

PHYS118 SAMMENDRAG

Laget av Augustin Winther
v. 2024-06-03

Gule bokser er
definisjoner.

Blå bokser er fysiske
lover/teorier fra pensum.

Grønne bokser er
tilleggsinfo.

Kan inneholde feil.
Dekker ikke hele pensum.

Kontaktinfo for å gi
tilbakemeldinger finnes på
nettsiden min:

winther.io

NB: Bruker «bra-ket» notasjon i
kvantemek. da det blir brukt
mye videre i kvante. Notasjonen
er ikke del av pensum.

Hendelse i romtid

Noe ved en gitt tid t (tidkoordinat) i en gitt
posisjon $\mathbf{r} = [x, y, z]$ (romkoordinat) i et ref.sys.

Firervektor

En firervektor \mathbf{A}^μ består av én «tidaktig»-
koordinat (indeks 0), og tre «romaktige»-
koordinater (indeks 1 til 3).

$$\mathbf{A}^\mu = [A_0, A_1, A_2, A_3] \text{ (kontravariant)}$$

Dotproduktet mellom to firervektorer er
 $\mathbf{A}_\mu \mathbf{B}^\mu = (A_0 B_0) - (A_1 B_1 + A_2 B_2 + A_3 B_3)$

$$\text{hvor } \mathbf{A}_\mu = [A_0, -A_1, -A_2, -A_3] \text{ (kovariant)}$$

Posisjons-firervektor

En firervektor som beskriver en hendelse:

$$\mathbf{R}^\mu = [ct, \mathbf{r}] = [ct, x, y, z]$$

Momentum-firervektor

En firervektor med energien E og momentumet \mathbf{p}
til en partikkel: $\mathbf{P}^\mu = [E, \mathbf{pc}] = [E, cp_x, cp_y, cp_z]$

Lorentz-invarianter (invariant)

Noe som ikke endrer seg ved Lorentz-
transformasjoner, altså har lik verdi i alle
inertialsystemer. Merk $\mathbf{A}_\mu \mathbf{A}^\mu$ er *alltid* invariant.

Invariant masse

Invariant masse til et system, av n partikler er

$$(mc^2)^2 = (\sum_{i=1}^n \mathbf{P}_i)_\mu (\sum_{i=1}^n \mathbf{P}_i)^\mu$$

$$= (\sum_{i=1}^n E_i)^2 - (\sum_{i=1}^n \mathbf{p}_i)^2 c^2$$

hvor m er den invariante massen.

Mandelstam-variabel s

Et system med to partikler som kommer ut med
åpningsvinkel θ har invariant $s = E_{tot}^2$ lik

$$s = (\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2)_\mu (\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2)^\mu$$

$$= (E_1 + E_2)^2 - (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2 c^2$$

$$= (E_1 + E_2)^2 - (p_1^2 + p_2^2 + 2p_1 p_2 \cos \theta) c^2$$

Lorentz-transf. for energi og moment.

$$\begin{bmatrix} E' \\ (pc)' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma & -\gamma\beta \\ -\gamma\beta & \gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E \\ pc \end{bmatrix}$$

SPESIELL RELATIVITET og ROMTID

Referansesystem (ref.sys.)

Et abstrakt koordinatsystem hvis origo, orientering, og
størrelse er spesifisert av ett sett med referanse punkt.

Relativistisk

Noe som har hastighet
sammenlignbar med c .

Inertialsystem

Et referansesystem der Newtons første lov gjelder, dvs. et objekt som ikke er
påvirket av en kraft vil bevege seg med konstant hastighet eller stå i ro.

Den spesielle relativitetsteorien (SR) sine postulat

1. Fysikkens lover er invariant i alle inertialsystemer.
2. Lysets hastighet i vakuum er den samme for alle observatører uansett
bevegelsen til observatøren og/eller lyskilden.

Referansesystem-transformasjoner

Inertialsystemet R' beveger seg med fart u i inertialsystemet R , langs systemenes
felles x og x' retning og de har samme origo ved $t = t' = 0$.

Galilei-transformasjon

Likningsform

$$\begin{aligned} t' &= t \\ x' &= x - ut \\ y' &= y \\ z' &= z \end{aligned}$$

Matriseform

$$\begin{bmatrix} t' \\ x' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -u & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ x \end{bmatrix}$$

Lorentz-transformasjon

Likningsform

$$\begin{aligned} ct' &= \gamma(ct - \beta x) \\ x' &= \gamma(x - \beta ct) \\ y' &= y \\ z' &= z \end{aligned}$$

Matriseform

$$\begin{bmatrix} ct' \\ x' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma & -\gamma\beta \\ -\gamma\beta & \gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} ct \\ x \end{bmatrix}$$

hvor $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$ er **Lorentz-faktoren** og $\beta = u/c$. Merk at det er kun
komponentene langs bevegelsesretningen (x i dette tilfellet) som kan transformeres.

Tidsdilatasjon: I R skjer to hendelser på samme romkoordinat separert av tiden Δt .
Tiden som har passert mellom hendelsene i R' er $\Delta t' = \gamma \Delta t = \gamma \tau$, hvor τ er
egentiden (tiden målt i systemet der hendelsene skjedde på samme romkoordinat)

Lengdekontrakasjon: I R ligger et objekt i ro med lengde L i x -retning. I R' har
dette objektet lengde $L' = L/\gamma$

Hastighets transformasjon: Om et objekt har hastighet $\mathbf{v} = [v_x, v_y, v_z]$ i R , da er

$$v'_x = \frac{v_x - u}{1 - v_x u/c^2} \quad v'_y = \frac{v_y}{\gamma (1 - v_x u/c^2)} \quad v'_z = \frac{v_z}{\gamma (1 - v_x u/c^2)}$$

Doppler-forskyving: Lyskilde med frekvens ν (gresk «nu») sent fra et objekt i ro i
 R er motat i R' med $\nu' = \nu \sqrt{(1 \pm |u|/c)/(1 \mp |u|/c)}$. Bruk topp fortegnene (+ og -)
om kilden og mottakeren kommer nærmere, og bunn fortegnene om de går fra
hverandre (- og +)

Partikkel

Ett lite *lokalisert* objekt som kan bli beskrevet av flere fysiske egenskaper.

Kvant

Minste mengden av en fysisk ting involvert i fundamentalinteraksjoner.

Foton

Masseløse elementære partikler som er ett kvant av det elektromagnetiske spekteret. Alltid hastighet lik c .

Foton energi og momentum

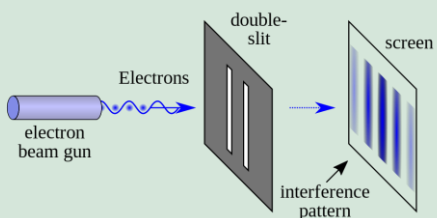
$$E = h\nu \quad p = E/c = h/\lambda$$

Merk igjen, ν (gresk «nu») er frekvens

Bølge-partikkel-dualitet

Kvantobjekter oppfører seg som partikler eller bølger.

Dobbelspalteeksperiment:



Om kvantepartikler oppførte seg som partikler ville vi detektert to sterke linjer i midten av skjermen, med svakere deteksjoner rundt. I stedet ser vi interferens mønster, noe som tilsier en «bølge-aktig» oppførsel. Sender man én og én kvantepartikkel om gangen, observerer man at sannsynligheten på hvor den lander følger interferens mønsteret, og man opplever at det detekteres én og én kvantepartikkel på skjermen, altså en partikkel-aktig oppførsel når den blir detektert.

Tegning av [NekoJaNekoJa CC BY-SA 4.0](#)

PARTIKLER og BØLGER

Bølge

Svingninger som brer seg gjennom rommet. Utbredelsen beskrives med en bølgefunksjon.

Sinusoidiale bølgefunksjoner i \mathbb{R}

Bølge i tid:

$$y = A \sin(\omega t) = A \sin(2\pi\nu t) = A \sin\left(\frac{2\pi}{T} t\right)$$

A : amplitude T : periode

$$\omega = \frac{2\pi}{T}: \text{vinkelfrekvens} \quad \nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{T}: \text{frekvens}$$

Bølge i rom:

$$y = A \sin(kx) = A \sin(2\pi fx) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right)$$

A : amplitude λ : bølgelengde

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}: \text{bølge no.} \quad f = \frac{k}{2\pi} = \frac{1}{\lambda}: \text{romlig frekvens}$$

Kompleks-eksponentiale bølgefunk.

$$\text{Eulers-formel: } e^{ix} = \cos x + i \sin x \quad |e^{ix}| = 1$$

$$\cos x = \frac{1}{2}(e^{ix} + e^{-ix}) \quad \sin x = \frac{1}{2i}(e^{ix} - e^{-ix})$$

Eksempel på kompleks-eksp. bølge med amplitude A og vinkelfrekvens ω : $y = Ae^{i\omega t}$

Ett forsøk på å forklare dualiteten

Kvantepartikler eksisterer som bølger som brer seg i rommet og kan derfor beskrives med en bølgeligning som gir sannsynligheten på hvor partikkelen er. Når de blir «målt» så «kollapser» bølgen til en tilstand hvor partikkelen er på én lokalisasjon.

Heisenbergs usikkerhetsrelasjon

En konsekvens av bølge-partikkel-dualitet er at man aldri presist kan bestemme både posisjon og bevegelsesmengde til en kvantepartikkel.

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2, \text{ hvor } \Delta \text{ er usikkerhet.}$$

Har også at $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$.

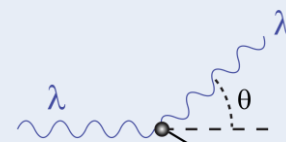
STRÅLING

Compton-spredning

Elastisk kollisjon mellom høyenergiske foton og ladde partikler, hvor fotonet avsetter energi i partikkelen. For foton-elektron kollisjon:

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

hvor λ og λ' er bølgelengden til fotonet før og etter kollisjonen, m_e elektronmassen, og θ spredningsvinkelen.



Tegning av [JabberWok CC BY-SA 3.0](#)

Formelen over er utledet fra

Mandelstam-variabel t :

$$t = (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_3)_\mu (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_3)^\mu \\ = (\mathbf{P}_4 - \mathbf{P}_2)_\mu (\mathbf{P}_4 - \mathbf{P}_2)^\mu$$

Der indeksene repr. partikkelen i kollisjonen $1 + 2 \rightarrow 3 + 4$

Fotoelektriskeffekt

Bundne elektroner som blir frigjort fra en metalloverflate når den bestråles av elektromagnetisk stråling. Dette skjer ved at elektroner absorberer fotoner med nok energi til å løsrive elektronene fra atomkjernen. Elektronet får kinetisk energi lik $E_K = h\nu - \phi$ hvor ϕ er det mekaniske arbeidet elektronet må utføre for å frigjøres fra materialet. Er energien til fotonet $h\nu < \phi$ blir ikke elektroner frigjort, det kan derimot bli eksitert.

Røntgenstråling

Kan bli produsert ved at elektroner blir akselerert for å så kollidere med ett materiale. Elektronene bremses ned i det elektriske feltet til materialet, noe som er muliggjort ved at de innkommende elektronene sender ut fotoner (bremsestråling). Strålingspektret fra situasjonen er kontinuerlig, med maksimumenergi lik den kinetiske energien til elektronene $K = eV$, hvor e er elementærladningen, og V er spenningen brukt til å akselerere elektronene. Er den kinetiske energien til elektronene høy nok vil det ofte føre til at de «dytter bort» elektroner i det innerste skallet til atomer i materialet. Det dukker da opp skarpe topper i strålingspektret. Man kan forutsi at disse skarpe toppene har fotonenergi lik

$$E = h\nu = 13.6(Z - 1)^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) eV$$

Hvor Z er atomnummeret til materialet, og n og m er atomskall nummer. Dette kommer av at ladningen til kjernen nå er effektivt $Z - 1$ siden ett elektron ble dyttet bort. **Merk** eV er her elektron-volt enheten.

Bra-Ket notasjon og Indreprodukt

Ket: $|v\rangle$ er en kolonnevektor i et kompleks Hilbert-rom \mathcal{H} .

Bra: $\langle f|$ er en transformasjon fra \mathcal{H} til \mathbb{C} .

Bra-Ket: $\langle f||v\rangle$ transformerer vektoren $|v\rangle$ til et kompleks tall.

Indreprodukt: $\langle u|v\rangle \in \mathbb{C}$ er indreproduktet av $|u\rangle$ og $|v\rangle$, og er ekvivalent med transformasjonen $\langle u||v\rangle$ hvor $\langle u| = |u\rangle^\dagger = |u\rangle^{*\top}$

Begge diskret lineære komb.: $\langle u|v\rangle = \sum_n u_n^* v_n$ | Begge kont lineære komb.: $\langle u|v\rangle = \int u^*(x)v(x)dx$

\dagger representerer adjungert, som er det samme som å ta den transponerte \top av det komplekse konjugante $*$.

Lineære Operatorer

Posisjon: $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r},$
 $\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z$

Momentum: $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}, \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$
 $p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$

Kinetisk translasjonsenergi: $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

Potensiell energi: $\hat{V} = V$
(situasjons betinget)

Hamiltonian: $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$

Total energi: $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Viktige egenskaper: $\hat{S} = \hat{A} + \hat{B} \Rightarrow \hat{S}|\Psi\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle + \hat{B}|\Psi\rangle$
 $\hat{M} = \hat{A}\hat{B} \Rightarrow \hat{M}|\Psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\Psi\rangle)$

KVANTEMEKANIKK

Kvantetilstand $|\Psi(t)\rangle$

Enhetsvektor i \mathcal{H} som kan skrives som en lineær kombinasjon av bl.a.; energitilstander $|E_n\rangle$ (diskret), pos.stilstander $|x\rangle$ (kont.), etc.:
 $|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)|E_n\rangle = \int b(x,t)|x\rangle dx$ etc.
hvor a_n er **sannsynlighetsamplituder**, og $b(x,t)$ en kont. **sannsynlighetsamplitudedefunk.**

Bølgefunksjon Ψ

En representasjon av $|\Psi(t)\rangle$ i en basis som spenner \mathcal{H} .
Ett eksempel er posisjons-rom bølgefunksjonen som er definert ved: $\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}|\Psi(t)\rangle$, hvor $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ er basisen som spenner \mathcal{H} , der \mathbf{r} representerer et punkt i posisjonsrommet, og er egenverdien til posisjonsoperatoren som opererer på basisen: $\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$. Dette gir at $|\Psi(t)\rangle$ i posisjons basisen er $|\Psi(t)\rangle = \int \Psi(\mathbf{r}, t)|\mathbf{r}\rangle d^3\mathbf{r}$ og operator på $\Psi(\mathbf{r}, t)$ er definert $\hat{A}\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}|\hat{A}|\Psi(t)\rangle$

Kvantesystem

Ett system som følger kvantemekanikkens postulater:

1. Systemets tilstand til en gitt tid t kan bli beskrevet av en vektor $|\Psi(t)\rangle$ i et kompleks Hilbert-rom \mathcal{H} (**tilstandsrom**).
Uformelt er et **Hilbert-rom** et vektorrom med indreprodukt som kan ha uendelig dimensjon.

2. Tilstanden $|\Psi(t)\rangle$ utvikler seg over tid etter den tidsavhengige Schrödinger-likningen.

$$\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \hat{E}|\Psi(t)\rangle$$

3. Hver målbar egenskap A til systemet kan representeres av en operator $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ hvor målt verdi er én av egenverdiene til \hat{A} .

4. Ved å måle en målbar egenskap A så «kollapser» $|\Psi(t)\rangle$ fra å være i en diskret eller kontinuerlig superposisjon av egentilstandene til \hat{A} , til én **egentilstand** av \hat{A} . Resultatet av målingen vil være den reelle tilhørende **egenverdien**.

Diskret superpos.:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)|A_n\rangle \rightarrow |A_n\rangle,$$

$$\text{hvor: } \hat{A}|A_n\rangle = A_n|A_n\rangle$$

Kont. superpos.:

$$|\Psi(t)\rangle = \int a(x,t)|A\rangle dx \rightarrow |\alpha\rangle,$$

$$\text{hvor: } \hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

Gitt ingen repeterte egenverdier!

5. Sannsynligheten P for at en måling av A til en gitt tid t er lik en spesifikk egenverdi, er kvadratet av modulusen til projeksjonen (indreproduktet) av systemtilstanden rett før kollaps på egentilstanden. Som er lik kvadratet av modulusen til sannsynlighetsamplituden til egentilstanden:

$$\text{Diskret: } P(A_n) = |a_n(t)|^2$$

$$\text{Kont.: } dP(\alpha) = |a(\alpha, t)|^2 d\alpha$$

Den tidsavhengige Schrödinger-likningen (TDSE)

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

Gitt en initial betingelse $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ved $t = 0$, så kan TDSE fortelle oss hvordan systemet utvikler seg over tid.

Den tidsuavhengige Schrödinger-likningen (TISE)

Løser TDSE ved separasjonen $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\tau(t)$ og får

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

$$\text{hvor } \tau(t) = e^{-(iEt/\hbar)}$$

der E blir kalt **egenenergi**. (Merk at \hat{H} må være konst.!).

Krav til bølgefunksjon

$|\Psi(t)\rangle$ er en enhetsvektor, som betyr $\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 1$ som for en bølgefunksjon representasjon $\Psi(x, t)$ av $|\Psi(t)\rangle$ betyr $\int \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ (**Normaliserings kravet**)

Den må også, som vi ser over, være **kvadratisk integrerbar**. I tillegg må den også være **kontinuerlig** og **kontinuerlig deriverbar** for å kunne løse TDSE og TISE.

Sannsynlighetstetthet

Sannsynligheten P for å finne en partikkel på et område $R \subset \mathbb{R}^3$ er $P(\mathbf{r} \in R) = \int_R |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}$, hvor $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ er **sannsynlighetstettheten**.

Forventningsverdi

Gjennomsnittlig verdi $\langle A \rangle$ av en målbar egenskap A .

$$\langle A \rangle = \langle \Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \hat{A} \Psi d^3\mathbf{r}$$

hvor $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$ er bølgefunksjonen. Man kan se på det som å bruke operatoren sammen med totalsannsynligheten.

Usikkerhet

En målbar egenskap A har usikkerhet

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

TISE i rommet løst ved variabel-seperasjon

Kartesisk: $V = V(\mathbf{r}) = V(x, y, z)$ og $\psi = \psi(\mathbf{r}) = \psi(x, y, z)$.

Ved variabel-seperasjon har man: $\psi = X Y Z$ der $X = X(x)$, $Y = Y(y)$ og $Z = Z(z)$ som gir TISE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(X'' + Y'' + Z'') + V X Y Z = E X Y Z$$

Sfærisk: Koordinatskifte fra kartesisk til sfærisk:

$$x = r \sin(\theta) \cos(\phi), \quad y = r \sin(\theta) \sin(\phi), \\ z = r \cos(\theta), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

der $\theta \in [0, \pi]$ **polarvinkel** og $\phi \in [0, 2\pi]$ **azimutalvinkel**.

Gir Laplace-operator lik:

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

$V = V(\mathbf{r}) = V(r, \theta, \phi)$ og $\psi = \psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$.

Ved variabel-seperasjon har man: $\psi = R \Theta \Phi$ der $R = R(r)$, $\Theta = \Theta(\theta)$ og $\Phi = \Phi(\phi)$ som gir TISE:

$$\frac{\Theta \Phi}{r^2} (2rR' + r^2 R'') + \frac{R \Phi}{r^2 \sin \theta} (\cos(\theta)\Theta' + \sin(\theta)\Theta'') + \frac{R \Theta}{r^2 \sin^2 \theta} \Phi'' \\ + V R \Theta \Phi = E R \Theta \Phi$$

Tidsutvikling og generell løsning av TDSE

Gitt \hat{H} er konstant $\Leftrightarrow \hat{V} = V$ ikke avhengig av tid t , da er

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\tau(t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$$

en løsning til TDSE, hvor $\psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}, 0)$ er initial betingelsen.

Bølgefunksjonen etter en viss tid t vil dermed bli tidsutviklet til

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

Merk at dette er én løsning til TDSE når \hat{H} er konst., men det kan være mange mulige løsninger, og hver løsning kan skrives som en lineær kombinasjon av alle løsningene:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n(\mathbf{r}, t)$$

Her skrives bølgefunksjonen i basisen av egentilstandene

$\Psi_n(\mathbf{r}, t)$, hvor koeffisientene er gitt ved $c_n = \langle \Psi_n(\mathbf{r}, t) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle$.

Putter man denne lineær kombinasjon i TDSE får man at:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(0) \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Stasjonære tilstander

Tilstander $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$ som er løsninger på TISE. Putter man en stasjonær tilstand Ψ i TDSE (hvor \hat{H} er konstant) så beskriver TDSE tidsutviklingen til Ψ gitt ved $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, 0) e^{-iEt/\hbar}$

Merk at bølgefunksjonen i seg selv er tidsavhengig, men alle målbare egenskaper er ikke det. Det kommer fra at sannsynlighetstettheten er uavhengig av tid, fordi:

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{r}, 0) e^{-iEt/\hbar}|^2 = |\Psi(\mathbf{r}, 0)|^2 |e^{-iEt/\hbar}|^2 = |\Psi(\mathbf{r}, 0)|^2$$

Viktige løsninger av TISE gitt potensialfunksjoner

1. **Partikkel i endelig brønn** (1-dim)
2. **Harmonisk oscillator** (1-dim.) og **isotropisk isolator** (3-dim.)
3. **Partikkel i uendelig kube** (3-dim.) og **partikkel i uendelig brønn** (1-dim.)

Tips: Om V er symmetrisk om et punkt x_0 er det rimelig å anta at ψ er symmetrisk eller anti-symmetrisk om x_0 .

- 2 $V(x) = 1/2 m\omega^2 x^2$ hvor $\omega^2 = k/m$

$$\phi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\sqrt{m\omega/\hbar} x) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}) \quad E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \\ n = 0, 1, 2, \dots$$

Ved 3-dim.: $V(\mathbf{r}) = 1/2 m\omega^2 \mathbf{r}^2$, så har man:

$$\psi_{a,b,c}(\mathbf{r}) = \phi_a(x)\phi_b(y)\phi_c(z) \\ E_{a,b,c} = \hbar\omega(a + b + c + 3/2)$$

- 1 $V(x) = 0$ når $x \in [0, L]$, ellers $V(x) = V_0$

$$\psi_1(x) = F e^{\kappa x} \quad \text{når } x \in (-\infty, 0] \\ \psi_2(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad \text{når } x \in (0, L) \\ \psi_3(x) = G e^{-\kappa x} \quad \text{når } x \in [L, \infty)$$

$$\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

Konstantene A, B, F og G finner man ved at bølgefunksjonene må være kont. og deriverbare og normaliserte.

- 3 $V(\mathbf{r}) = 0$ når $0 \leq x, y, z, \leq L$, ellers $V(\mathbf{r}) = \infty$

$$\psi_{a,b,c}(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin \frac{a\pi x}{L} \sin \frac{b\pi y}{L} \sin \frac{c\pi z}{L} \\ E_{a,b,c} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (a^2 + b^2 + c^2) \\ a, b, c = 1, 2, 3, \dots$$

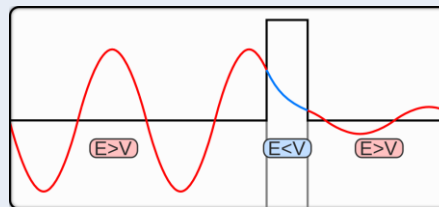
Ved 1-dimensjon reduseres det til:

$$\psi_a(x) = \sqrt{2/L} \sin(a\pi x/L) \quad E_a = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} a^2$$

Antall komb. av (a, b, c) som gir samme E er **degenerasjonsgraden** g .

Tunneleffekten

Et kvantesystem som beveger seg mot en potensialbarriere vil ende opp med å bli reflektert bort fra den ifølge tidsutviklingen av bølgefunksjonen, men gitt potensialbarrieren er tynn nok, så sier sannsynlighetstettheten at det er en mulighet for at kvantesystemet befinner seg på den andre siden av barrieren også, selv om energien er lavere enn potensialbarrieren.



Tegning av Felix Kling [CC BY-SA 3.0](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/)

Tilnærmet sannsynlighet for at en 1-dimensjonal partikkel i en endelig brønn slipper igjennom en barriere, er gitt ved: $T = G e^{-2\kappa L}$

$$G = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

V_0 er høyden på barrieren. E energien til partikkelen. L bredden på barrieren.

Coulomb-potensialet

Potensialet til et elektron i bane rundt en hydrogenaktig atomkjerne er gitt ved

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

hvor Z er antall protoner, e elementærladningen, ϵ_0 permittiviteten i vakuum og r avstanden til elektronet.

Dette er et **sentralpotensial** da det kun er avhengig av avstand r .

Egentilstander og egenenergier

Ved å løse TISE med Coulomb-potensialet og den **reduserte massen** til elektronet $m_r = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$, får man løsningen

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$$

$$E_n \cong -(1/n^2) 13.6 \text{ eV}$$

hvor **grunntilstanden** er $\psi_{1,0,0}$ med energi E_1 degenerasjonen er gitt ved $g_n = n^2$ (med spinn: $g_n = 2n^2$)

Sfærisk harmonisk funksjon

Ved separasjon av TISE for hydrogenatomet får man to likninger, den ene avhenger kun av θ og ϕ og har en sfærisk harmonisk funksjon som løsning:

$$Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = \pm \sqrt{\frac{2^{l+1} (l-|m_l|)!}{4\pi (l+|m_l|)!}} P_l^{m_l}(\cos \theta) e^{im_l \phi},$$

$$\text{hvor } P_l^{m_l}(x) = (1-x^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{dx^{|m_l|}} \left[\frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l \right],$$

og \pm i starten er $+$ når m_l negativ eller partall, ellers $-$.

Radial funksjon

Ved separasjon av TISE for hydrogenatomet får man to likninger, den andre avhenger kun av r og har en radial funksjon som løsning:

$$R_{n,l} = \sqrt{\left(\frac{2}{n a_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} \left(\frac{2r}{n a_0}\right)^l e^{-r/(n a_0)} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n a_0}\right),$$

$$\text{hvor } L_p^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} \left[e^x \frac{d^{p+k}}{dx^{p+k}} (e^{-x} x^{p+k}) \right],$$

og $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$ er **Bohr-radiusen** som er den mest sannsynlige avstanden elektronet har.

HYDROGENATOMET og ATOMER

Kvantenummer

Beskriver tilstanden til et hydrogenatom.

Symbol	..kvantenummer	Verdier	Fysiske tolkninger
n	Prinsipielle	$n \in [1, \infty)$	$E_n = -(1/n^2) Ry$
l	Vinkelmoment	$l \in [0, n-1]$	$ \vec{L} = \sqrt{l(l+1)} \hbar = L$
m_l	Magnetisk	$m_l \in [-l, l]$	$L_z = m_l \hbar$
m_s	Spin	$m_s = \pm 1/2$	$S_z = m_s \hbar$

n angir i praksis skallet elektronet befinner seg i.

Utvalsregelen sier at overgangene mellom tilstandene følger generelt $\Delta l = \pm 1$ og $\Delta m_l = -1, 0, 1$. Ander overganger kan skje ved kollisjoner og ved utsending av flere foton samtidig.

Zeemaneffekten

Splitting av spektrallinjer grunnet et eksternt magnetfelt \vec{B} . Atomære tilstander med $L \neq 0$ fungerer som små magnetiske dipoler pga. elektronets sirkelbane, med dipolmoment $\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e} \vec{L}$

Gitt ett atom er i ett magnetfelt som peker i z -retning $\vec{B} = B \hat{k}$, så vil ett kraftmoment $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ virke på det og føre til endring

$$\Delta E = m_l \mu_B B, \text{ hvor } \mu_B = \frac{e \hbar}{2m_e} \text{ er Bohr-magnetonet.}$$

Energiniivåene blir derfor splittet i $2l + 1$ antall nivåer. I sterke magnetfelt er ting mer komplisert enn dette.

Egenspinn (total spin vinkelmoment) S

En form for kvantifisert vinkelmoment hos elementærpartikler med ett mulig kvantetall $s = 1/2$ kalt «**spinn**». Modellen kommer av at ved forsøk så man mer komplisert spektal-opsplitting.

$$\text{Kvadrat av egenspinn: } S^2 = s(s+1) \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$$

Overgangen i z -komponenten er heltallig $\Delta S_z = \pm 1$ der

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

Bohrs atommodell for hydrogen

Elektroner sirkler rundt atomkjernen i baner med vinkelmoment

$$L = n \hbar, \text{ der } n = 1, 2, 3 \dots$$

Overgangen mellom bane-nivåene (skallene) n og m er

$$E = h\nu = \frac{e^4 m_e}{8\epsilon_0^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ og de lovlige elektron radier:}$$

$$r = \frac{\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{\pi e^2 m_e}, \text{ hvor } e \text{ er elementærladning og } m_e \text{ elektron massen}$$

Paulis eksklusjonsprinsipp

Partikler med halvtallig spinn:

$$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \text{ kalles } \mathbf{fermioner}. \text{ To}$$

fermioner kan aldri være i samme kvantemekaniske tilstand. Derfor har kvantesystem av fermioner alltid antisymmetriske bølgefunksjoner ved ombytte av to partikler.

F.eks.: I et fler-elektron-atom er det umulig at to elektroner har samme verdier for alle deres kvantenummer. F.eks. om de er har lik n, l , og m_l så må m_s være ulike.

Rotasjon- og vibrasjonstilstander for to-atomige molekyler

Kan sees på som to atomer som roterer rundt hverandre med fast avstand r og redusertmasse til molekylet lik $m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. Antar fast rotasjon akse som gir treghetsmoment

$$I = m_r r^2$$

Den totale energien blir

$$E = \frac{1}{2} m_r v^2 = \frac{1}{2} m_r (r\omega)^2 = \frac{L^2}{2I}$$

$$E = E_{rot,l} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

Atomene holdes sammen grunnet likevekten til frastøting og tiltrekning. Potensialet kan beskrives ved **Morse-potensialet**

$$V(r) = D(1 - e^{-a(r-r_e)^2})$$

Hvor r_e er likevekts punktet, D kalles deassosieringsenergien, og a beskriver styrken i bindingene.

Potensialet kan tilnærmes ved små avvik fra likevekten til

$$V(r) \cong Da(r - r_e)^2 \text{ som gir}$$

$$E_{vib,n} = (n + 1/2) \hbar \sqrt{2Da/m_r}$$