdet av SE är

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \right] \quad (\text{V.154})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \left[ -\frac{1}{2m} \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \right] \quad (\text{V.155})$$

$$= \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \langle V \rangle \quad (\text{V.156})$$

$$= \langle E \rangle \quad (\text{V.157})$$

enligt klassisk mekanik, så vi borde kunna göra en annan operator-identifikation:

$$E_{op} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

(V.158)

Materiens Struktur I, 2013

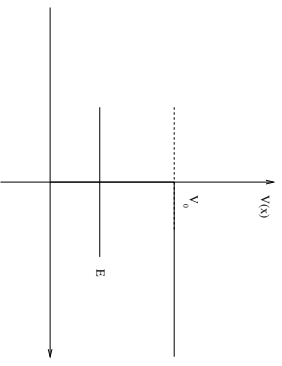
▶▶▶◆▶▶▶▶▶ X 68



## V.11. Potentialsteget

Vi återgår nu till våra exempel på konstanta potentialer. I detta fall har vi

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \text{ då } x < 0 \\ V_0 > 0 & , \text{ då } x > 0 \end{cases} \quad (\text{V.163})$$



Figur 5: Potentialsteget.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ X 71

Om den inkommande partikeln har en energi  $E$  som är större än  $V_0$  kommer den att passera potentialkanten och gå in i det andra området.

Om dess energi är mindre än  $V_0$  kommer sannolikheten att den studsar tillbaka att vara stor, men det kommer ändå att existera en viss sannolikhet att finna partikeln bakom potentialkanten — dock avtar denna sannolikhet snabbt med inträngningsdjupet. Jämför med potentiallådan med ändligt höga kanter!

Vi koncentrerar oss här på det senare fallet,  $E < V_0$ .

Enligt tidigare sektioner kommer lösningarna på toSE att vara

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos k_1 x + B \sin k_1 x & , x < 0 \\ C e^{-\kappa_2 x} & , x > 0 \end{cases} \quad (\text{V.164})$$

där

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ X 72



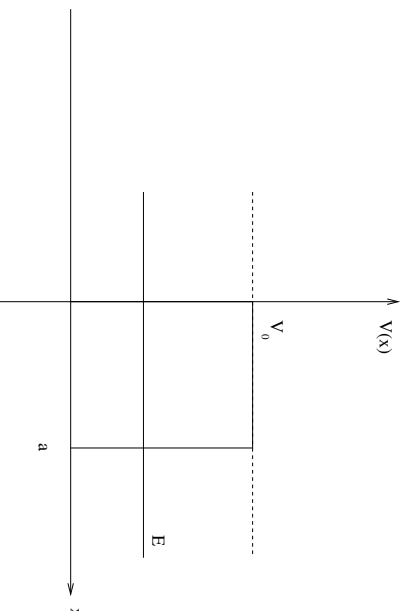
## V.12. Potentialbarriären och barrärgenomträngning

Om potentialbarriären ovan inte är oändligt bred, så kan partikeln tränga igenom till andra sidan. Vi har nu potentialen

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \text{ då } x < 0 \\ V_0 & , \text{ då } 0 < x < a \\ 0 & , \text{ då } x > a \end{cases} \quad (\text{V.169})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶◆▶▶▶▶▶ X 75



Figur 6: Potentialbarriären.

Lösningen av toSE sker analogt som ovan, och man erhåller lösningen

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & , \text{ då } x < 0 \\ Ce^{-k_2x} + De^{k_2x} & , \text{ då } 0 < x < a \\ Ee^{ik_1x} + Fe^{-ik_1x} & , \text{ då } x > a \end{cases} \quad (\text{V.170})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶◆▶▶▶▶▶ X 76

där

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (\text{V.171})$$

$$\kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (\text{V.172})$$

$Ae^{ik_1x}$  representerar den inkommande vågen framför barriären och  $Be^{-ik_1x}$  den reflekterade. Vi kan inte ha en våg som kommer in från  $x = \infty$  då det enda vi skickar in är en våg (partikel) från vänster, så  $F = 0$ .

Vi koncentrerar oss på utseendet före och efter barriären, och skriver den totala vågfunktionen som

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} Ae^{ik_1x-\omega t} + Be^{-ik_1x-\omega t} = \Psi_{in} + \Psi_{ref} & , x < 0 \\ Fe^{ik_1x-\omega t} = \Psi_{trans} & , x > a \end{cases} \quad (\text{V.173})$$

Vågfunktionen är kontinuerlig, så också dess derivata. Detta ger oss fyra villkor:

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 77

$$\begin{aligned} \psi(0-) &= \psi(0+) \\ \psi'(0-) &= \psi'(0+) \\ \psi(a-) &= \psi(a+) \\ \psi'(a-) &= \psi'(a+) \end{aligned} \quad (\text{V.174})$$

Insättning ger

$$\begin{aligned} A+B &= C+D \\ ik_1(A-B) &= -\kappa_2(C-D) \\ Ce^{-\kappa_2a} + De^{\kappa_2a} &= Ee^{ik_1a} \\ -\kappa_2(Ce^{-\kappa_2a} - De^{\kappa_2a}) &= ik_1Ee^{ik_1a} \end{aligned}$$

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 78





$$j_{in} + j_{ref} = j = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 - \frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 \quad (\text{V.179})$$

$$j_{trans} = \frac{\hbar k_1}{m} |E|^2 \quad (\text{V.180})$$

Man definierar en reflexionskoefficient  $R$  och en transmissionskoefficient  $T$  enligt

$$R = \left| \frac{j_{ref}}{j_{in}} \right| \quad (\text{V.181})$$

$$T = \left| \frac{j_{trans}}{j_{in}} \right| \quad (\text{V.182})$$

som anger hur stor andel av den inkommande sannolikhetsströmmen som reflekteras respektive transmitteras från potentialbarriären. Det gäller naturligtvis att  $R + T = 1$ . Tillämpat på den aktuella situationen ger detta

Materiens Struktur I, 2013

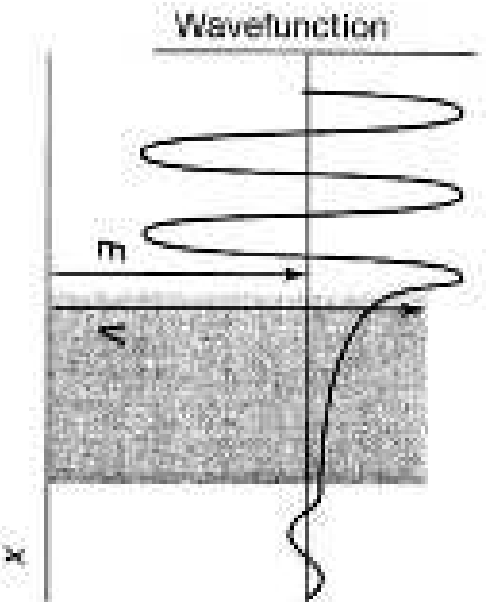
◆◆◆◆◆ × 81

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left( \frac{\kappa_2}{k_1} + \frac{k_1}{\kappa_2} \right)^2 \sinh^2 \kappa_2 a} \quad (\text{V.183})$$

$$\begin{aligned} R &= \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{B}{E} \right|^2 \left| \frac{E}{A} \right|^2 \\ &= \frac{\frac{1}{4} \left( \frac{\kappa_2}{k_1} + \frac{k_1}{\kappa_2} \right)^2 \sinh^2 \kappa_2 a}{1 + \frac{1}{4} \left( \frac{\kappa_2}{k_1} + \frac{k_1}{\kappa_2} \right)^2 \sinh^2 \kappa_2 a} \quad (\text{V.184}) \end{aligned}$$

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ × 82



Figur 7: Partikeln framför barriären har en oscillerande vågfunktion (summa av inkommande och reflekterad våg). Inne i barriären har man inga oscillationer.

Materiens Struktur I, 2013

◀▶◀▶◊▶▶▶▶ X 83

### Exempel 1.

Vi kan testa ekv. (V.183) för transmissionskoefficienten. Vi har elektroner med energin 2 eV som träffar en 10 eV potentialenergibarriär, som har tjockleken 0,1 nm.

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = 7,29 \text{ nm}^{-1}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} k_1 = \sqrt{\frac{10 - 2}{2}} k_1 = 2k_1$$

$$k_2 a = 1,45$$

En insättning i ekv. (V.183) ger  $T \approx 0,14$ . Elektronerna har alltså en 14 % chans att tränga igenom barriären. Elektronernas tunnelseffekt utnyttjas t.ex. i elektroniska komponenter.

Materiens Struktur I, 2013

◀▶◀▶◊▶▶▶▶ X 84

### Exempel 2.

$\alpha$ -sönderfall som observeras i naturen kan förklaras med tunneleffekten. Vid  $\alpha$ -sönderfall av  $^{232}\text{Th}$  har en  $\alpha$ -partikel tillgång till energin 4 MeV inne i kärnan.  $\alpha$ -partikelns frigörelse hindras dock av Coulombvallen (= Coulombrepulsionen mellan  $\alpha$ -partikel och restkärnan). Coulombvallens storlek är 28 MeV. Med en mycket låg sannolikhet kan  $\alpha$ -partikeln komma ut ur moderkärnan. Den låga sannolikheten leder till en lång halveringstid för  $\alpha$ -sönderfallet.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ◀ ◊ ▶▶▶▶ X 85

### Exempel 3.

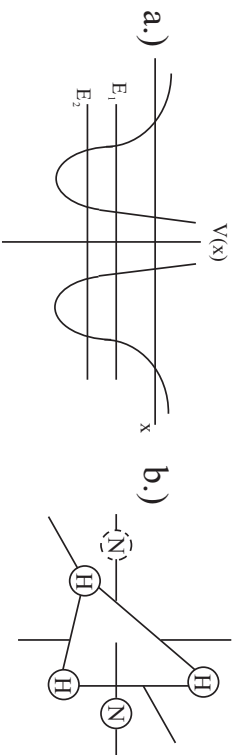
$\text{NH}_3$ -molekylen har en tetraeder-lik struktur, där de tre väteatomerna bildar ett plan, som utgör pyramidens bas, se figur 8, medan kväveatomen kan befinna sig i två symmetriska lägen (i pyramidens spets) i förhållande till basplanet. Kvävemolekylen lägen kan beskrivas med två symmetriska potentialenergikurvor.

Kvävemolekylen tunlar mellan de båda jämviktslägena med en bestämd frekvens. Frekvensen är 23870 MHz och den används som standard för de första atomklockorna. Då kväveatomen har har energierna  $E_1$  respektive  $E_2$  i de olika lägena kan oskiltonsfrekvensen bestämmas som

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀◀◀ ◊ ▶▶▶▶ X 86



Figur 8: Potentialfunktionen för två likvärdiga lägen. De båda lägena åtskiljs av en potentialvall. Då kväveatomen rör sig till de två möjliga lägena i ammoniakmolekylen ( $\text{NH}_3$ ), tunnlar den igenom potentialvallen med en bestämd frekvens.

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶ X 87

### V.13. Den fria partikeln

För en fri partikel har vi SE

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (\text{V.185})$$

då  $V(x) = 0$ .

Den allmänna lösningen till en dylik DE är

$$\psi = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{i(-kx - \omega t)} \quad (\text{V.186})$$

Insättning ger

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega \quad (\text{V.187})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶ X 88

Notera att  $E = \hbar\omega$  enligt Einsteins relation för kvanta och  $p = \hbar k$  gäller enligt de Broglie-relationen.

Vi ser skillnaden i de två termerna i lösningen genom att operera med rörelsemängdsoperatoren:

$$p_{op} e^{i(kx - \omega t)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{i(kx - \omega t)} = \hbar k e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{V.188})$$

$$p_{op} e^{i(-kx - \omega t)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{i(kx - \omega t)} = -\hbar k e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{V.189})$$

Vågorna rör sig alltså åt olika håll på  $x$ -axeln, men har samma energi. Vågorna har välkända rörelsemängder,  $\hbar k$  och  $-\hbar k$ .

Väntevärdet för positionen:

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 89

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} x e^{ikx} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x dx \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} (t^2 - (-t)^2) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{V.190})$$

Det förväntade läget är  $x = 0$ , men förutsägelsen är behäftad med en stor osäkerhet, som vi skall visa. Den kvadrerade avvikelserna definieras som

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 90

$$\begin{aligned}
(\Delta x)^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 dx - 0^2 \\
&= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{3} (t^3 - (-t)^3) \\
&= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{2}{3} t^3 \\
&= \infty
\end{aligned}
\tag{V.191}$$

vilket ger oss att  $\Delta x = \infty$ . En partikel vet vi oftast ungefär var den befinner sig, så dessa vågor kan inte beskriva en partikel. Vi har sett tidigare att ett sätt att korrigera situationen är att forma ett vågpaket.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ◀ ◊ ▶▶▶▶ × 91

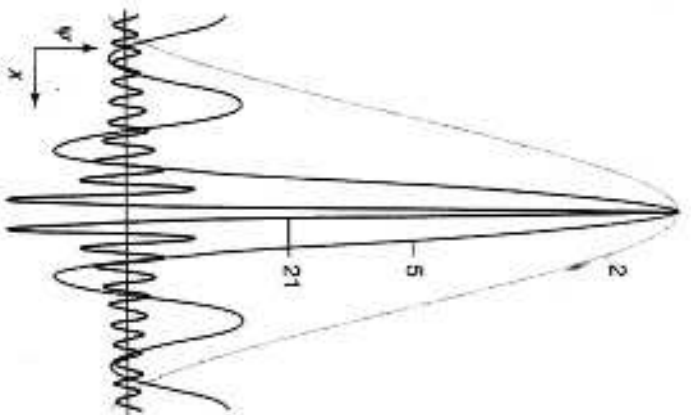
En ledtråd till detta får vi också i och med observationen att SE ovan **inte har några randvillkor**. Med andra ord är vilka som helst värden på energin  $E = \hbar\omega$  tillåtna, inte bara vissa diskreta värden som i t.ex. fallet med en potentiallåda.

Detta gör att vi kan generalisera den mest allmänna lösningen till en **kontinuerlig integral istället för en diskret summa** över tillåtna energivärden:

$$\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) e^{i(kx - \omega t)} \iff \sum_k C_k e^{i(kx - \omega t)} \tag{V.192}$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀◀◀ ◊ ▶▶▶▶▶▶ × 92



Figur 9: Vågfunktionen för en partikel kan uppfattas som superpositionen av många vågfunktioner.

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 93

Väntevärdet för positionen:

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \int dx \Psi^*(x, t)x\Psi(x, t)dx \\
 &= \int dx \int dk C^*(k) e^{-ikx} x \int dq C(q) e^{iqx} \\
 &= \int dx x \int dk \int dq C^*(k) C(q) e^{-i(k-q)x} \quad (\text{V.194})
 \end{aligned}$$

Osäkerheten ges av uttrycket

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (\text{V.195})$$

där

Materiens Struktur I, 2013

◆◆◆◆◆ X 94

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int dx \Psi^*(x, t) x^2 \Psi(x, t) dx \\
&= \int dx x^2 \int dk \int dq C^*(k) C(q) e^{-i(k-q)x}
\end{aligned} \tag{V.196}$$

Rörelsemängdsoperatoren ger oss

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int dx \Psi^*(x, t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) \\
&= \int dx \int dk C^*(k) e^{-ikx} \int dq \hbar q C(q) e^{iqx} \tag{V.197} \\
&= \int dx \int dk \int dq (\hbar q) C^*(k) C(q) e^{-i(k-q)x} \tag{V.198}
\end{aligned}$$

För osäkerhetens beräkning behövs

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶◆▶▶▶▶▶ × 95

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= -\hbar^2 \int dx \Psi^*(x, t) \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x, t) \\
&= \int dx \int dk \int dq (\hbar q)^2 C^*(k) C(q) e^{-i(k-q)x} \tag{V.199}
\end{aligned}$$

Låt vågorna vara viktade runt ett medeltal  $\bar{k}$ :

$$C(k) = C_0 e^{-(k-\bar{k})^2/\sigma^2} \tag{V.200}$$

Den allmänna formen för integranden är nu i våra fall

$$\begin{aligned}
& dx x^m dq q^n dk C^*(k) C(q) e^{-i(k-q)x} \\
& = |C_0|^2 dx x^m dq q^n dk e^{-(k-\bar{k})^2/\sigma^2} e^{-(q-\bar{q})^2/\sigma^2} e^{-i(k-q)x} \tag{V.201}
\end{aligned}$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶◆▶▶▶▶▶ × 96



Notera att redan i detta skede har vi fått icke-triviala integraler att utföra ... Vi kommer inte att utföra dessa här, utan lämnar detta som en illustration.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀◀◀◊▶▶▶▶▶ × 97

## V.14. Den tredimensionella lådan

I tre dimensioner skrivs energiekvationen som

$$\frac{p^2}{2m} + V(x, y, z) = E \quad (\text{V.202})$$

Operatorsubstitutionerna är

$$p_j \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad j \in 1, 2, 3 \quad (\text{V.203})$$

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{V.204})$$

Materiens Struktur I, 2013

◀◀◀◀◊▶▶▶▶▶ × 98

vilket ger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + V(x, y, z) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (\text{V.205})$$

som skrivs

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (\text{V.206})$$

I stället för att som tidigare integrera över  $x$ -axeln så integrerar vi nu över alla rumsaxlar, så att  $dx$  ersätts med

$$dV = dx dy dz = d\tau \quad (\text{V.207})$$

Andra notationer är

$$dV = d^3r = d^3x \quad (\text{V.208})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 99

T.o.m. notation som

$$dV = dt \quad (\text{V.209})$$

förekommer i vissa böcker och publikationer, men högra ledet ger ett intryck av en väg-integral vilket kan vara förvirrande.

Normaliseringen är

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz \Psi^*(x, y, z, t) \Psi(x, y, z, t) = 1 \quad (\text{V.210})$$

Lösningen för en tidsberoende potential är igen

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi^{(tot)}(x, y, z) e^{-iEt/\hbar} \quad (\text{V.211})$$

Materiens Struktur I, 2013

▶▶▶▶◇▶▶▶▶▶ × 100

Man får lösningar för de olika riktningarna  $x$ ,  $y$  och  $z$ , och betecknar dessa

$$\psi_{n_1}(x), \psi_{n_2}(y) \text{ och } \psi_{n_3}(z) \quad (\text{V.212})$$

Den totala tidsberoende vågfunktionen är

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}^{(tot)}(x, y, z) = \psi_{n_1}(x) \cdot \psi_{n_2}(y) \cdot \psi_{n_3}(z) \quad (\text{V.213})$$

Det är enklare att lösa problemet då man har sfärisk symmetri. T.ex. i atomen har man en elektron som befinner sig på avståndet  $r$  från atomens kärna. Detta görs i ett senare kapitel.

Låt oss som exempel ta en tredimensionell potentiallåda med oändligt höga kanter. Låt lådans "väggar" vara i  $x = \pm a_1/2$ ,  $y = \pm a_2/2$ ,  $z = \pm a_3/2$ . Enligt tidigare granskning i fallet med en dimension vet vi att lösningen nu är

$$\psi_{n_j}(x_j) = \begin{cases} A_j \cos(n_{j1}\pi x_j/a_j) & , \text{ då } n_{j1} = 1, 3, 5, \dots \\ B_j \sin(n_{j2}\pi x_j/a_j) & , \text{ då } n_{j2} = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (\text{V.214})$$

för riktning  $x_j$ , där  $j = 1, 2, 3$ .

Materiens Struktur I, 2013

Vi använder SE

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi \quad (\text{V.215})$$

inuti lådan och får efter insättning

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[ \left( \frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left( \frac{n_2}{a_2} \right)^2 + \left( \frac{n_3}{a_3} \right)^2 \right] = E_{n_1, n_2, n_3} \quad (\text{V.216})$$

Låt oss nu betrakta ett specialfall:  $a_1 = a_2 = a$ . Detta betyder att lådan är lika bred i  $x$ - och  $y$ -axeln. Energin är

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[ \frac{n_1^2 + n_2^2}{a^2} + \left( \frac{n_3}{a_3} \right)^2 \right] \quad (\text{V.217})$$

Värdena för  $n_1$  och  $n_2$  kan kastas om utan att det syns i energin. Detta betyder att tillstånden som motsvarar  $(n_1, n_2, n_3)$  och  $(n_2, n_1, n_3)$  har samma energi, och man säger att denna energi är **degenererad**.

Materiens Struktur I, 2013

Omkastningen betyder dock att vi har olika spatiala vågfunktioner (olika kvantmekaniska tillstånd):

$$\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z) \neq \psi_{n_2}(x)\psi_{n_1}(y)\psi_{n_3}(z) \quad (\text{V.218})$$

$$\text{men} \quad (V.219)$$

$$E_{n_1, n_2, n_3} = E_{n_2, n_1, n_3} \quad (\text{V.220})$$

En **degeneration** betyder allmänt att det finns en **symmetri** för systemet. I detta fall är de fråga om en rumslig symmetri, då lådan har samma bredd i  $x$ - och  $y$ -led.

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ × 103

## Uppgifter

- [1] En partikel i en endimensionell låda är bunden till intervallet  $[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$  och befinner sig i sitt första exciterade tillståndet. Beräkna sannolikheten för att finna partikeln i subintervallet  $[\frac{a}{8}, \frac{3a}{8}]$ . (B & M 5.6).
- [2] Vi antar att rörelsen hos en atom i en metall kan jämföras med rörelsen hos en partikel fäst vid en fjäder. Anta att fjäderkonstanten för en kopparatom definieras av vinkelfrekvensen  $\omega_0 \equiv 10^{13}$  rad/s. Beräkna atomens amplitud i det lägsta energitillståndet. Kopparatomens massa kan antas vara 63 vätemassor. (B & M 5.14).
- [3] Vi undersöker egenskaperna hos en vågfunktion (= egenfunktion) som konstrueras för en lådpotential med djupet  $V_0$  och bredden  $a$ . Vi låter egenfunktionen tränga in i det klassiskt förbjudna området. Vi definierar inträngningssjupet  $d$  som en sträcka över vilken sannolikhetsdensiteten minskar med faktorn  $1/e$  i det förbjudna området. Härled en formel för  $d$  och beräkna inträngningssjupet för en elektron för vilken gäller  $V_0 - E = 3eV$ . (B & M 5.22).
- [4] Anta att en partikel i en endimensionell låda befinner sig i sitt första exciterade tillstånd. Beräkna väntevärdena  $\langle x \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p \rangle$  och  $\langle p^2 \rangle$ . Uppskatta osäkerheterna  $\Delta x$  och  $\Delta p$  samt beräkna produkten av dessa. (B & M 5.28).
- [5] En partikel med energin  $E$  träffar en barriär med höjden  $V_0$ ,  $E > V_0$ . Partikeln närmar sig

Materiens Struktur I, 2013

◀◀ ▶▶ ◊ ▶▶▶▶ × 104

barriären, som i princip är oändligt lång, från vänster. Bestäm vågfunktionen för detta fall , med beaktande av alla bidrag till denna. (B & M 5.34).

**[6]** Transmissionskoefficienten vid barriärgenomträngning kan ges som

$$T = \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sinh^2 k_2 a \right]^{-1}. \text{ Härled det approximativa uttrycket}$$

$$T = 16 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2k_2 a}$$

Detta gäller då  $a$  är betydligt större än  $\frac{1}{k_2}$ . (B & M 5.37).