

Atom- och kärnfysik med tillämpningar

-

Föreläsning 8

Gillis Carlsson

`gillis.carlsson@matfys.lth.se`

19 Oktober, 2012

Föreläsningarna i kvantmekanik

LP1

- V1: Repetition av kvant-nano kursen. Sid 5-84
- V2: Formalism. Sid 109-124, 128-131, 185-189
- V3: Approximativa beräkningsmetoder. Sid. 135-146
- V3: Sfärisk symmetri. Sid 151-160
- V4 Väteatomen och störningsräkning i He. Sid. 163-173
- V4: Harmonisk oscillator och Atomkärnans struktur
- V8: Repetition och genomgång av ex-tenta

V9: Kvantmekanik tentamen

LP2

Dagens föreläsning

Repetition, sid 109-184 i *kvantvärldens fenomen*

Repetition: Kap 5

Viktiga saker från kapitel 5, *Formalism*

- Koordinatrepresentation för operatorer
- Schrödingerekvationen som ett egenvärdesproblem
- Skalärprodukt och serieutveckling för vågfunktioner
- Kommutatorer
- Obestämbarheter
- Postulat

Koordinatrepresentation för operatorer

I kvantmekaniken finns det till varje fysikalisk storhet en operator \hat{A} . Denna operator används för att extrahera information ur en vågfunktion Ψ , t.ex.

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d\vec{r}.$$

Två viktiga representationer i en dimension är:

- Läge: $\hat{x} \rightarrow x$
- Rörelsemängd: $\hat{p}_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Vi kan nu bilda sammansatta operatorer från dessa, t.ex. Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Observera att man ofta utelämnar *hattarna*

Schrödingerekvationen som ett egenvärdesproblem

Schrödingerekvationen kan skrivas som ett egenvärdesproblem

$$\hat{H}\phi_n = E_n\phi_n$$

där E_n är egenvärde (energi) och ϕ_n en egenfunktion (vågfunktionen) till operatoren \hat{H} .

För en given potential kan man då beräkna spektrum (mängd av energier) och tillhörande vågfunktioner. T. ex. oändlig lådpotential (s.65-71)

- Energier: $E_n = \frac{(\hbar\pi n)^2}{2ma^2}$, $n = 1, 2, 3, ..$
- Vågfunktioner: $\phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(n\pi x/a)$, $n = 1, 2, 3, ..$

Skalärprodukt och serieutveckling för vågfunktioner

En skalärprodukt är en operation som givet två element (t.ex. vektorer eller vågfunktioner) ger ett tal och dessutom uppfyller vissa regler (s. 110-111). Vi betecknar skalärprodukten mellan u och v enligt $\langle u|v \rangle$. I kvantmekaniken kan vi beräkna en skalärprodukt enligt:

$$\langle u|v \rangle = \int u^* v d\vec{r}.$$

En vågfunktion Ψ kan utvecklas i en bas (t.ex. i egenfunktioner till Hamiltonoperatoren)

$$\Psi = \sum c_n \phi_n.$$

Utvecklingskoefficienterna beräknas som följande skalärprodukt

$$c_n = \langle \phi_n | \Psi \rangle = \int \phi_n^* \Psi d\vec{r}.$$

Kommutatorer

En *kommutator* bildas av två operatörer enligt

$$[A, B] = AB - BA.$$

Om ordningen mellan A och B inte spelar någon roll är kommutatorn noll, man säger då att A och B *kommuterar*. För att beräkna kommutatorer används en *testfunktion* f

$$[A, B]f = A(Bf) - B(Af) = \dots = Cf \Rightarrow [A, B] = C.$$

Kommutatorer kan även förenklas med räkneregler (s. 116). En viktig kommutator är den mellan läge och rörelsemängd (s. 116)

$$[x, p_x] = \dots = i\hbar.$$

Kommutatorer används bl.a. för tidsderivatan av ett förväntningsläge (s. 118)

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle$$

Obestämbarheter

Mätningar av storheten A (representerat av operatorn \hat{A}) på flera identiskt preparerade system ger i allmänhet olika resultat. Vi kan dock givet vågfunktionen Ψ beräkna förväntningsvärdet

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle .$$

Som ett mått på den förväntade avvikelsen från väntevärdet inför vi en obestämbarhet (eller standardavvikelse) enligt

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

Mellan läge och rörelsemängd gäller en obestämbarhetsrelation (s.24-25)

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 .$$

vilket är ett specialfall av den allmänna obestämbarhetsrelationen (s. 122-123)

$$\Delta A \Delta B \geq | \langle i[A, B] \rangle | / 2 .$$

Postulat

Bl.a mätning av observabel. s. 128-131 i boken.

Givet en vågfunktion Ψ och observabel A med tillhörande egenvärden och egenfunktioner:

$$A\phi_n^A = \lambda_n^A \phi_n^A$$

kan vågfunktionen utvecklas i A 's bas:

$$\Psi = \sum c_n^A \phi_n^A$$

Sannolikheten $P(\lambda_n^A)$ för att erhålla värdet λ_n^A vid mätning ges av:

$$P(\lambda_n^A) = |c_n^A|^2$$

Repetition: Kap 6

Viktiga saker från kapitel 6, *Approximativa beräkningsmetoder*

- Variationsmetoden
- Första ordningens störningsteori
- Ändliga underrum

Variationsmetoden

Den vågfunktion ψ som minimerar ett systems energi

$$\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = E_{min}$$

svarar mot lägsta egentillståndet

$$\hat{H}\psi = E_{min}\psi$$

Det följer då att alla andra vågfunktioner ϕ har högre energi

$$\langle E \rangle = \langle \phi | \hat{H} \phi \rangle > E_{min}.$$

Genom att minimera energin för en lämplig vågfunktion ϕ_α (beror av någon parameter α) kan man finna en vågfunktion som ligger nära den exakta lösningen

$$E_{min} \leq \min_\alpha (E_\alpha) = \min_\alpha (\langle \phi_\alpha | \hat{H} \phi_\alpha \rangle) = \min_\alpha \left(\int \phi_\alpha^* \hat{H} \phi_\alpha d\vec{r} \right)$$

I praktiken deriverar man E_α m.a.p. α för att hitta ett globalt minimum.

Första ordningens störningsräkning

Om man känner de exakta vågfunktionerna till ett ostört problem (t.ex. den oändliga brunnen)

$$\hat{H}\phi_n = E_n\phi_n,$$

är det rimligt att en liten störning $\epsilon V_s(x)$ till Hamiltonoperatoren bara medför en liten ändring av vågfunktionerna d.v.s.

$$\hat{H}_s = \left(\hat{H} + \epsilon V_s(x) \right)$$

$$\hat{H}_s\phi_n^s = E_n^s\phi_n^s$$

och

$$\phi_n^s \approx \phi_n$$

En första approximation av de störda energierna E_n^s ges av

$$E_n^s = \langle \phi_n^s | \hat{H}_s \phi_n^s \rangle \approx \langle \phi_n | \hat{H}_s \phi_n \rangle.$$

Skillnaden orsakad av störningen är alltså

$$\Delta E_n^s = E_n^s - E_n \approx \langle \phi_n | \left(\hat{H}_s - \hat{H} \right) \phi_n \rangle = \langle \phi_n | \epsilon V_s \phi_n \rangle$$

Ändliga underrum

Man kan ofta få bättre approximationer genom att göra en ändlig utveckling av det störda tillståndet i en bas av ostörda tillstånd.

$$\Psi_s \approx c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \dots + c_N\phi_N$$

Den störda Hamiltonoperatören \hat{H}_s kan då approximativt representeras med en ändlig $N \times N$ - matris H_s så att $H_s\Psi_s = E_s\Psi_s$ kan skrivas

$$\begin{bmatrix} \langle \phi_1 | \hat{H}_s \phi_1 \rangle & \langle \phi_1 | \hat{H}_s \phi_2 \rangle & \dots & \langle \phi_1 | \hat{H}_s \phi_N \rangle \\ \langle \phi_2 | \hat{H}_s \phi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \hat{H}_s \phi_2 \rangle & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \phi_N | \hat{H}_s \phi_1 \rangle & \dots & \dots & \langle \phi_N | \hat{H}_s \phi_N \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix} = E_s \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}$$

De N st lägsta egenvärdena till matrisen H_s approximerar de N lägsta egenvärdena till \hat{H}_s och egenvektorerna ger motsvarande utvecklingskoefficienter.

Repetition: Kap 7

Viktiga saker från kapitel 7, *Sfärisk symmetri*

- Rörelsemängsmomentoperatorer
- Laplaceoperatorn och klotytfunktioner
- Den radiella Schrödingerekvationen

Rörelsemängdsmomentoperatorer

För sfäriskt symmetriska problem spelar rörelsemängdsmoment en viktig roll. I klassisk mekanik definieras rörelsemängdsmomentvektorn av vektorprodukten $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Vi har i kap. 5 sett att vi kan skriva rörelsemängdsoperatorer enligt

$$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\nabla.$$

Vi definierar nu den kvantmekaniska (vektor) operatoren för rörelsemängdsmoment enligt

$$\vec{L} = (L_x, L_y, L_z) = (x, y, z) \times (p_x, p_y, p_z) = -i\hbar\vec{r} \times \nabla.$$

Mellan rörelsemängdsmomentets olika komponenter gäller följande kommutatorer

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, [L_z, L_x] = i\hbar L_y, [L_y, L_z] = i\hbar L_x.$$

Storleken av rörelsemängdsmomentet definieras av operatoren \vec{L}^2 som kommuterar med alla komponenter $[\vec{L}^2, L_j] = 0$, $j = x, y, z$

Laplaceoperatoren och klotytfunktioner

Laplaceoperatoren ∇^2 ingår alltid i Hamiltonoperatoren. För sfäriska koordinater (r, θ, ϕ) tar den formen

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

Detta kan omformuleras m.h.a definitionen av rörelsemängdsmomentoperatoren till

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

Den vinkelberoende delen av en tredimensionell funktion kan beskrivas av s.k. klotytfunktioner $Y_l^m(\theta, \phi)$. Dessa är egenfunktioner till både \vec{L}^2 och L_z så att

$$L^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

och

$$L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

Det finns $2l + 1$ olika m för varje l

Den radiella Schrödingerekvationen

För sfäriskt symmetriska system ($V(\vec{r}) = V(r)$) kan man separera vågfunktionen i en radiellt beroende del samt klotytefunktioner

$$\phi(\vec{r}) = \phi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi).$$

När vi sätter in vågfunktionen i den tredimensionella Schrödingerekvationen $\hat{H}\phi = E\phi$ med sfärisk symmetri d.v.s med (s. 157)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{2Mr^2}\vec{L}^2 + V(r)$$

återstår det att lösa en endimensionell Schrödingerekvation i variabeln r för funktionen $u(r) = rR(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2 u_{n,l}}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}u_{n,l} + V(r)u_{n,l} = E_{n,l}u_{n,l}$$

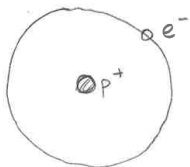
Observera att $u(r)$ och E bara beror på två kvanttal n och l (men ej av kvanttalet m). Massan betecknar vi här med M .

Repetition: Kap 8

Viktiga saker från kapitel 8, *Väteatomen*

- Hamilton operatör för väte
- Egenskaper för lösningarna

Hamilton operatoren för väte



Electron-atomkärna potential:

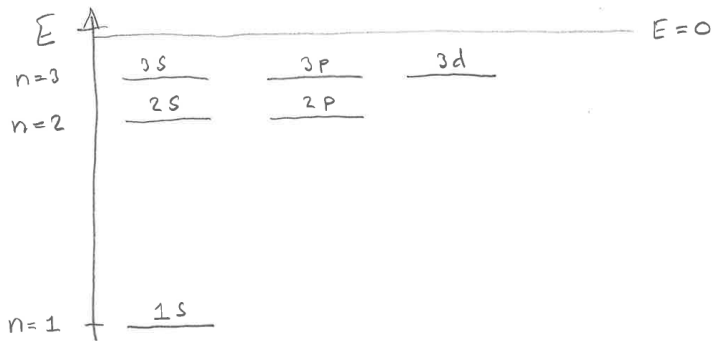
$$V(\vec{r}) = V(r) = -e_0^2 \frac{1}{r}$$

Leder till endimensionell Schrödingerekvation:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 u_{n,l}}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} u_{n,l} - e_0^2 \frac{1}{r} u_{n,l} = E_{n,l} u_{n,l}$$

där $u(r) = rR(r)$

Energivåer för väte



$$E_n = -13.6 \cdot \frac{1}{n^2} \text{ eV} ,$$

$$\left\{ \begin{array}{l} s \Rightarrow l=0 \\ p \Rightarrow l=1 \\ d \Rightarrow l=2 \\ f \Rightarrow l=3 \end{array} \right.$$

Vågfunktioner för väte

$$1s \Rightarrow \phi_{n\ell m} = \phi_{10m} \propto e^{-r/a_0} Y_0^m$$

$$2s \Rightarrow \phi_{n\ell m} = \phi_{20m} \propto \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/(2a_0)} Y_0^m$$

\propto extra nod

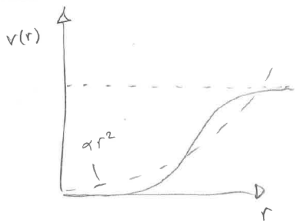
$$2p \Rightarrow \phi_{n\ell m} = \phi_{21m} \propto r e^{-r/(2a_0)} Y_1^m$$

Repetition: Kap 9

Viktiga saker från kapitel 9, *Harmoniska-oscillatorn*

- Harmoniska-oscillator potentialen
- Egenskaper för lösningarna

Hamilton operatoren för oscillatorn



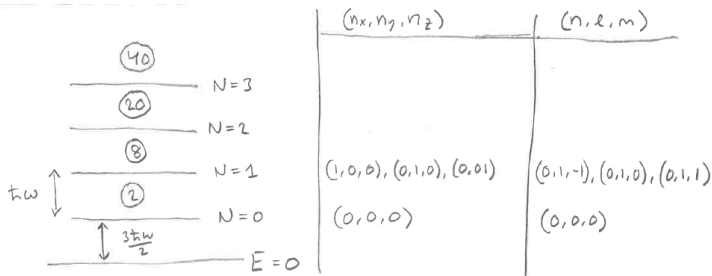
Potential:

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

Löses enklast i cartesiska koordinater:

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

Energivåer för oscillatoren



$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega \left(\underbrace{n_x + n_y + n_z}_N + 3/2 \right)$$

$$E_{n l m} = \hbar\omega \left(\underbrace{2n + l}_N + 3/2 \right)$$

Vågfunktioner för oscillatorn

$$\text{Om } \frac{m\omega}{\hbar} = 1 \Rightarrow$$

$$\psi_0(x) \propto e^{-x^2/2}$$

$$\psi_1(x) \propto 2x e^{-x^2/2}$$

$$\psi_3(x) \propto (-2 + 4x^2) e^{-x^2/2}$$

