INDLEDNING

TIL

KVANTEMEKANIKKEN

HENRIK SMITH

Denne bog / forelæsningsnote er blevet digitaliseret af
Martin Skogstad-von Qualen, og er en del af et projekt
der har til formål at gøre tekster, forfattet af danske fysikere,
tilgængelige for offentligheden. Teksterne, der hovedsageligt
skrevet i 90erne, blev anskaffet i så fine udgaver som muligt,
hvorefter de blev skannet på en fotokopimaskine i en opløsning
på 600 dpi (S/H) i tiff format. De skannede billeder dannede
så udgangspunkt for en pdf-fil, hvorpå der blev udført elektronisk
tekstgenkendelse (OCR).
Bookmarks og links blev herefter tilføjet for at lette navigationen
i dokumenterne. Andre af teksterne var tilgængelige i digital form,
således at kun bookmarks er tilføjet.
Projektet blev startet i november 2018 og omkring juni 2019
var alle bøger / noter klar til at blive lagt op på www.nbi.ku.dk.

Skulle nogen have spørgsmål til projektet kan Martin kontaktes
på martinskogstad@gmail.com

En stor tak til professor emeritus Henrik Smith som også er forfatter
til flere af bøgerne, og til lektor i fysik ved NBI Jens Paaske for
samarbejde, opmuntring, valg af materiale og lån af fine eksemplarer
af værkerne.

Indhold

1 Indledning **1**

1.1 Naturkonstanter 3

1.1.1 Lysets hastighed 4

1.1.2 Elektronens masse og ladning 6

1.1.3 Plancks konstant 9

1.2 Atomernes udstrækning 11

1.3 Kvanter og tilstande 14

1.3.1 Fotoner 14

1.3.2 En svingende streng 15

1.3.3 Brintatomet 18

1.3.4 Sandsynlighedsbølger 20

1.3.5 Usikkerhedsrelationerne 22

1.4 Symmetri og invarians 25

1.4.1 Paritet og permutation 27

1.5 Dimensioner og naturkonstanter 30

1.5.1 Brintatomet 30

1.5.2 Impulsmoment 34

1.5.3 Harmonisk oscillator 35

1.5.4 Molekylspektre 37

1.5.5 Gravitation 39

1.6 Atomer og lys 40

1.6.1 Atomets struktur 42

1.6.2 Stof og stråling 46

1.7 Partikler og bølger 50

1.7.1 En fri partikel 53

1.7.2 Partikel i en kasse 54

1.7.3 Harmonisk oscillator 57

1.7.4 Bølgepakker 60

1.7.5 En relativistisk bølgeligning 61
1.8 Opgaver 65

2 Kvantisering **69**
2.1 Analytisk mekanik 69
2.1.1 Lagrange-formalismen 70
2.1.2 Hamiltons ligninger 75
2.1.3 Poisson-parenteser 77
2.2 Fra klassisk mekanik til kvantemekanik 80
2.2.1 Matricer og egenværdier 82
2.2.2 Energikvanter 85
2.3 Opgaver 93

3 Sandsynlighedsamplituder **101**
3.1 Lineære operatorer 101
3.1.1 Et Hilbert rum 106
3.2 Middelværdi og fluktuation 111
3.2.1 Fourier-transformationen 115
3.2.2 Usikkerhedsrelationerne 119
3.3 Opgaver 126

4 Schrödingerligningen **135**
4.1 Ehrenfests sætning 137
4.2 Superpositionsprincippet 138
4.3 Grænsebetingelser 142
4.4 Sammenfatning 150
4.5 Opgaver 152

5 Tunneleffekt **154**
5.1 Bundne tilstande 154
5.2 Sandsynlighedsstrøm 156
5.3 Barrieretransmission 157

5.4 Den gyldne regel 163
5.4.1 Reflektion fra en barriere 164
5.4.2 Tidsafhængig perturbationsteori 165
5.5 Opgaver 169

6 Elektron i magnetfelt **172**
6.1 Den klassiske Hamiltonfunktion 172
6.2 Kvantisering 175
6.2.1 Hamiltonoperator og energispektrum 175
6.2.2 Udartning 177
6.3 Opgaver 182

7 Impulsmoment **184**
7.1 Impulsmomentkvantisering 184
7.1.1 Egentilstande for $\vec{L}^2$ og L_z 189
7.2 Spin 194
7.3 Addition af impulsmoment 196
7.4 Bevægelse i et centralfelt 200
7.4.1 Brintatomet 201
7.5 Elektronens spin 207
7.5.1 Elektronens magnetiske moment 208
7.6 Opgaver 211

8 Symmetrier **218**
8.1 Paritet 218
8.1.1 Tidsuafhængig perturbationsteori 222
8.2 Permutation 225
8.3 Translation 240
8.4 Gauge-transformation 242
8.5 Rotation 243
8.6 Opgaver 246

9 Fermioner og bosoner **249**

9.1 Fri elektrongas 250

9.1.1 Lyd i metaller 254

9.2 Periodisk potential 256

9.3 Gittersvingninger 261

9.3.1 Normalsvingninger 262

9.3.2 Fononer 265

9.3.3 Gittervarmefylde 267

9.4 Spinbølger 274

9.5 Hulrumsstrålingen 278

9.5.1 Universets baggrundsstråling 280

9.6 Opgaver 282

10 Kvantevæsker og superledere **284**

10.1 Superfluiditet 285

10.2 Superledning 292

11 Atomets kerne **295**

11.1 Kernekræfter 295

11.2 Kernestabilitet 298

11.2.1 Radioaktivitet 300

11.2.2 Fission og fusion 301

11.3 De fire kræfter 303

11.3.1 De elektromagnetiske kræfter 303

11.3.2 De stærke kræfter 305

11.3.3 De svage kræfter 306

11.3.4 Tyngdekræfterne 307

12 Opgaver **308**

Litteraturfortegnelse **332**

Eksempler

1. Et forskydeligt pendul 73
2. Poisson-parenteser og den todimensionale harmoniske oscillator 79
3. Kvantisering af den todimensionale harmoniske oscillator 121
4. Den klassiske grænse for en harmonisk oscillator 139
5. Kvantebrønde 161
6. Den symmetriske gauge 178
7. Zeeman effekt og spin-bane kobling 205
8. He-atomet og H^--ionen 230
9. Ammoniakmolekylet, maseren og den kemiske binding 234
10. Et éndimensionalt gitter 259

Denne indledning til kvantemekanikken er beregnet på undervisningen i kvantefysik på andet år af fysikstudiet ved Københavns Universitet. Manuskriptet er skrevet ved hjælp af LaTeX, og forfatteren takker Per Hedegård for gode LaTeX-råd og -vink. En tak rettes til Nils O. Andersen, C. J. Ballhausen, Niels Brene, Peder Voetmann Christiansen, Per Hedegård, Torben Huus, Antti-Pekka Jauho, H. Højgaard Jensen, Lars-Erik Lundberg, Morten Bo Madsen og Ole Sørensen for nyttige kommentarer til manuskriptet i forskellige faser af dets tilblivelse.

Fysisk Laboratorium, 11. juni 1990,
Henrik Smith

1 Indledning

Oldtidens græske naturfilosoffer forestillede sig, at alt stof var opbygget af udelelige smådele, atomer. Det græske ord *atomos* betyder udelelig. Det var ikke eksperimenter, men filosofiske overvejelser, der førte *Demokritos* og *Leukippos* (ca. 400 f. Kr.) til at påstå, at der fandtes udelelige dele. Det nittende århundredes fysik og kemi bragte atomteorien på fast grund. Englænderen *John Dalton* (1766-1844) viste, at atomteorien gav en naturlig forklaring på sammensætningen af kemiske forbindelser.

I slutningen af forrige og begyndelsen af dette århundrede blev det imidlertid klart, at atomet ikke var udeleligt men sammensat. Englænderen *Ernest Rutherford* (1871-1937) og hans medarbejdere påviste eksperimentelt, at atomet indeholdt en positivt ladet kerne, hvori praktisk taget hele atomets masse var samlet. Kernens udstrækning var langt mindre end atomets, så det meste af atomet syntes at bestå af et vacuum, hvori de negativt ladede elektroner bevægede sig omkring den positivt ladede kerne. Når kernens positive elektriske ladning er lige så stor som elektronernes samlede negative ladning, er atomet elektrisk neutralt, men hvis atomet indgår i kemiske forbindelser, kan det afgive eller modtage elektroner. Vi skal i de følgende kapitler se, at ligheden mellem solsystemet og atomet kun er overfladisk. Mens planeternes baner kan beregnes ud fra den klassiske mekaniks love, må atomet beskrives ved en anden mekanik, kvantemekanikken, der er mere alment gyldig end den klassiske mekanik. Den klassiske mekanik er indeholdt i kvantemekanikken som et grænsetilfælde. Der er altså ingen modsigelse i, at den klassiske mekanik beskriver planetbanerne med meget stor nøjagtighed, men ikke kan benyttes som grundlag for at forklare atomets struktur.

Det første tegn på, at atomet kunne deles, var opdagelsen af den naturlige radioaktivitet i slutningen af 1800-tallet. Grundstoffet radium udsendte tre former for stråling, der blev døbt α-, β- og γ-stråling. Som følge af α-strålingen, der består af positivt ladede partikler, blev radium omdannet til et andet grundstof, radon. Det viste sig, at de positivt ladede α-partikler kunne forbinde sig med to elektroner og danne et neutralt atom, grundstoffet helium. Grundstoffer kan altså omdannes til andre grundstoffer. Det var netop de positivt ladede α-partikler, som Rutherford benyttede til at undersøge atomets struktur. Ved at beskyde et metalfolie med hurtige α-partikler og undersøge disses afbøjning kunne Rutherford slutte, at

den overvejende del af atomets masse måtte være samlet i en kerne af meget lille udstrækning i forhold til atomets størrelse.

En radioaktiv proces som α-stråling består i, at kernen ved deling afgiver fire af de elementære partikler, den består af, nemlig to neutroner og to protoner. Protonens ladning er lige så stor som elektronens, men har modsat fortegn, mens neutronen - som navnet antyder - er elektrisk neutral. De fire partikler slynges ud af kernen som én α-partikel, fordi de er kraftigt bundet til hinanden. Den tiloversblevne kerne har to protoner mindre end før og vil derfor i et neutralt atom være omgivet af to færre elektroner.

Protoner og neutroner er omtrent lige tunge. Deres masse er knap to tusinde gange så stor som elektronens, svarende til at næsten hele atomets masse er samlet i atomets kerne. Også neutronen og protonen har imidlertid indre struktur. Isolerede neutroner er ustabile med en levetid, der i middel er 15 minutter, således at en neutron uden for kernen omdannes til en proton og en elektron. Trods forskellen i ladning minder neutronen og protonen meget om hinanden. De er næsten lige tunge, omend den ustabile neutron vejer en smule mere end protonen. Protonen synes at være stabil, men der har i de senere år været udført omfattende eksperimenter for at undersøge, om den alligevel skulle være ustabil. Man ved nu, at protonens levetid i middel mindst er 10^{31} år, altså meget længere end universets alder, der anslås til at være 10^{10} år.

Neutron og proton består hver af tre mindre byggestene, de såkaldte kvarker. Men disse byggestene adskiller sig fra atomets byggestene, elektroner, protoner og neutroner, ved aldrig at være påvist som fri partikler. Ingen har set sporet af en fri kvark. Selv om man ikke direkte kan se atomets byggestene, elektron, proton og neutron, har vi et væld af indirekte beviser for deres eksistens som partikler, der er frit bevægelige. Kvarkerne kan derimod ikke bevæge sig frit, da de er bundet sammen med tiltrækkende kræfter, hvis størrelse ville øges, hvis man forsøgte at skille kvarkerne.

Mens protonen og neutronen har en indre struktur, har elektronen vist sig at være helt strukturløs. Som vi skal se i dette kapitel, er det muligt at måle elektronens masse og elektriske ladning meget nøjagtigt. Alle forsøg på at opløse elektronen i mindre bestanddele har derimod været forgæves. Slægtskabet mellem proton og neutron er derfor langt stærkere end mellem proton og elektron. I dag opfatter vi proton og neutron som to medlemmer af en stor familie af

partikler, hadronerne, der omfatter flere hundrede såkaldte elementarpartikler. Elektronerne tilhører en mindre talrig familie, der går under navnet leptoner. Antallet af kendte leptoner er for tiden tolv.

Atomet er altså sammensat af mindre enheder, hadroner og leptoner, og hadronerne er opbygget af kvarker. Kvarkerne optræder altid bundet til hinanden, enten parvist eller i en trekant, som vi møder den i proton og neutron. Mellem den simple atommodel, hvori elektron, proton og neutron tilsammen kan redegøre for grundstoffernes opbygning, og vore dages storfamilier af hadroner og leptoner ligger en svimlende udvidelse af vor erfaringsverden. Denne udvidelse er tilvejebragt ved eksperimenter, ofte komplicerede og langvarige, i forening med teori. Udviklingen i dette århundrede har medført radikale ændringer i vor opfattelse af stoffets natur, men den begrebsramme, som udgøres af kvanteteorien, er ikke ændret. Tværtimod har alle de erfaringer, der er gjort i dette århundredes fysik, bekræftet grundlaget for kvanteteorien. Kvantemekanikken er udgangspunkt for beskrivelsen af ikke blot atomer og molekyler, men også stoffernes karakteristiske egenskaber, hvadenten det drejer sig om metaller, halvledere eller isolatorer. Kvantefysikken ligger således bag en stor del af den teknologiske udvikling i dette århundrede. Transistoren og laseren er blot to eksempler på dette.

1.1 Naturkonstanter

Værdier af fysiske størrelser kan slås op i tabeller. F. eks. er aluminiums massefylde 2,7 gram per kubikcentimeter, mens lydhastigheden i vand er 1500 meter per sekund. Ingen af de to nævnte størrelser er naturkonstanter. De afhænger af temperatur og tryk, og både massefylde og lydhastighed er forskellige for de forskellige grundstoffer og kemiske forbindelser.

I modsætning til dette er massen af en elektron den samme, uanset hvilket atom elektronen er en del af. Det samme gælder elektronens elektriske ladning. Man kalder sådanne størrelser for naturkonstanter. Lysets hastighed i det tomme rum er en naturkonstant. At lysets hastighed ikke er uendelig stor, men har en endelig værdi, blev opdaget af danskeren Ole Rømer i 1675. Til bestemmelsen af elektronens masse og ladning bidrog især englænderen J. J. Thomson og amerikaneren R. A. Millikan omkring begyndelsen af dette århundrede. Den

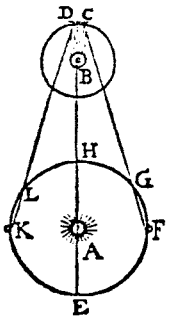
fjerde naturkonstant, som vi vil beskæftige os med i dette afsnit, blev indført af tyskeren Max Planck i år 1900 for at forklare varmestrålingen fra sorte legemer. Plancks konstant er kvanteteoriens fundamentale naturkonstant. Sammen med elektronens masse og ladning bestemmer den atomernes størrelse og bølgelængden af det lys, der udsendes af atomerne.

I det følgende skildrer vi opdagelsen af disse fire naturkonstanter. Derefter skal vi se, hvorledes det ud fra disse er muligt at fastlægge såvel atomernes karakteristiske udstrækning som bindingsenergien af en atomar elektron.

1.1.1 Lysets hastighed

I 1671 kom den franske astronom Picard til Danmark. Han var udsendt af det franske akademi med det formål at måle den geografiske beliggenhed af Uranienborg, Tycho Brahes observatorium på Hven. Det var akademiets hensigt at udgive Tycho Brahes originale observationer i Frankrig, og det var derfor vigtigt at kende den nøjagtige beliggenhed af hans observatorium. Som hjælper i dette arbejde fik Picard den danske astronom Ole Rømer (1644-1710). Da Picard året efter vendte tilbage til Frankrig, var han ledsaget af Ole Rømer, der blev i Paris i 10 år.

Under Ole Rømers ophold i Paris samarbejdede han med Picard om observationer af planetbaner. Desuden iagttog han selv formørkelsen af den af Jupiters måner, der kaldes Io. Formørkelsen af Io skyldes, at månen én gang under hvert omløb om Jupiter træder ind i dennes skygge. Månens indtræden i skyggen kan kun iagttages, når jorden i sin bane omkring solen er på vej mod Jupiter. Dette er illustreret på fig. 1.1, der er taget fra Ole Rømers originalafhandling i *Journal des Scavans*. På figuren betegner A solen og B Jupiter. Den nederste cirkel er jordbanen, der gennemløbes i retningen LKEFGH. Den øverste cirkel angiver Ios bane, som gennemløbes i samme omløbsretning - fra C til D langs den korteste bue CD. Tilsvarende kan Ios udtræden af skyggen kun iagttages, når jorden fjerner sig fra Jupiter. I 1675 forelagde Ole Rømer sin epokegørende iagttagelse for det franske akademi: den observerede tidsforskel mellem to på hinanden følgende formørkelser af Io var forskellig, alt eftersom månen trådte ind i Jupiters skygge eller ud af den. Ole Rømers forklaring på dette var, at lyset udbreder sig med en endelig hastighed. På grund af jordens bevægelse er forskellen set fra jorden mellem to på hinanden følgende tidspunkter for månens indtræden



Figur 1.1: Ole Rømers illustration af Jupitermånens formørkelse set fra jorden

i Jupiters skygge derfor mindre end den tilsvarende forskel mellem tidspunkterne for dens udtræden. Da jorden bevæger sig med 30 kilometer i sekundet, vil den under et omløb af Io, der varer knap to dage, have bevæget sig ca. 5 millioner km. Ole Rømer fandt på baggrund af sine iagttagelser, at lyset måtte være 22 minutter om at gennemløbe en afstand svarende til diameteren i jordens bane omkring solen. Den således bestemte værdi af lyshastigheden er ca. 230 000 km/s, idet jordbanens diameter er 300 millioner km.

Det er ikke muligt præcist at rekonstruere, hvorledes Ole Rømer kom frem til de 22 minutter, da hans publikation ikke indeholdt detaljer om dette. Senere målinger viste, at lysets hastighed er tæt på 300 000 km/s. I 1978 var lyshastigheden bestemt til at være 299 792 458 m/s med en mulighed for, at det sidste ciffer kunne være 7 eller 9. Siden 1983 har man defineret lysets hastighed til at være 299 792 458 m/s og benyttet denne værdi til at fastlægge længdeenheden 1 meter ud fra tidsenheden 1 sekund.

Ved sin hjemkomst til Danmark i 1681 blev Ole Rømer udnævnt til professor i astronomi. Han opfandt det såkaldte passageinstrument og konstruerede også adskillige fysiske måleinstrumenter. Hans praktiske sans gav sig andre udslag. Således fik han til opgave at forestå udarbejdelsen af en ny matrikel, der blev anvendt indtil 1844. Det var ham, der stod bag Christian V's forordning om mål og vægt. Han indtrådte i havnedirektionen og i højesteret, og han blev både borgmester og politimester i København samt rektor for universitetet. Mange af hans astronomiske observationer er gået tabt under Københavns brand i 1728. Livet igennem var han optaget af at måle fiksstjerneparallaksen, d. v. s. ændringen af en sigtelinje fra jorden til en stjerne som følge af jordens bane omkring solen. I dag ved man, at parallakseforskydningen er for lille til,

at Ole Rømer kunne have målt den med sine instrumenter. Han var selv opmærksom på de mange fejlkilder, der var forbundet med disse målinger, og publicerede aldrig sine resultater, selv om han var langt forud for sin samtid i målenøjagtighed.

Lyshastighedens fundamentale betydning som naturkonstant blev først klarlagt 200 år senere med Michelsons forsøg, der viste, at lysets hastighed er den samme for en iagttager i hvile som for en iagttager i bevægelse. Sagt med andre ord: naturlovene har samme form for de to iagttagere. Denne symmetri var udgangspunktet for Einsteins relativitetsteori, der ændrede menneskets opfattelse af rum og tid.

1.1.2 Elektronens masse og ladning

Joseph John Thomson (1856-1940) blev født i omegnen af Manchester, hvor hans far var boghandler og forlægger. Han ville oprindelig have været ingeniør, men kunne ikke få læreplads på grund af en lang venteliste. I stedet begyndte han i en alder af fjorten år at læse på Owens College, det senere Manchester universitet. I en alder af tyve år blev han optaget på Trinity College, Cambridge, hvortil han var knyttet resten af sit liv. Fra 1884 til 1919 var Thomson leder af Cavendish Laboratory, der i denne periode var centrum for udforskningen af atomernes egenskaber.

Gennem en stor del af det nittende århundrede var der en fortsat debat om den elektriske ladnings natur. Kunne elektrisk ladning deles i vilkårligt små klumper, eller fandtes der en mindste enhed for elektricitet? Michael Faradays forsøg med elektrolyse fra 1833 var de første, der pegede på eksistensen af en mindste elektrisk ladning. Men dette synspunkt var vanskeligt at forene med elektrodynamikkens love, den sammenhængende beskrivelse af elektriske og magnetiske fænomener, som især skyldtes James Clerk Maxwell. Maxwells teori, der blev endeligt udformet i 1873, kunne med stor succes redegøre for variationen af de elektriske og magnetiske felter i rum og tid. Således kunne Maxwell vise, at lys er en elektromagnetisk bølge. Den eneste forskel mellem en lysbølge og en radiobølge er størrelsen af bølgelængden. I Maxwells ligninger indgår den elektriske ladning som en størrelse, der varierer kontinuert og i princippet kan deles i vilkårligt små portioner.

J. J. Thomson og hans medarbejdere var de første til direkte at påvise eksistensen af en mindste elektrisk ladning, en elektron. Thomsons forsøg udnyttede, at en strøm af ladede partikler med en bestemt hastighed kan afbøjes i et elektrisk felt. Hvis man ydermere sørger for, at partiklerne også befinder sig i et magnetfelt, kan virkningen af det elektriske felt og magnetfeltet bringes til at ophæve hinanden. Herved bliver det muligt at foretage en direkte måling af forholdet m/e mellem elektronens masse m og dens ladning e. I 1897 publicerede Thomson sit resultat for m/e. Hans resultater viste, at det var omkring tusind gange så lille som det tilsvarende forhold for den letteste af de hidtil kendte ladede partikler (et positivt ladet brintatom, der betegnes som en brint*ion*). Hvis det antages, at brintionen har den samme (mindste) ladning som elektronen, blot med modsat fortegn, måtte elektronen altså være mere end tusind gange lettere end brintatomet.

Thomson tilhørte overgangsperioden mellem det nittende århundredes klassiske fysik og det tyvende århundredes kvantefysik. Hans påvisning af elektronens eksistens og bestemmelsen af m/e pegede væk fra den klassiske elektrodynamik. Hans senere forsøg på at opstille en atommodel var derimod fast forankret i det nittende århundredes begrebsverden. Thomson antog, at atomets negative elektriske ladning hidrørende fra elektronerne blev kompenseret af en positiv ladning, der var jævnt udsmurt over atomet. Han anvendte den klassiske elektrodynamiks love på denne model og forsøgte at benytte den til at forklare det periodiske system.

Cambridge var i disse år i centrum for den fysiske forskning. Det var derfor naturligt, at Niels Bohrs første udlandsrejse i 1911 gik til Cambridge. I sin disputats fra 1911 havde Niels Bohr påpeget nogle fejl i Thomsons publicerede resultater. Han havde god grund til at forvente, at Thomson ville læse hans arbejde omhyggeligt, men det viste sig - måske ikke overraskende - at Thomson ikke var interesseret i at diskutere sine fejltagelser. Besøget var i en vis forstand en fiasko, og Niels Bohr besluttede sig for i begyndelsen af 1912 at tage til Manchester, hvor Ernest Rutherford året forinden havde leveret det afgørende bevis for, at atomets positive ladning ikke er jævnt udsmurt, som Thomson havde antaget, men tværtimod koncentreret i en kerne, hvis udstrækning var omkring en hundredetusindedel af atomets. Med udgangspunkt i dette resultat fremsatte Bohr i 1913 sin atommodel for brintatomet, der var et radikalt brud med den klassiske fysiks forestillingsverden. Trods Bohr-modellens succes - men vel også på grund af vanskelighederne med at anvende den på mere komplicerede atomer - forsøgte Thomson i begyndelsen af tyverne at videreudvikle sin klassiske model ved at indføre nye antagelser om kræfterne mellem de elektriske ladninger. Kvanteteoriens endelige udformning i årene 1925-27 ved især Heisenberg, Born og Dirac satte imidlertid en stopper for yderligere forsøg på at beskrive atomerne ved hjælp af den klassiske fysik.

Thomsons eksperimenter var banebrydende, mens hans teoretiske ideer var forankret i den klassiske fysik. Selv om han ikke kunne identificere sig med den nye fysik, kvantefysikken, fik hans direkte påvisning af elektronens eksistens og målingen af m/e afgørende betydning for kvantefysikkens videre udvikling.

Thomsons oprindelige forsøg bestemte kun m/e. Men han og hans medarbejdere forsøgte i de følgende år at bestemme selve elementarladningen e, uden dog at nå til en særlig nøjagtig bestemmelse. En dramatisk forbedring af målingen af e blev opnået af amerikaneren Robert Andrews Millikan (1868-1953).

Millikan var vokset op i Illinois og Iowa, hvor hans far var prædikant. Han blev optaget på Oberlin College i Ohio. I hans andet studieår bad hans græsklærer ham om at undervise i fysik, som Millikan på dette tidspunkt ikke havde meget viden om, med den begrundelse, at den, der klarer sig godt i græsk, også må kunne undervise i fysik. At det netop var undervisningen, der satte gang i Millikans interesse for fysik, var ingen tilfældighed. Livet igennem bevarede han et stærkt engagement i undervisning. Millikans videregående studier foregik ved Columbia universitetet i New York, hvor han i en toårig periode var den eneste fysikstuderende. Tilskyndet af sine lærere rejste han derefter til Europa og opholdt sig i Berlin og Göttingen et årstid. Hans første ansættelse var ved University of Chicago, hvor han øvede en betydelig indsats i undervisningen. Millikan brød sig ikke om den traditionelle forelæsningsform. Hans undervisning udnyttede laboratoriet og det eksperimentelle arbejde langt mere, end det hidtil havde været sædvane. Han skrev adskillige lærebøger, der fik stor udbredelse. I 1921 flyttede Millikan til California Institute of Technology, hvor han spillede en stor rolle i opbygningen af universitetets forskning og undervisning i fysik.

Millikan havde i Chicago været meget optaget af Thomsons resultater og dennes forsøg på i tiåret efter målingen af m/e at bestemme størrelsen af elektronladningen direkte. Thomson og hans medarbejdere havde frembragt skyer af ladede vanddråber og undersøgt, hvorledes skyens overflade ændrede sig i tiden for derigennem at bestemme antallet af dråber og disses ladning. Metoden var imidlertid unøjagtig, og usikkerheden ved sådanne målinger kunne være 100%. Millikan fik den gode idé at bruge oliedråber i stedet for vanddråber. Oliedråberne blev ladede under deres frembringelse på grund af gnidning. Millikan kunne også variere dråbernes ladning ved at ionisere den omgivende luft med røntgenstråling. Nogle af dråberne faldt gennem et lille hul ned i området mellem to kondensatorplader. Spændingen over kon-

densatorpladerne kunne varieres, og bevægelsen af dråberne følges i et mikroskop. Hvis der ikke var nogen spændingsforskel mellem pladerne, ville en dråbe falde med jævn hastighed, idet tyngdekraftens påvirkning af dråben netop ville blive ophævet af gnidningskraften, der er proportional med dråbens hastighed. Når spændingsforskellen er forskellig fra nul, vil kraften på en dråbe afhænge af dens ladning. Millikan kunne i sit forsøg følge en enkelt dråbe og måle dens ladning direkte. Ved at ændre dråbernes ladning ved hjælp af ioniserende røntgenstråling kunne han bestemme den mindste enhed for elektrisk ladning, elementarladningen e. Hans metode var så nøjagtig, at den målte værdi kun adskilte sig med 1/10 % (altså en tusindedel) fra den i dag accepterede værdi, $e = 1,602\,177 \cdot 10^{-19}$ Coulomb. Elektronens masse er i dag bestemt til at være $m = 9,109\,3897 \cdot 10^{-31}$ kg.

1.1.3 Plancks konstant

Et absolut sort legeme defineres som et legeme, der absorberer al den stråling, der falder på det. Dette indebærer, at udstrålingen fra et sort legeme kun afhænger af dets temperatur. Strålingen fra et sort legeme (som i praksis lader sig realisere i form af et hulrum med et lille hul, hvorigennem strålingen undslipper til omgivelserne) var genstand for stor interesse i slutningen af det forrige århundrede. Det blev undersøgt eksperimentelt, hvorledes strålingens intensitet afhang af temperaturen og bølgelængden. Det var lykkedes den tyske fysiker Wilhelm Wien at finde en empirisk formel, der beskrev de eksperimentelle iagttagelser godt ved korte bølgelængder, og i England havde Lord Rayleigh (og senere J. H. Jeans) udarbejdet en teori for lange bølgelængder, der også passede godt med eksperimenterne. Men der manglede en beskrivelse af det mellemliggende område - det område, hvor bølgelængden hverken var kort eller lang - og en forståelse af, hvorfor Rayleighs teori kun var gyldig for lange bølgelængder.

Den tyske fysiker Max Planck (1858-1947) var i 1889 kommet til Berlin, hvor han efterfulgte Gustav Robert Kirchhoff, der tidligere havde været hans lærer. Max Planck var født i Kiel, men tilbragte sin skoletid og en del af studietiden i München. Han blev doktor i en alder af kun enogtyve år. I Berlin gjorde Plancks kolleger forsøg med hulrumsstrålingen med henblik på at forstå, hvornår og hvorfor Rayleighs teori mistede sin gyldighed.

Søndag eftermiddag d. 7. oktober i år 1900 havde familien Planck gæster til te. Plancks kollega Rubens

fra Friederich Wilhelm universitetet var på besøg med sin kone, og Rubens benyttede lejligheden til at fortælle Planck om sine seneste målinger af hulrumsstrålingen. Efter at have hørt om de nye resultater satte Planck sig samme aften til at finde et udtryk, der kunne forbinde de hidtil adskilte områder for lange og korte bølger, svarende til henholdsvis Rayleighs og Wiens formler. Resultatet, Plancks strålingslov, blev offentliggjort tolv dage senere ved et foredrag, som Planck holdt i Deutsche Physikalische Gesellschaft. Planck havde fundet en simpel formel, der virkede - forstået på den måde, at den var i overensstemmelse med måleresultaterne. Den indeholdt en ny naturkonstant, som i dag kaldes Plancks konstant. Planck havde imidlertid endnu ikke en begrundelse for formlen. To måneder senere publicerede han en udledelse af strålingsloven. I denne indgik der antagelser, der var helt fremmede for det nittende århundredes fysik[1].

Planck antog, at strålingen, der kom ud af et hulrum, hidrørte fra svingninger, oscillatorer, i hulrummets vægge. I den klassiske fysik kan en oscillator - noget, der svinger med en bestemt frekvens - have alle mulige energiværdier, afhængig af, hvordan man starter svingningen. Et eksempel er et pendul, der udfører små svingninger. Dets svingningsfrekvens afhænger af pendulets længde og tyngdeaccelerationen, mens dets energi er bestemt af, hvor langt det er væk fra lodret, når svingningen startes fra hvile. Ud fra den klassiske fysik er der intet grundlag for at påstå, at det kun er muligt for pendulet at svinge, hvis dets energi har bestemte værdier (svarende til bestemte værdier af vinklen med lodret i begyndelsesstillingen). Men det var netop, hvad Planck antog om oscillatorerne i væggen. Ved statistiske argumenter nåede han på basis af en sådan model frem til en begrundelse for strålingsloven. Hans model knyttede oscillatorernes (og dermed strålingens) frekvens ν til en bestemt energi, $h\nu$, hvor h er Plancks konstant. Ved at sammenligne med eksperimenterne kunne Planck bestemme konstanten h til at være $6,55 \cdot 10^{-34}$ m^{2}kg/s. Den mest nøjagtige moderne bestemmelse af Plancks konstant[2] giver $6,626\,076 \cdot 10^{-34}$ m^{2}kg/s.

Plancks strålingsformel beskriver, hvorledes strålingsenergien i hulrummet er fordelt på de forskellige frekvenser. Vi betegner energitætheden af den stråling, hvis frekvens ligger imellem ν og $\nu+\Delta\nu$, som $u_\nu(T)\Delta\nu$. Funktionen $u_\nu(T)$ beskriver altså, hvorledes energitætheden afhænger af frekvensen ν og temperaturen T. For at observere denne fordeling lader man lidt af strålingen undslippe hulrummet. Fordelingen af den undslupne stråling er da et direkte mål for u_ν. Som Planck viste i 1900, giver funktionen

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3(e^{h\nu/kT} - 1)} \tag{1.1}$$

en nøjagtig beskrivelse af måleresultaterne. Åbenbart spiller værdien af det dimensionsløse forhold $x = h\nu/kT$ en vigtig rolle. Når x er lille, er funktionen $x^3/(e^x - 1)$ med tilnærmelse givet ved x^2, mens den for store x kan tilnærmes ved x^3e^{-x}. Disse to grænser svarer henholdsvis til lange bølger ($h\nu$ meget mindre end kT) og korte bølger ($h\nu$ meget større end kT). Planck viste i sin første afhandling, at udtrykket (1.1) gav en

[1] En beskrivelse af Plancks argumentation kan findes i en artikel af A. Pais, Reviews of Modern Physics **51**, 861, 1982.

[2] I dag benyttes i reglen konstanten $\hbar$, der er lig med Plancks konstant divideret med 2π. Konstanten $\hbar = 1,054\,572 \cdot 10^{-34}$ m^{2}kg/s benævnes også Plancks konstant.

nøjagtig beskrivelse af observationerne, uanset værdien af $h\nu/kT$, mens han i den følgende afhandling udledte strålingsformlen (1.1) ved hjælp af statistiske betragtninger, der på afgørende vis brød med det nittende århundredes forestillingsverden.

Det er let at se ud fra (1.1), at strålingsformlen i den klassiske grænse (kT meget større end $h\nu$) er givet ved $u_\nu(T) = 8\pi\nu^2 kT/c^3$. Dette var Rayleighs resultat, som blev omtalt ovenfor. At Rayleighs resultat umuligt kan gælde for alle frekvenser ν, er ikke svært at forstå. Hvis energitætheden $u_\nu \Delta\nu$ hørende til frekvensintervallet $\Delta\nu$ omkring ν vokser kvadratisk med ν for alle ν, må den samlede energitæthed være uendelig stor, idet denne fremkommer som en sum (i matematisk forstand en integration) over alle frekvenser. Da energitætheden ikke kan være uendelig stor, er det derfor nødvendigt at modificere det klassiske resultat for store frekvenser. Alene af denne årsag er der brug for en naturkonstant som Plancks konstant, der medfører, at u_ν i stedet for at vokse som ν^2 for store ν aftager som $\nu^3 e^{-h\nu/kT}$.

Det bemærkelsesværdige ved Planckformlen (1.1) er, at det alene er temperaturen, der bestemmer fordelingen på frekvenser. Vigtigheden af denne opdagelse og den naturkonstant $\hbar$, som den gav anledning til at indføre, kan vanskeligt overvurderes.

Plancks strålingsformel indledte kvantefysikkens æra med et radikalt brud med den klassiske fysiks begrebsverden, et postulat om kvantisering af en oscillators energi i enheder af $h\nu$, hvor ν er oscillatorens svingningsfrekvens. Som det fremgår, var uoverensstemmelsen mellem den klassiske fysik og målingerne af hulrumsstrålingen af afgørende betydning. Uden støtte fra de eksperimentelle iagttagelser er det svært at forestille sig, at nogen i året 1900 kunne driste sig til at afvige så meget fra tilvante forestillinger, som Planck gjorde i sin udledelse af strålingsformlen.

Planck grundlagde kvantefysikken, men han tog ikke megen del i dens videre udformning. Den klassiske tradition, han var vokset op i, gjorde ham tilbageholdende over for de revolutionære ideer, der blev formuleret i årene 1925-26 af blandt andre den 43 år yngre Werner Heisenberg, og som er grundlaget for den moderne kvantefysik.

1.2 Atomernes udstrækning

I det forudgående afsnit har vi omtalt opdagelsen af nogle fundamentale naturkonstanter. Vi vil nu vise, at selve eksistensen af de omtalte naturkonstanter giver grund til at indføre karakteristiske længder, tider og energier, der ikke findes i den klassiske fysik.

Vi har allerede omtalt, hvorledes Planck knyttede energien $h\nu$ til frekvensen ν. I det følgende vil vi benytte konstanten $\hbar$, elektronens masse m og elementarladningen e til at

bestemme en karakteristisk længde, der viser sig at blive af samme størrelsesorden som atomernes udstrækning.

For at indse dette vil vi betragte det simplest mulige atom, brintatomet, som vi senere skal vende tilbage til. Et brintatom består af en positivt ladet kerne, der er ca. to tusinde gange så tung som den negativt ladede elektron, der bevæger sig om kernen. Ifølge den klassiske fysik tiltrækker positive og negative ladninger hinanden. Størrelsen af brintkernens ladning er den samme, nemlig e, som elektronens, men de to ladninger har modsat fortegn. I følge den klassiske fysik er kraften mellem sådanne to punktladninger omvendt proportional med kvadratet på deres indbyrdes afstand. Kraften er desuden proportional med hver af ladningerne, altså i dette tilfælde proportional med kvadratet e^2 på elementarladningen. Kraften kan altså skrives som

$$\frac{e_0^2}{r^2}$$

hvor r angiver afstanden fra brintkernen til elektronen. Størrelsen e_0^2 er en forkortet skrivemåde for $e^2/4\pi\epsilon_0$, hvor konstanten ϵ_0 kaldes permittiviteten af vakuum. Dens værdi, der kan afledes af lyshastigheden, er $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ farad/m. Man kan undre sig over, at det er nødvendigt at indføre konstanten $4\pi\epsilon_0$ i udtrykket for kraften. Det gjorde man heller ikke tidligere, da Coulombs lov, som kraftloven kaldes, blev skrevet på ovenstående form med e^2 i stedet for e_0^2. Når man i dag benytter e_0^2, skyldes det hensynet til at vælge et praktisk system af enheder.

En kraft har samme dimension som energi divideret med længde, d.v.s. en masse gange en længde divideret med kvadratet på en tid. Med andre ord, konstanten e_0^2 måles i enheder af kg $\mathrm{m}^3\mathrm{s}^{-2}$.

Man kan nu forsøge på, om det er muligt at kombinere størrelserne e_0, $\hbar$ og m til en længde, f. eks. ved at danne størrelsen

$$e_0^2 m\hbar.$$

Vi kan imidlertid hurtigt se, at dette ikke kan være en længde, da såvel e_0^2 som m og $\hbar$ har enheder, hvori massen indgår i første potens. Produktet må derfor være proportionalt med massen i tredje. For at vi skal kunne få en længde ud af de tre størrelser, er det nødvendigt,

at massen forsvinder. Derfor er et udtryk som

$$\frac{\hbar^2}{me_0^2}$$

et mere lovende gæt. Da tælleren i dette udtryk har dimension $\mathrm{m^4kg^2/s^2}$ og nævneren har dimension $\mathrm{m^3kg^2/s^2}$, ses resultatet netop at blive en længde. Længden $\hbar^2/me_0^2$ kaldes Bohr-radius og betegnes med symbolet a_0. Den indgår i den epokegørende atommodel, der i 1913 blev fremsat af Niels Bohr.

Indsættes nu værdierne for de fysiske konstanter m, e, ϵ_0 og $\hbar$, der er givet ovenfor, bliver a_0 givet ved

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me_0^2} = 0,529 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}. \tag{1.2}$$

Vi vil nedenfor (i afsnit 1.5) vise, at Bohr-radius er det eneste udtryk med dimension af længde, der kan dannes ud fra de opgivne konstanter m, e_0 og $\hbar$.

Selv om vi kun har vist, at $\hbar^2/me_0^2$ er en længde og fundet dens størrelse, fortæller resultatet os, hvilken karakteristisk længde, der må fremkomme, når vi løser kvantemekanikkens ligninger for et brintatom. Størrelsen af Bohr-radius givet ved (1.2) er i overensstemmelse med vores viden om atomernes udstrækning. F. eks. er afstanden mellem de to brintkerner i brintmolekylet $0,74 \cdot 10^{-10}$ meter, og en tilsvarende længde karakteriserer afstanden mellem naboatomer i faste stoffer.

På ganske samme måde kan vi nu argumentere for, at vi ud fra de nævnte naturkonstanter kan danne en karakteristisk energi. Denne energi er

$$E_0 = \frac{e_0^2}{a_0} = \frac{me_0^4}{\hbar^2}, \tag{1.3}$$

hvor vi både har udtrykt energien ved Bohr-radius og ved de tre oprindelige naturkonstanter. Størrelsen af E_0 er på nær en talfaktor (der i dette tilfælde er 1/2) lig med brintatomets bindingsenergi, d.v.s. den energi, der skal tilføres for at fjerne elektronen fra brintkernen. Ved at indsætte naturkonstanternes værdi fås

$$E_0 = 4,4 \cdot 10^{-18}\,\mathrm{joule}. \tag{1.4}$$

Man angiver ofte denne energi i elektronvolt (eV), idet 1 elektronvolt er den energi, som en elektron får ved gennemløb af et spændingsfald på 1 volt. Udtrykt i elektronvolt er (1.4) givet ved $E_0 = 27,2$ eV.

Naturkonstanterne m, e_0 og $\hbar$ bestemmer altså en længde, der er af samme størrelsesorden som atomernes udstrækning, og en energi, der er af samme størrelsesorden som bindingsenergien af en atomar elektron. Dette viser os, at Plancks konstant og kvanteteorien rummer nøglen til forståelsen af atomernes struktur og egenskaber.

1.3 Kvanter og tilstande

I begyndelsen af dette kapitel omtalte vi de to partikelfamilier, hadroner og leptoner. Vi vil nu indføre den tredje familie af partikler, som vi kalder for kvanter. Den simpleste er lyskvantet eller fotonen. De såkaldte vektorbosoner og gluoner, der har betydning for henholdsvis de svage og de stærke vekselvirkninger, hører også med til denne familie. Begrebet kvantetilstand vil blive introduceret i dette afsnit, og vi skal se, hvorledes brintatomets energitilstande kan bestemmes.

1.3.1 Fotoner

Lys består af fotoner. I stedet for at opfatte lys som elektromagnetiske bølger kan vi beskrive lys som bestående af masseløse partikler, fotoner, hvis energi er omvendt proportional med lysets bølgelængde. Også radiobølger eller røntgenstråling består af fotoner, selv om bølgelængden er henholdsvis meget længere og meget kortere end bølgelængden af synligt lys. For radiobølger er kvantets energi meget lille, da typiske bølgelængder for radiobølger ligger mellem 10 cm og 10 km. For røntgenstråling er energien derimod stor, da bølgelængden er lille, ca. 10^{-10} m.

Ved hjælp af Plancks konstant h og lyshastigheden c kan vi knytte en energi til en bølge med bestemt bølgelængde λ. For lys som for alle andre bølger er der en sammenhæng mellem frekvens, bølgelængde og udbredelseshastighed. Lysets frekvens ν er omvendt proportionalt med dets bølgelængde λ, idet

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \tag{1.5}$$

hvor c er lyshastigheden. På samme måde som for hulrumsstrålingen kan vi nu knytte energien $h\nu$ til en svingning af frekvens ν. Ved at gange hver side af (1.5) med Plancks konstant h ses

det, at energien E bliver

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}. \tag{1.6}$$

For at bestemme energien af et røntgenkvantum svarende til bølgelængden $\lambda = 10^{-10}$ m benytter vi, at lyshastigheden er $c = 3 \cdot 10^8$ m/s, mens Plancks konstant er $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ m^2 kg/s. Det ses, at kvantets energi bliver $E = 2 \cdot 10^{-15}$ joule. Røntgenfotonens energi er altså langt større end bindingsenergien for en atomar elektron, der er givet omtrentligt[3] ved (1.4). Energien af en røntgenfoton er stor nok til, at den kan slå et atom i stykker. Energien af en radiofoton svarende til bølgelængden 1 m er 10^{10} gange så lille, nemlig $E = 2 \cdot 10^{-25}$ joule, altså langt mindre end bindingsenergien af en atomar elektron. En radiofoton kan ikke slå et atom i stykker.

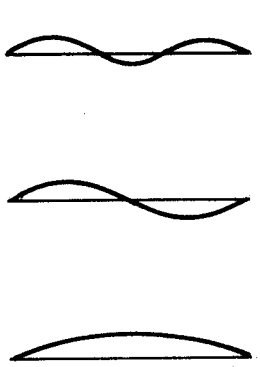
Bølgelængden af synligt lys er mellem $4 \cdot 10^{-7}$ m og $7 \cdot 10^{-7}$ m. De tilsvarende energier bliver mellem 4000 og 7000 gange mindre end røntgenfotonens energi eller af samme størrelsesorden som bindingsenergien for elektronen i brintatomet. Som vi skal se i dette afsnit, er dette ikke noget tilfælde. Synligt lys kan fremkomme ved, at elektronen i brintatomet går fra én kvantetilstand til en anden med mindre energi under udsendelse af en foton. Da den samlede energi er bevaret, er fotonens energi netop lig med forskellen mellem energierne af de to tilstande. Denne energiforskel er på nær en talfaktor, der er mindre end 1, givet ved elektronens bindingsenergi og dermed af samme størrelsesorden som (1.4). Vi har imidlertid foregrebet den følgende fremstilling ved at indføre et nyt begreb, en kvantetilstand, som vi nu skal søge at forklare ved hjælp af en analogi.

1.3.2 En svingende streng

Lad os tage udgangspunkt i en violinstreng, der er stemt i kammertonen (a). Det er ikke nødvendigt at bruge kvanteteori for at beskrive de svingninger, der sættes i gang, når en violinist stryger på sit instrument. Den klassiske akustik er fuldt tilstrækkelig til dette formål[4].

[3]Bindingsenergien for brintatomet er halvdelen af energien (1.4) eller $2,2 \cdot 10^{-18}$ joule.

[4]For at indse dette behøver vi blot at tænke på størrelsen af det lydkvantum, der svarer til kammertonen, hvis frekvens er 440 svingninger per sekund. Da Plancks konstant er $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ m^2 kg/s, bliver energien $h\nu$ af et lydkvantum $2,9 \cdot 10^{-31}$ joule eller ca. 10^{10} gange så lille som energien kT ved stuetemperatur, der



Figur 1.2: Grundsvingning og overtoner

Eksemplet tjener udelukkende til at introducere kvanteteoriens abstrakte tilstandsbegreb.

En violinist får instrumentets toner frem ved at anbringe venstre hånds fingre forskellige steder på strengen samtidig med at stryge hen over strengen med buen. Er violinisten rutineret og strengen anbragt på en Stradivarius eller en Guarnerius, er lydindtrykket et ganske andet, end hvis en begynder trakterer en fabriksviolin. Årsagen er, at lyden er en blanding af toner, foruden grundtonen også de såkaldte overtoner. Hvis violinisten stryger på en streng, der er stemt i kammertonen a uden at anbringe fingrene på denne, er grundtonen en lydsvingning med en frekvens på 440 Hz, hvor enheden Hz (Hertz) er én svingning per sekund. Den første overtone (eller, som man også siger, den anden harmoniske) er en svingning med den dobbelte frekvens svarende til 880 Hz. Tonens kvalitet afhænger af, hvor kraftigt de enkelte overtoner er repræsenteret i toneblandingen, og dette hænger igen sammen med violinens bygning, lakkens sammensætning og andre hemmeligheder, der er gået i arv fra far til søn i 1600- og 1700-tallets violinbyggerdynastier. Klangforskellene mellem forskellige musikinstrumenter skyldes forskelle i overtoneblandingernes sammensætning. Hvis kun de rene grundtoner blev anslået, ville alle musikinstrumenter lyde ens. Oboens a ville lyde ligesom klarinettens og violinens, en grå og livløs grundsvingning.

Lad os tænke os en verden, hvori det kun er tilladt at lade a-strengen på violinen svinge i dens grundsvingning på 440 Hz og i dennes harmoniske svingninger, altså de tilhørende overtoner. Toner, der fremkommer ved, at violinisten med en finger trykker strengen ned på et bestemt sted, er forbudte. Derimod har violinisten lov til at understøtte strengen

(på nær en talfaktor) er den gennemsnitlige bevægelsesenergi af et luftmolekyle.

i knudepunkterne for de forskellige overtoner (fig. 1.2) for derved at frembringe det, der i musiksproget hedder flageoletter. En flageolet frembringes ved at lægge fingeren løst på strengen uden at trykke denne ned. Herved opnås, at den overtone, der svarer til en svingning med knudepunkt på det sted, hvor fingeren er anbragt, bliver fremhævet. Lad os kalde den rene grundsvingning og de rene harmoniske svingninger, der er illustreret på fig. 1.2, for strengens tilstande. Vi vil betegne disse tilstande med $|a^1\rangle$, $|a^2\rangle$, $|e^2\rangle$ i overensstemmelse med den terminologi, man anvender i musiksproget. Symbolet $|a^1\rangle$ skal opfattes som en angivelse af en svingningstilstand, der er illustreret ved den nederste tegning i fig. 1.2.

Violinstrengen kan altså befinde sig i en hvilkensomhelst af de omtalte svingningstilstande $|a^1\rangle$, $|a^2\rangle$, $|e^2\rangle$ etc. Når spillereglerne overholdes - det er forbudt for violinisten at trykke strengen ned - kan kun disse tilstande optræde i toneblandingen, ikke andre. En musikverden med sådanne regler ville være en fattig verden - hverken Mozart eller Schubert ville kunne forekomme. Ikke desto mindre adlyder naturens mindste dele spilleregler af denne form. Vi kalder dem kvantiseringsregler.

Selv om de musikalske spilleregler, der er pålagt vor violinist, ikke tillader at trykke strengen ned med en finger, er det som nævnt tilladt for violinisten at fremhæve overtoner ved at anbringe fingeren løst på et knudepunkt. Dette kan udtrykkes som et superpositionsprincip: En hvilken som helst kombination af grund- og overtonesvingninger er tilladt. Når vi har valgt at kalde svingningstilstandene $|a^1\rangle$, $|a^2\rangle$, $|e^2\rangle$ etc. skyldes det udelukkende musiksprogets konvention. Vi kunne lige så godt kalde dem $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ etc. , hvad der er bekvemmere. Ifølge det superpositionsprincip, der er nedlagt i spillereglerne, kan strengens svingninger fremkomme ved en overlejring af tilstandene $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ etc., hvor frekvensen ν hørende til hver af disse tilstande er

$$\nu = n\nu_0\,, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{1.7}$$

Frekvensen ν_0 svarer til kammertonens 440 svingninger per sekund, altså $\nu_0 = 440$ Hz. Tonernes klangfarve er bestemt af vægtene af de enkelte komponenter i blandingen af tilstande. Tilstanden $|n\rangle$ kaldes en egentilstand: den er karakteriseret ved netop én frekvens, $\nu = n\nu_0$. Strengens grundsvingning hedder altså $|1\rangle$ og er den egentilstand, der har lavest mulig frekvens. Vi kalder den for strengens grundtilstand. Den tone vi hører, når violinisten

stryger sit løse a ved helt at undlade at benytte venstrehåndens fingre, er en superposition, en blanding af tilstandene $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ etc. eller, som vi tidligere sagde, $|a^1\rangle$, $|a^2\rangle$, $|e^2\rangle$ etc.

I det forudgående har vi indført de for kvantemekanikken centrale begreber egentilstand og superposition. En egentilstand svarer til en ren sinussvingning i musiksproget, altså grundsvingningen eller en af de harmoniske. Egentilstanden mærkes med et kvantetal, der beskriver værdien af den fysiske størrelse, der med sikkerhed vil blive observeret, hvis vi foretager en måling på det fysiske system. For en elektron, der bevæger sig omkring en brintkerne (en proton), kan egentilstandene mærkes med kvantetallet n, der beskriver de mulige værdier af elektronens energi. Tilstandene $|n\rangle$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ svarer til de fysiske situationer, hvor brintatomet med sikkerhed har energien E_n. Som vi skal vise i det følgende afsnit, er E_n for brintatomet givet ved

$$E_n = -\frac{A}{n^2}, \tag{1.8}$$

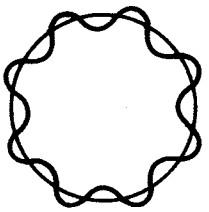
hvor A er en konstant. Vi har allerede ved en dimensionsbetragtning (se ligning (1.4)) argumenteret for, at konstanten A må være proportional med $me_0^4/\hbar^2$. Resultatet af det følgende afsnit er, at A bliver givet ved

$$A = \frac{me_0^4}{2\hbar^2}. \tag{1.9}$$

1.3.3 Brintatomet

For at indføre begreberne tilstand, superposition og kvantisering har vi taget udgangspunkt i et bølgefænomen fra den klassiske fysik, strengens stående svingninger, der er vist på fig. 1.2. I dette afsnit vil vi illustrere, hvad der menes med et systems bølgefunktion.

Enhver, der har tilbragt tid ved stranden, er fortrolig med vandbølgers egenskaber. Hen over havoverfladen ses en udbredelse af et bølgetog, hvis hastighed afhænger af vanddybden. Jo lavere vandstanden er, jo mindre er bølgens hastighed. Derfor går vandbølgerne altid parallelt med kystlinjen, når de kommer tæt ved kysten. Bølgefronten drejes ind på grund af, at den del af en bølge, der er nærmest kysten, har en mindre hastighed end de fjernere dele. Bølgen repræsenterer en udbredelse af ændringer af vandoverfladens form. Derimod sker der ingen transport af de enkelte smådele af vandet. En prop, der flyder på vandet, vil bevæge sig op og ned med bølgen, men den vil ikke blive transporteret mod stranden med



Figur 1.3: Kvantisering

bølgeformens udbredelseshastighed. På samme måde er lydbølger lokale svingninger i luftens tryk og tæthed. De enkelte luftpartikler svinger lokalt, men bliver ikke ført med af bølgen. Det vi kalder en lyd- eller vandbølge repræsenterer altså en abstraktion, ifølge hvilken det er overfladens ændringer snarere end vandets smådele der udbreder sig med bølgens hastighed.

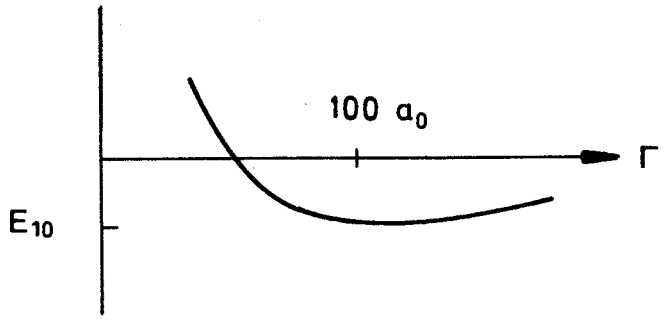
En elektron, der bevæger sig omkring en proton i et brintatom, kan også repræsenteres ved en bølge. Vi kan forestille os, at de kvantiserede energiniveauer fremkommer ved, at elektronens bane omkring den positivt ladede kerne (protonen) netop består af et helt antal bølgelængder. Derved bliver kun visse energier tilladt, nemlig de, der svarer til at bølgelængden går op i banens omkreds. Bølgelængden λ skal altså være banens omkreds D delt med et helt tal n, eller $\lambda = D/n$. Foreløbig har vi ikke knyttet nogen fysisk betydning til den elektronbølge, der er tegnet i fig. 1.3. Lad os imidlertid forsøgsvis knytte bølgelængden λ til impulsen p igennem relationen

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

hvor h er Plancks konstant. Impulsen p indgår i den totale energi E for elektronen igennem den kinetiske energi $p^2/2m$. Desuden har elektronen en potentiel energi $-e_0^2/r$, hvorved dens totale energi E bliver lig med

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e_0^2}{r}.$$

Vi indsætter nu $p = h/\lambda$ og benytter kvantiseringsreglen $\lambda = 2\pi r/n$, hvor n er et helt, positivt tal. Denne kvantiseringsregel kan i øvrigt også udtrykkes ved partiklens impulsmoment L, der for en cirkelbevægelse er defineret ved $L = rp$, hvorved kvantiseringsbetingelsen bliver



Figur 1.4: Funktionen (1.10) for $n = 10$

$L = n\hbar$. Heraf fås nu

$$E = \frac{\hbar^2 n^2}{2mr^2} - \frac{e_0^2}{r}. \tag{1.10}$$

Denne funktion $E(r)$ er illustreret i fig. 1.4. Systemets energi er givet ved funktionens minimum, på figuren kaldet E_n, da man i denne sammenhæng kan opfatte $E(r)$ som en effektiv potentiel energi og se bort fra den kinetiske energi hørende til elektronens bevægelse i radial retning. Dette ræsonnement forudsætter, at tallet n er meget større end 1, men resultatet i ligning (1.11) nedenfor er gyldigt for enhver positiv heltallig værdi af n, altså $n = 1, 2, 3, \ldots$.

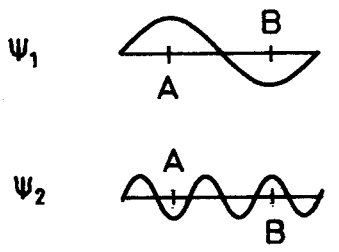
Man kan bestemme kurvens minimum ved at differentiere (1.10). Minimet for $E(r)$ ses på denne måde at fremkomme, når $r = n^2\hbar^2/me_0^2$. Den tilhørende energi, der bestemmes ved at indsætte dette udtryk for r i (1.10), bliver da givet ved

$$E_n = -\frac{me_0^4}{2\hbar^2 n^2}, \tag{1.11}$$

der netop er resultatet anført i ligningerne (1.8-9).

1.3.4 Sandsynlighedsbølger

Selv om vi ved relationen $\lambda = h/p$ har tilordnet elektronen en bølge og deraf afledt en kvantiseringsregel for energien, har vi endnu ikke sagt noget om bølgens fysiske betydning. Den bølge, vi knytter til elektronen, skal opfattes som en sandsynlighedsbølge. Den udtrykker, at en måling af elektronens position i rummet, når vi ved, at elektronen befinder sig i tilstanden $|n\rangle$, kan give forskellige mulige udfald, hvis sandsynlighed er beskrevet ved en fordeling. Den pågældende sandsynlighedsfordeling fremkommer som absolutkvadratet på elek-



Figur 1.5: Interferens

tronens bølgefunktion. Man betegner hyppigt bølgefunktionen med det græske bogstav ψ. Bølgefunktionens kvadrat $|\psi|^2$ kaldes for sandsynlighedstætheden[5]. Bølgefunktionen og dens kvadrat er funktioner af elektronens sted og varierer altså i rummet. Størrelsen af ψ må være afpasset således, at sandsynligheden er 1 for at observere elektronen et eller andet sted i rummet. Dette kan opnås ved at normere bølgefunktionen, d.v.s. at gange bølgefunktionen med en konstant talfaktor, således at resultatet bliver 1, når sandsynlighedstætheden $|\psi|^2$ integreres over hele rummet. Man siger, at bølgefunktionen er normeret.

Også for sandsynlighedsbølger gælder superpositionsprincippet. Hvis tilstandene ψ_1 og ψ_2 begge er mulige tilstande for systemet, er også summen $\psi = \psi_1 + \psi_2$ en mulig tilstand[6]. Lad os for nemheds skyld forudsætte, at såvel ψ_1 som ψ_2 er reelle. Sandsynlighedstætheden i tilstanden ψ er **ikke** summen $\psi_1^2 + \psi_2^2$ af de to tilstandes sandsynlighedstætheder, idet kvadratet på ψ er $\psi^2 = \psi_1^2 + \psi_2^2 + 2\psi_1\psi_2$. Sandsynlighedsbølger kan interferere, d.v.s. udslukke eller forstærke hinanden. Hvis vi adderer de to bølger ψ_1 og ψ_2, der er vist på fig. 1.5, vil bølgerne udslukke hinanden i visse punkter og forstærke hinanden i andre. I punkterne A og B vil sandsynligheden for at observere elektronen være nul til trods for, at tilstanden $\psi = \psi_1 + \psi_2$ er fremkommet ved overlejring af to tilstande, hvori sandsynlighedstætheden for at observere elektronen i de nævnte to punkter er forskellig fra nul.

Igennem relationen $\lambda = h/p$ har vi i forrige afsnit knyttet en bølge til en partikel, hvis

[5]Generelt skal bølgefunktioner opfattes som komplekse størrelser $\psi = \mathrm{Re}\psi + i \cdot \mathrm{Im}\psi$, hvor $\mathrm{Re}\psi$ og $\mathrm{Im}\psi$ angiver henholdsvis real- og imaginærdelen af ψ, mens tallet i har den egenskab, at $i^2 = -1$. Sandsynlighedstætheden er da $(\mathrm{Re}\psi)^2 + (\mathrm{Im}\psi)^2$, der betegnes som absolutkvadratet.

[6]Vi ser her bort fra, at ψ skal være normeret.

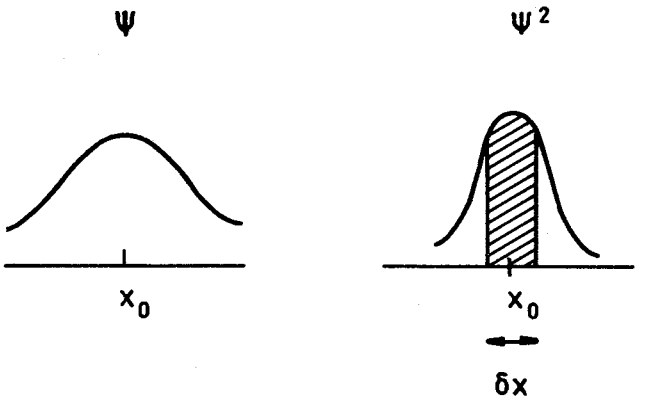
impuls er p. Denne sammenhæng, der blev postuleret for at forklare energikvantiseringen i brintatomet, er af fundamental betydning. Den gælder for elektroner eller andre partikler, der bevæger sig med en bestemt impuls. Davisson og Germer udførte i 1927 et eksperiment, hvori de beskød en nikkelkrystal med elektroner med samme impuls p. De fandt, at elektronerne blev afbøjet af krystalatomerne, som om de var bølger med bølgelængde $\lambda = h/p$. For en elektron med en kinetisk energi $p^2/2m$, der f. eks. er 100 eV, er den tilsvarende bølgelængde givet ved[7] $\lambda = 1,2 \cdot 10^{-10}$ m. Røntgenstråling med samme bølgelængde vil afbøjes ganske tilsvarende. Af et sådant forsøg kunne man fristes til at slutte, at en elektron måtte være en bølge, men dette ville være en forkert sprogbrug. At en elektron befinder sig i en tilstand med veldefineret impuls p, betyder, at der er samme sandsynlighed for at observere den overalt i rummet, i overensstemmelse med den udstrakte karakter af et bølgetog.

I kvantemekanikken kan man ikke se bort fra vekselvirkningen mellem det målte objekt og måleinstrumentet. Vore målinger udføres med apparater, der beskrives ved den klassiske fysiks love. Afhængigt af, hvilken af elektronens egenskaber - sted, impuls eller energi - vi måler, vil denne måling kunne forstyrre elektronens tilstand. Overlades elektronen til sig selv, vil dens bølgefunktion ændre sig i tiden på en entydig, veldefineret måde, der er bestemt af kvantemekanikkens grundlæggende bevægelsesligning, Schrödingerligningen, hvis klassiske modstykke er Newtons bevægelsesligninger. Dette træk ville vi kalde determinisme, ganske som den klassiske mekaniks love tillader at forudsige planeternes baner i årtusinder fremover. Vekselvirkningen med måleinstrumentet indfører derimod mangel på kausalitet i sædvanlig forstand. Den begrænser vore udsagn om fysiske systemer til at være sandsynlighedsudsagn.

1.3.5 Usikkerhedsrelationerne

Den tyske fysiker Werner Heisenberg (1901-1976) var en af grundlæggerne af den moderne kvanteteori. Hans afhandling i Zeitschrift für Physik fra 1925 må regnes blandt århundredets mest betydningsfulde.

[7]Dette kan indses ved at omsætte energien 100 eV til joule under benyttelse af $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Coulomb. Med $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg fås $\lambda^2 = (6,63^2/2 \cdot 1,6 \cdot 100 \cdot 9,1)10^{-18}\text{m}^2$ svarende til $\lambda = 1,2 \cdot 10^{-10}$ m.



Figur 1.6: Bølgefunktion og sandsynlighedstæthed

Heisenbergs ideer tog form under et ophold på Helgoland i juni 1925. På grund af høfeber var han i denne periode nødsaget til at forlade Göttingen til fordel for Helgoland, hvor der ikke vokser græs. Hans egen senere beskrivelse[8] giver et levende indblik i den skabende proces: "Im Helgoland war ein Augenblick, in dem es mir wie eine Erleuchtung kam, als ich sah, dass die Energie zeitlich konstant war. Es war ziemlich spät in der Nacht. Ich rechnete es mühsam aus, und es stimmte. Da bin ich auf einen Felsen gestiegen und habe den Sonnenaufgang gesehen und war glücklich." Den 29 juli samme år modtog Zeitschrift für Physik Heisenbergs afhandling. Den gav anledning til artikler af M. Born og P. Jordan (modtaget 27 september, 1925), af P.A.M. Dirac (modtaget 7 november 1925) og af Born, Heisenberg og Jordan (modtaget 16 november 1925) i en udvikling, der næppe har sidestykke i videnskabshistorien. Disse forfattere regnes i dag for den moderne kvanteteoris fædre. De byggede på det grundlag, der var givet med Niels Bohrs atommodel fra 1913 og kvantiseringsregler udviklet af Niels Bohr og Arnold Sommerfeld i det følgende tiår.

Gennembruddet i 1925 blev i de næste par år fulgt af mange banebrydende arbejder, hvori den nye kvanteteori blev anvendt. I løbet af få år blev det klart, at den nye formulering af kvanteteorien fjernede de vanskeligheder, der havde vist sig under det forudgående årtis forsøg på at generalisere Bohrs model for brintatomet. Der var hermed skabt et nyt værktøj, en ny mekanik, som i de kommende årtier åbnede forståelsen ikke blot for atomernes og elementarpartiklernes egenskaber, men også for makroskopiske systemer som metaller eller halvledere.

I 1927 formulerede Heisenberg de usikkerhedsrelationer, der i dag bærer hans navn. De udtrykker, at der for en partikel er en sammenhæng mellem den usikkerhed, hvormed dens position kan fastlægges, og den usikkerhed, hvormed dens impuls kan fastlægges. For at illustrere dette har vi i fig. 1.6 vist en reel bølgefunktion ψ og den tilhørende sandsynlighedstæthed

[8] "Sources of Quantum Mechanics", ed. by B. L. van der Waerden, Dover, 1967, p. 25.

ψ^2. Sandsynligheden for at observere partiklen er størst i punktet x_0 og aftager, når x bliver større end eller mindre end x_0. Det skraverede areal angiver bredden af det interval, inden for hvilket der er 50% sandsynlighed for at observere elektronen. Længden af dette interval vil vi kalde fordelingens spredning og betegne med δx.

Ønsker vi derimod at vide noget om resultatet af en måling af partiklens impuls, må vi først udtrykke bølgefunktionen som en overlejring af tilstande, der hver for sig svarer til en bestemt impuls p. Som tidligere vil vi angive sådanne egentilstande ved symbolet $|p\rangle$. Den vægt, hvormed de enkelte $|p\rangle$-tilstande indgår i overlejringen, betegnes med $\phi(p)$. Den kan opfattes som en bølgefunktion, der afhænger af p i stedet for af x, og dens kvadrat, $\phi^2(p)$, er en sandsynlighedstæthed, en fordeling der beskriver sandsynligheden for at måle en bestemt værdi af partiklens impuls. Idet spredningen i denne sandsynlighedsfordeling betegnes med δp, gælder det, at spredningen δp hænger sammen med spredningen δx som følger: den mindst mulige værdi af produktet $\delta p \delta x$ er med tilnærmelse givet ved Plancks konstant $\hbar$, eller

$$\delta p \delta x \simeq \hbar. \tag{1.12}$$

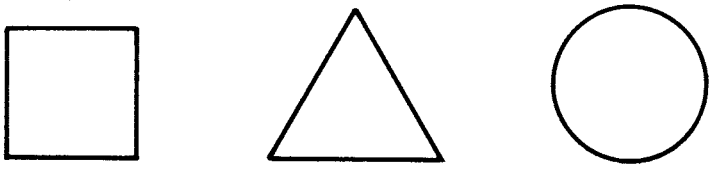
Resultatet (1.12) er en konsekvens af, at vi har knyttet en bølge med bølgelængde $\lambda = h/p$ til en partikel med en bestemt impuls p. Kaldes det cykliske bølgetal $k(= 2\pi/\lambda)$, gælder det, at $\delta x \delta k \simeq 1$, idet overlejringen af bølger med forskellig bølgelængde medfører udslukning uden for et interval af bredden $\delta x \simeq 1/\delta k$.

Man kalder (1.12) for Heisenbergs usikkerhedsrelation. Den udtrykker den fundamentale begrænsning, der er indeholdt i kvanteteorien: vi kan ikke samtidig hævde, at partiklen med sikkerhed befinder sig i et bestemt punkt af rummet, og at den har en bestemt, veldefineret impuls. Vort ukendskab til stedet er omvendt proportionalt med vort ukendskab til impulsen: jo bedre partiklens sted er fastlagt (jo mindre interval δx på fig. 1.6), jo mere usikker bliver dens impuls (jo større δp). For objekter af makroskopisk udstrækning har denne begrænsning ingen umiddelbare konsekvenser. Tages som eksempel en partikel med masse 1 g, vil et krav om, at δx højst er 1 mm indebære, at δp er af størrelsesordenen 10^{-31} m kg/s. Er massen af partiklen 1 g, bliver den tilhørende usikkerhed i hastighed ca. 10^{-28} m/s. Denne usikkerhed er så lille, at den er uden betydning. For en elektron med masse m givet ved $m = 9 \cdot 10^{-31}$ kg, og med $\delta x = 10^{-10}$ m svarende til atomets karakteristiske udstrækning, bliver usikkerheden

i partiklens hastighed derimod langt større, af størrelsesordenen 10^6 m/s. Den tilhørende kinetiske energi er ca. 10^{-18} joule eller 10 elektronvolt, en energi, der har omtrent samme størrelse som brintatomets bindingsenergi. I atomernes verden må usikkerhedsrelationerne derfor spille en afgørende rolle.

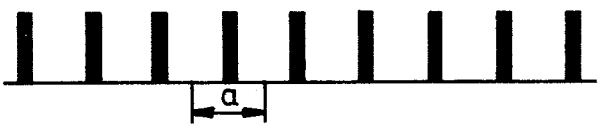
1.4 Symmetri og invarians

Begrebet symmetri er kendt fra vor dagligdag. I fig. 1.7 viser vi nogle figurer, der er uændrede (eller - som man også siger - invariante) over for resultatet af bestemte symmetrioperationer. En symmetrioperation for kvadratet i fig. 1.7 kan bestå i, at kvadratet drejes en vinkel på 90



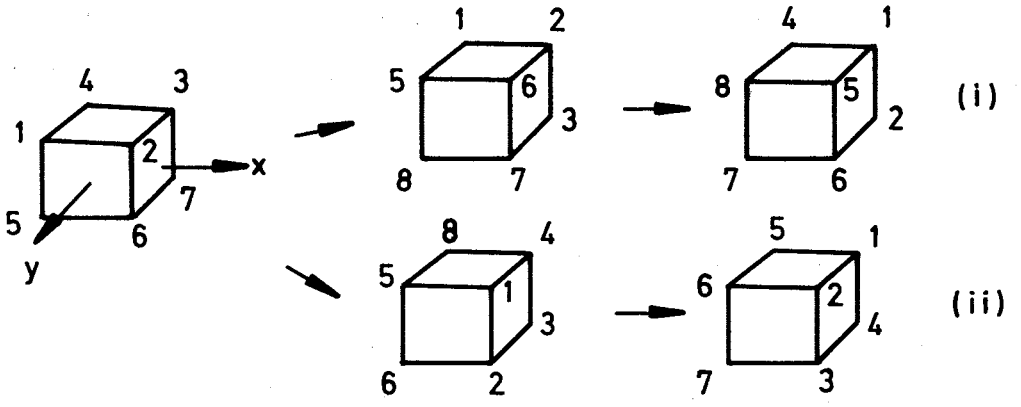
Figur 1.7: Symmetriske figurer

grader omkring en akse igennem dets midtpunkt. Herved bliver den resulterende figur identisk med den oprindelige, da vi ikke kan skelne kvadratets hjørner fra hinanden, med mindre vi mærker dem med f. eks. A, B, C og D og derved bryder symmetrien. Hvis kvadratet kun drejes igennem en vinkel på 45 grader, går det derimod ikke over i sig selv. Kvadratet er altså ikke invariant over for drejninger på 45 grader, men nok under drejninger på 90, 180 eller 270 grader. En cirkel har fuldstændig symmetri under alle sådanne operationer: en vilkårlig drejning om dens centrum får cirklen til at gå over i sig selv. I stedet for at dreje om et punkt kunne man tænke sig at forskyde i rummet. Mønstret på fig. 1.8 er uændret ved forskydning



Figur 1.8: Forskydning

på et helt antal gange længden a, men det ændres, hvis forskydningen f. eks. er $a/2$ (der ses her bort fra randeffekter, idet man kan tænke sig mønstret fortsat vilkårligt langt fra de to

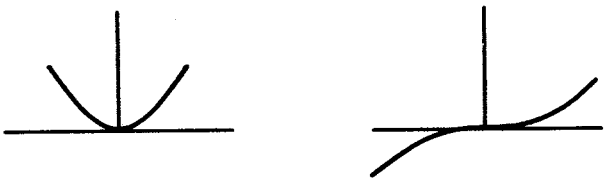


Figur 1.9: Ikke-ombyttelige symmetrioperationer

ender på figuren). Spejling er en symmetrioperation, hvorved f. eks. en højreskrue bliver til en venstreskrue og omvendt.

Også tiden kan gøres til genstand for en symmetrioperation. Ved at vende tiden, så den går baglæns, fås en anden mulig verden, hvori virkning tilsyneladende har erstattet årsag. Tidsvending svarer til at spille en film baglæns. De mekaniske bevægelseslove - inklusive kvantemekanikkens - er uændrede under en sådan operation. Deres form er nøjagtig den samme, hvadenten tiden angives ved variablen t eller $-t$, svarende til tidsvendingen. Men naturen synes ikke at respektere denne symmetri. Som bekendt bliver røræg ikke til hvide og blomme, mens det omvendte hyppigt kan iagttages.

Det er ikke ligegyldigt i hvilken orden, man udfører symmetrioperationer. Lad os som eksempel på dette se på de symmetrioperationer, der fører en terning over i sig selv. På fig. 1.9 har vi tegnet en terning, hvis hjørner er mærket med $1, 2 \ldots, 8$. Drejer man først en vinkel på 90 grader om x-aksen, fulgt af en drejning på 90 grader om y-aksen, vil resultatet være (i). Foretages de to drejninger i modsat rækkefølge, fremkommer imidlertid (ii) (man kan nemmest se dette ved selv at udføre disse drejninger med en terning). Sådanne operationer er altså ikke indbyrdes ombyttelige.



Figur 1.10: Lige og ulige

1.4.1 Paritet og permutation

I kvantemekanikken spiller symmetrierne paritet og permutation en vigtig rolle. Vi skal benytte disse til at introducere operatorbegrebet, der er af fundamental betydning i den matematiske formulering af kvantemekanikken. Ved en paritetsoperation forstår man en spejling i et punkt, der også betegnes som inversion. For en funktion f, der kun afhænger af én variabel x, altså $f(x)$, består paritetsoperationen i at erstatte $f(x)$ med $f(-x)$. Dette udtrykkes ved en paritetsoperator P, der er defineret ved ligningen

$$Pf(x) = f(-x). \tag{1.13}$$

Vi giver nu et par eksempler på brugen af paritetsoperatoren P.

i) Lad f være funktionen x^2. Så er Pf åbenbart per definition $(-x)^2$, der imidlertid er det samme som x^2, idet $(-1)(-1) = 1$. Vi har altså, at

$$Px^2 = x^2. \tag{1.14}$$

Denne ligning viser, at funktionen x^2 er en egenfunktion for P. At f er en egenfunktion for operatoren P betyder nemlig, at Pf er proportional med funktionen f, altså $Pf = \lambda f$, hvor proportionalitetskonstanten λ, der betegnes som egenværdien, i vores eksempel åbenbart er 1.

ii) Som det næste eksempel lader vi f være funktionen x^3. Det ses nu tilsvarende, at

$$Px^3 = (-x)^3 = -x^3, \tag{1.15}$$

der viser, at x^3 er en egenfunktion for paritetsoperatoren med egenværdien (-1).

Vi kan formulere indholdet af disse to eksempler på en anden måde: funktionerne x^2 og x^3 er henholdsvis lige og ulige, som illustreret på fig. 1.10. Med betegnelsen 'lige' menes, at

funktionen er uændret under symmetrioperationen $x \rightarrow -x$, mens 'ulige' angiver, at funktionen skifter fortegn som resultat af denne symmetrioperation. Man siger også, at x^2 har pariteten 1, mens x^3 har pariteten -1.

En funktion som $3x^2 + x^3$ har derimod ingen bestemt paritet. Dette kan vi indse ved at lade paritetsoperatoren P virke på denne, d.v.s. erstatte x med $-x$ overalt i funktionen. Vi får åbenbart

$$P(3x^2 + x^3) = 3x^2 - x^3, \tag{1.16}$$

der viser, at funktionen ikke er en egenfunktion for paritetsoperatoren. En sum af en lige og en ulige funktion er hverken lige eller ulige.

Når vi her har indført begrebet paritet og den tilhørende operator P med egenværdierne 1 og -1, kunne det se ud, som om vi forsøger at beskrive en enkel sag - forskellen mellem lige og ulige funktioner - ved et kompliceret begrebsapparat. Motiveringen er imidlertid, at også fysiske størrelser som sted, impuls eller energi i kvanteteorien er knyttet til operatorer. Operatorernes egenværdier repræsenterer de mulige udfald af en fysisk måling af den pågældende størrelse. For paritetens vedkommende er egenværdierne 1 eller -1. For energien af et brintatom er egenværdierne givet ved ligning (1.11), mens egenværdierne for impulsen p af en fri partikel udgør et kontinuum, der strækker sig fra minus uendelig til plus uendelig. Hvis to forskellige størrelser (der betegnes som A og B) skal kunne måles samtidig, er det nødvendigt, at de tilhørende operatorer A og B er ombyttelige. Med dette menes, at $AB = BA$, eller sagt på en anden måde: det er ligegyldigt, om vi først virker med operatoren B og derefter med A, eller om vi først virker med A og derefter med B (jvf. ovenstående bemærkninger om ombytteligheden af to symmetrioperationer). Stedoperatoren x for en partikel er ikke ombyttelig med impulsoperatoren p. Der gælder derimod, at $xp - px = i\hbar$, hvor tallet i er den imaginære enhed, der opfylder, at $i^2 = -1$. Matematisk set er Heisenbergs usikkerhedsrelationer for sted og impuls (se ligning (1.12)) en konsekvens af ombytningsrelationen $xp - px = i\hbar$, som vi skal diskutere mere indgående i kapitel 3.

En paritetsoperation er altså en 'spejling' i et punkt, forstået på den måde, at koordinaterne x, y og z erstattes med $-x, -y$ og $-z$. De tilhørende egenværdier er 1 og -1. Et andet eksempel på en vigtig symmetrioperation er symmetri over for ombytning af identiske partikler. Egenværdierne er i dette tilfælde de samme som for paritetsoperationen, nemlig 1 og -1. Dette skal vi nu forsøge at begrunde.

Et fysisk system, der består af identiske partikler (som f. eks. to elektroner), må i kvan-

teteorien beskrives ved operatorer, der er uændret ved ombytning af de to elektroner. Ellers var partiklerne jo ikke identiske. Protonen og elektronen i brintatomet er ikke identiske - de adskiller sig både igennem ladningen og massen, der for protonens vedkommende er 1836 gange så stor som elektronens. De to elektroner i et heliumatom er derimod identiske. Kalder vi sådanne to identiske elektroners stedkoordinater for x_1 og x_2, må sandsynlighedstætheden være uændret under ombytning af elektron 1 med elektron 2. Betegner vi bølgefunktionen - der for nemheds skyld er valgt reel - med $\psi(x_1, x_2)$, fås altså $\psi^2(x_1, x_2) = \psi^2(x_2, x_1)$. Men dette betyder for selve bølgefunktionen, at den enten er uændret eller skifter fortegn under denne ombytning. Det gælder altså, at enten er $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$ eller også er $\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$. Symmetrioperatoren P_{12}, der betegnes som ombytnings- eller permutationsoperatoren, er defineret ved

$$P_{12}\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1). \tag{1.17}$$

Vi konkluderer derfor, at egenværdierne af P_{12} er henholdsvis 1 og -1.

I tilfældet, hvor egenværdien er 1 og bølgefunktionen dermed uændret ved ombytningen af de to partikler, siger man, at partiklerne adlyder Bose-statistik. I det andet tilfælde, hvor egenværdien er -1 og bølgefunktionen skifter fortegn, siger man, at partiklerne adlyder Fermi-statistik. Den første slags partikler kaldes bosoner, den anden fermioner. Eksempler på bosoner er α-partikler eller lyskvanter. Partikler som elektroner, protoner eller neutroner er alle fermioner. Også kvarker er fermioner. En bølgefunktion for tre identiske kvarker skal altså tilfredsstille det symmetrikrav, at en ombytning af to af kvarkerne får bølgefunktionen til at skifte fortegn.

I de følgende kapitler skal vi diskutere eksempler, hvori partiklernes statistik spiller en afgørende rolle. F. eks. er opbygningen af det periodiske system betinget af, at elektroner er fermioner. Fænomener som superfluiditet og superledning (kapitel 10) ville være uforståelige uden at den særlige symmetri, der karakteriserer ombytning af identiske partikler, blev taget i betragtning.

1.5 Dimensioner og naturkonstanter

I dette afsnit skal vi vende tilbage til diskussionen af, hvorledes naturkonstanterne giver anledning til eksistensen af karakteristiske længder, tider og energier, der ikke optræder i den klassiske fysik. Mens vi i afsnit 1.2 gættede på udtrykket (1.2) for den karakteristiske længde i et brintatom, vil vi i det følgende bestemme de karakteristiske længder, tider og energier ved dimensionsanalyse. Som vi skal se, er resultatet af en dimensionsanalyse ikke nødvendigvis entydigt, afhængigt af antallet af fysiske konstanter, der tages i betragtning. Alligevel er dimensionsanalyse et nyttigt hjælpemiddel til vurdering af størrelsesordener og til kontrol af resultatet af en egentlig beregning. I det følgende skal vi anvende dimensionsanalyse til at vurdere størrelsen af brintatomet og de karakteristiske energiforskelle, der giver anledning til udsendelse af elektromagnetisk stråling, med udgangspunkt i Plancks konstant $\hbar$, lyshastigheden c, elektronens masse m og elementarladningen e.

1.5.1 Brintatomet

Et brintatom består af en positivt ladet kerne, en proton, omgivet af en negativt ladet elektron. Som et omtrentligt mål for atomets størrelse kan vi tage afstanden mellem de to brintkerner i brintmolekylet. Denne er ca. 10^{-10} m . I brintatomet tiltrækker den positivt ladede kerne elektronen med en kraft beskrevet ved den potentielle energi $V(r)$ givet ved

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \tag{1.18}$$

hvor ϵ_0 er permittiviteten af vakuum, og r angiver afstanden fra brintkernen til elektronen. For at undgå at størrelsen $4\pi\epsilon_0$ optræder i de følgende formler er det som i afsnit 1.2 bekvemt at indføre e_0 ved definitionen

$$e_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}. \tag{1.19}$$

Da V har dimension af energi, er dimensionen af e_0^2 åbenbart energi gange med længde.

Den følgende dimensionsanalyse tager udgangspunkt i konstanterne e_0, $\hbar$ og m. Senere vil lyshastigheden blive inddraget. For at bestemme hvorledes e_0, $\hbar$ og m kan kombineres til en længde dannes udtrykket

$$e_0^x m^y \hbar^z \tag{1.20}$$

og de ubekendte eksponenter x, y og z fastlægges ud fra kravet om, at (1.20) er en længde. Idet A angiver en vilkårlig fysisk størrelse, indføres betegnelsen dim$A$ for dens dimension. Hvis dimensionen af masse, længde og tid angives ved henholdsvis M, L og T, kan dim$A$ udtrykkes som

$$\dim A = M^{\alpha} L^{\beta} T^{\gamma}, \tag{1.21}$$

hvor α, β og γ er bestemte eksponenter. For de indgående konstanter haves

$$\dim \hbar = M L^2 T^{-1} \tag{1.22}$$

samt

$$\dim e_0 = M^{1/2} L^{3/2} T^{-1} \tag{1.23}$$

og

$$\dim m = M. \tag{1.24}$$

Da (1.20) skal være en længde, kan de ubekendte eksponenter bestemmes af

$$\dim e_0^x m^y \hbar^z = M^{x/2} L^{3x/2} T^{-x} M^y M^z L^{2z} T^{-z} = L, \tag{1.25}$$

der resulterer i de tre ligninger

$$x + z = 0 \tag{1.26}$$

samt

$$\frac{x}{2} + y + z = 0 \tag{1.27}$$

og

$$\frac{3x}{2} + 2z = 1. \tag{1.28}$$

Det ses umiddelbart, at løsningen til ligningerne (1.26-28) er

$$x = -2, y = -1, z = 2. \tag{1.29}$$

Herved bliver den karakteristiske længde (1.20), der kaldes Bohr-radius og betegnes ved a_0, givet ved udtrykket

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e_0^2}. \tag{1.30}$$

Bestemmelsen af en karakteristisk energi foregår på ganske tilsvarende måde, idet højresiden af (1.25) blot erstattes med dimensionen af energi, der er ML^2T^{-2} . Dette resulterer i løsningen $x = 4, y = 1, z = -2$ og dermed den karakteristiske energi E_0 givet ved

$$E_0 = \frac{me_0^4}{\hbar^2}. \tag{1.31}$$

Da brintatomet er stabilt, må elektronen have en positiv bindingsenergi forstået på den måde, at der skal tilføres energi for at fjerne elektronen fra kernen. Bindingsenergien må altså forventes at være givet ved (1.31) på nær en numerisk konstant.

Det er værd at bemærke, at dimensionsudtrykkene (1.30) og (1.31) er entydige. Ud fra konstanterne e_0, $\hbar$ og m kan der dannes én og kun én længde eller energi. Den tilhørende tid fremkommer ved at dividere $\hbar$ med E_0 . Naturligvis kan man ikke med denne metode bestemme størrelsen af en eventuel numerisk konstant foran (1.30-31), men erfaringen viser, at sådanne konstanter sædvanligvis er af størrelsesordenen 1.

Indsættes nu værdierne for de fysiske konstanter fås

$$a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} \tag{1.32}$$

og

$$E_0 = 27,2\,\mathrm{eV}. \tag{1.33}$$

Som vi allerede har set i (1.11), er bindingsenergien for brintatomet kun halvt så stor som (1.31), men det er opmuntrende, at den enkle dimensionsanalyse giver resultater, der er tæt på de eksperimentelle. Resultatet (1.31) giver ingen detaljeret oplysning om brintspektrets udseende, d.v.s. bølgelængderne af den elektromagnetiske stråling, der udsendes ved forskellige overgange, men det er i overensstemmelse med, at der udsendes elektromagnetisk stråling, hvis angulære frekvens ω er af størrelsesordenen $E_0/\hbar$ svarende til bølgelængder af størrelsesordenen 10^{-8} m.

Hvis vi også tager lyshastigheden c med blandt de fysiske konstanter, er resultatet af dimensionsanalysen ikke længere entydigt. F. eks. er mc^2 en energi, nemlig elektronens hvileenergi. Forholdet mellem E_0 givet ved (1.31) og elektronens hvileenergi er åbenbart

$$\frac{E_0}{mc^2} = \alpha^2, \tag{1.34}$$

hvor vi har indført den dimensionsløse konstant α ved definitionen

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,036}. \tag{1.35}$$

Konstanten α kaldes finstrukturkonstanten. Navnet skyldes, at den indgår i de små korrektioner til spektrallinjerne hidrørende fra relativistiske effekter, der forklarer disse linjers finstruktur. Bemærk, at α ifølge (1.35) er forholdet mellem hastigheden $\sqrt{E_0/m}$ og lyshastigheden.

At α er et mål for relativistiske effekter fremgår af det relativistiske udtryk for en fri partikels energi,

$$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}, \tag{1.36}$$

hvor p er partiklens impuls. For lave hastigheder kan (1.36) rækkeudvikles i forholdet p^2/m^2c^2,

$$E = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \cdots \tag{1.37}$$

Her vil det tredje led i denne rækkeudvikling give bidrag til finstrukturen. Dette kan indses ved at bruge resultater fra den klassiske mekanik. Hvis en partikel med masse m bevæger sig i en cirkelbane med radius r under indflydelse af Coulombpotentialet $-e_0^2/r$, gælder det, at

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e_0^2}{r^2}, \tag{1.38}$$

idet v er partiklens konstante hastighed. Det ses af (1.38), at den kinetiske energi $mv^2/2$ på nær fortegnet er halvt så stor som den potentielle energi, der er $-e_0^2/r$. Bindingsenergien $e_0^2/2r$ er derfor lig med den kinetiske energi. Det andet led i (1.37) er netop den kinetiske energi af en urelativistisk partikel, hvis hastighed er $v = p/m$, mens bidraget fra det tredje led åbenbart er α^2 gange bidraget fra det andet, der er af størrelsesordenen e_0^2/a_0. Den omtalte korrektion er imidlertid ikke den eneste relativistiske effekt. Som vi siden skal se, er det en følge af relativitetsteorien, at en elektron opfører sig, som om den har et indre impulsmoment, kaldet spin. I det følgende skal vi kort omtale partiklens baneimpulsmoment og dets påvirkning af ydre felter.

1.5.2 Impulsmoment

Ifølge den klassiske fysik har en partikel, der bevæger sig i en cirkelbane med radius r et impulsmoment L, hvis størrelse er givet ved

$$L = mrv, \tag{1.39}$$

hvor m er partiklens masse og v dens hastighed. Dimensionen af Plancks konstant er åbenbart den samme som dimensionen af impulsmoment. Vi skal i kapitel 7 se, hvorledes en komposant af impulsmomentet ifølge kvanteteorien kun kan antage værdier, der er et hel- eller halvtalligt multiplum af $\hbar$. Et hvilket som helst impulsmoment kan naturligvis udtrykkes i enheder af $\hbar$. Hvis impulsmomentet i jordens bane omkring solen udtrykkes i enheder af $\hbar$, bliver resultatet, at dette er ca. 10^{74} gange $\hbar$. Et sådant resultat afspejler, at kvantemekanikken er uden betydning for beregning af planetbanerne. Derimod er impulsmomentkvantiseringen af afgørende betydning for at forstå atomers og molekylers egenskaber.

En ladet partikel, f. eks. en elektron, der bevæger sig i en cirkel, kan opfattes som en strømkreds, der giver anledning til et magnetfelt. Strømmen er den ladning, der i løbet af en tidsenhed bevæger sig igennem en plan vinkelret på elektronens bane. Idet ν er elektronens omløbsfrekvens, der er lig med $\nu = v/2\pi r$, bliver strømstyrken I givet ved

$$I = e\nu. \tag{1.40}$$

Arealet A af strømkredsen, $A = \pi r^2$, gange strømstyrken I kaldes det magnetiske moment M. I elektricitetslæren vises det, at magnetfeltet hidrørende fra strømkredsen er proportionalt med M i store afstande fra strømkredsen.

Danner vi nu forholdet mellem det magnetiske moment og impulsmomentet i partiklens bane, ses resultatet at blive uafhængigt af banens radius, nemlig

$$\frac{M}{L} = \frac{e(v/2\pi r)\pi r^2}{mrv} = \frac{e}{2m}. \tag{1.41}$$

Man kalder dette forhold for det gyromagnetiske forhold. Dets værdi (1.41) er udledt på basis af den klassiske fysik. Hvis partiklens impulsmoment hidrører fra den indre bevægelse, vi har kaldt spin, bliver det gyromagnetiske forhold ikke længere givet ved (1.41). Da forholdet skal have dimension af ladning divideret med masse, må det for en elektron med ladning $-e$

og masse m være givet ved (1.41) gange en numerisk konstant, der kaldes for g-faktoren og betegnes med g. For en elektron er $g = 2$ (på nær en korrektion, der er af størrelsesordenen α), forudsat at impulsmomentet udelukkende hidrører fra elektronens spin.

Hvis en ladet partikel bevæger sig i et konstant magnetfelt med fluxtæthed B, vil bevægelsen vinkelret på magnetfeltets retning være cirkelformet. Dette skyldes, at kraften hidrørende fra magnetfeltet står vinkelret på såvel dette som på partiklens hastighed. Omløbsfrekvensen afhænger kun af e, m og B . Hvis vi ganger forholdet e/m med B, fås en størrelse, der har dimension af frekvens. Ved hjælp af dimensionsanalyse kan vi se, at det - på nær en numerisk konstant - er den eneste frekvens, der kan dannes ud fra de opgivne tre størrelser. Man kalder denne frekvens for cyklotronfrekvensen ω_c, og vi skal i kapitel 6 vise, at den klassiske omløbsfrekvens netop er lig med $\omega_c = eB/m$. Ganger vi denne frekvens med Plancks konstant $\hbar$, fremkommer en energi, der er den karakteristiske energi for bevægelse i et homogent magnetfelt. Vi bemærker desuden, at $\hbar/e$ har dimension af magnetisk flux, hvorved $\hbar/eB$ bliver kvadratet på en længde.

Når vi har forelagt konstanterne $\hbar$, e, ϵ_0, m og B, er det muligt at danne ikke blot energien $\hbar\omega_c$, men også energien e_0^2/a_0. Sålænge vi ser bort fra frastødningen mellem elektroner indbyrdes (eller tiltrækningen fra positivt ladede kerner), har energien e_0^2/a_0 imidlertid ingen fysisk interesse. Dette eksempel illustrerer betydningen af at benytte dimensionsanalyse sammen med fysiske argumenter. Som et andet eksempel på dette skal vi nedenfor diskutere molekylspektre og se, hvorledes forholdet mellem elektronens masse og kernens masse indgår på en måde, der kan fastlægges ved en kombination af fysiske argumenter og dimensionsanalyse.

1.5.3 Harmonisk oscillator

I det følgende kapitel vil vi behandle bevægelsen af en partikel i et harmonisk oscillatorpotential givet ved den potentielle energi

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2, \tag{1.42}$$

hvor K er en positiv konstant, den såkaldte kraftkonstant, der indgår i Hookes lov. Idet partiklens masse betegnes med M, ser man straks, at det ikke er muligt ud fra K og M alene at

danne en karakteristisk længde eller energi. Dette svarer godt til vores viden om den klassiske harmoniske oscillator: det maksimale udsving fra ligevægtsstillingen kan antage en hvilken som helst værdi, afhængigt af begyndelsesbetingelserne. Der eksisterer ingen karakteristisk længde for den klassiske bevægelse, lige så lidt som der eksisterer nogen karakteristisk energi. Hvis vi nu foruden K og M inddrager Plancks konstant, bliver det muligt at danne såvel en karakteristisk længde som en karakteristisk energi. Da den klassiske angulære frekvens ω er lig med $\sqrt{K/M}$, ses den karakteristiske energi umiddelbart at være givet ved

$$\hbar\sqrt{\frac{K}{M}}. \tag{1.43}$$

Ved at gentage argumentationen, der fører til (1.30), fås den karakteristiske længde

$$\sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}, \tag{1.44}$$

hvor

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{M}} \tag{1.45}$$

er den klassiske svingningsfrekvens. I det følgende kapitel vil det blive vist, at de mulige energiværdier for den harmoniske oscillator er givet ved (1.43) gange $(n + \frac{1}{2})$, hvor n er et helt tal større end eller lig med nul. Herved bliver afstanden mellem energiniveauerne netop lig med (1.43). Et sådant resultat kan naturligvis ikke opnås ved dimensionsanalyse, der kun kan give oplysning om, at de mulige energiværdier er et dimensionsløst tal gange med (1.43). Havde vi i stedet antaget, at partiklen bevæger sig i et potential givet ved

$$V(x) = ax^4, \tag{1.46}$$

hvor a er en positiv konstant, ville den karakteristiske energi være givet ved

$$\sqrt[3]{\frac{a\hbar^4}{M^2}}, \tag{1.47}$$

som er den eneste energi, der kan dannes ud fra konstanterne a, $\hbar$ og M. I dette tilfælde er der ikke samme afstand mellem de mulige energiværdier, og (1.47) er derfor kun et omtrentligt skøn over afstanden mellem disse.

I afsnit 1.1.3 omtalte vi Rayleigh-Jeans loven for energitætheden $u_\nu(T)d\nu$ af den elektromagnetiske hulrumsstråling. Ifølge denne lov er $u_\nu(T)$ proportional med kvadratet på

frekvensen ν og med temperaturen T, $u_\nu(T) = 8\pi\nu^2 kT/c^3$. Vi kan nu se, at kombinationen $\nu^2 kT/c^3$ er den eneste størrelse med dimension af energitæthed divideret med en frekvens (svarende til $ML^{-1}T^{-1}$), der kan dannes ud fra kT, ν og lyshastigheden c. Derimod er Planckloven (1.1) ikke entydigt fastlagt ved en dimensionsbetragtning. Plancks konstant $\hbar$ gør det muligt at multiplicere Rayleigh-Jeans loven med en vilkårlig funktion af det dimensionsløse forhold $h\nu/kT$ uden at ændre dimensionen af $u_\nu(T)$.

For en partikel med masse M, der bevæger sig frit uden påvirkning af kræfter, kan vi ikke danne en karakteristisk længde, med mindre vi foruden Plancks konstant $\hbar$ også inddrager lyshastigheden c . Da Plancks konstant har dimension af impuls gange længde, ses størrelsen

$$\frac{\hbar}{Mc} \tag{1.48}$$

at være en længde. Længden (1.48) bestemmer rækkevidden af kernekræfterne, idet massen i dette tilfælde skal identificeres med en pions masse, der er ca. 300 gange så stor som massen af en elektron. Herved bliver (1.48) ca. 10^{-15} m. De elektromagnetiske kræfter, der giver anledning til den potentielle energi (1.18), kan opfattes som hidrørende fra udveksling af et lyskvantum mellem ladede partikler, på samme måde som kernekræfterne skyldes udveksling af en pion mellem nukleoner, der er fællesbetegnelsen for protoner og neutroner. Et lyskvantum har imidlertid ingen masse, og de elektromagnetiske kræfters rækkevidde er derfor uendelig, svarende til at den potentielle energi (1.18) ikke indeholder nogen karakteristisk længde.

Den såkaldte svage vekselvirkning indgår f. eks. i neutronens henfald. Som tidligere nævnt er middellevetiden af en frit bevægelig neutron 15 minutter. Eksistensen af vektorbosoner, der formidler den svage vekselvirkning, blev påvist eksperimentelt i 1983 på det europæiske kerneforskningscenter CERN. Der er fundet tre vektorbosoner, W_+, W_- og Z_0, hvis masser er mellem 80 og 90 GeV/c^2. Der er altså tale om partikler, der er flere hundrede gange tungere end pionen, og vekselvirkningens rækkevidde $\hbar/Mc$ er derfor tilsvarende kortere.

1.5.4 Molekylspektre

I det foregående har vi på basis af dimensionsanalyse argumenteret for, at atomernes karakteristiske energier involverer (1.31), når vi ser bort fra finstruktur, der er kendetegnet ved

energier af størrelsesordenen α^2 gange (1.31), og virkningen af ydre magnetfelter, der kan forventes at give anledning til energiforskelle af størrelsesordenen $\hbar eB/m$. Tilsvarende energier må karakterisere molekyler, men for disse gælder desuden, at atomkernerne kan vibrere i forhold til hinanden, og at molekylet kan rotere som et stift legeme. De to bevægelsesformer, vibration og rotation, er hver for sig karakteriseret ved en energi, som vi nu skal forsøge at bestemme. Det er rimeligt at gætte på, at disse energier foruden (1.31) involverer forholdet m/M, hvor m er elektronmassen og M er en kernemasse. For simpelheds skyld vil vi i det følgende betragte brintmolekylet, for hvilket de to kernemasser er lig protonens masse, så at m/M er 1/1836. For mere komplicerede molekyler er forholdet endnu mindre.

Det er nu klart, at vi kan danne alle mulige energier ud fra (1.31) og m/M, f. eks ved at opløfte sidstnævnte til en eller anden, ikke nødvendigvis heltallig, potens. Det er derfor nødvendigt at supplere dimensionsanalysen med fysiske argumenter. Lad os først betragte vibration, der for små udsving må kunne betragtes som en harmonisk svingning. For en harmonisk oscillator er den karakteristiske energi givet ved (1.43). I dette udtryk må M skulle identificeres med protonmassen, mens kraftkonstanten K kan bestemmes ved følgende betragtning. Hvis ændringen af de to protoners indbyrdes afstand under svingningen bliver af størrelsesordenen a_0 , må den potentielle energi øges med et beløb, der er af størrelsesordenen (1.31). Heraf følger, at kraftkonstanten K er af størrelsesordenen E_0/a_0^2, og den karakteristiske energi er derfor

$$\hbar\sqrt{\frac{E_0}{Ma_0^2}} = \sqrt{\frac{m}{M}}E_0 = \frac{m^{3/2}e_0^4}{M^{1/2}\hbar^2}. \tag{1.49}$$

Bevægelsen af de to brintkerner relativt til hinanden giver derfor anledning til spektrallinjer, hvis bølgelængde er ca. $50-100$ gange større end dem, der svarer til de såkaldte elektroniske overgange, for hvilke den karakteristiske energi er af størrelsesordenen (1.31).

Rotationen af brintmolekylet er kendetegnet ved endnu lavere energier. Inertimomentet af molekylet er omtrentligt givet ved Ma_0^2, da afstanden mellem brintkernerne er af samme størrelsesorden som Bohr-radius. Impulsmomentet for molekylet som helhed kan antages at være et multiplum af $\hbar$. Den kinetiske energi, der er knyttet til rotationen, er kvadratet på impulsmomentet divideret med (to gange) inertimomentet svarende til en karakteristisk

energi af størrelsesordenen

$$\frac{\hbar^2}{Ma_0^2} = \frac{m}{M}E_0 = \frac{m^2e_0^4}{M\hbar^2}. \tag{1.50}$$

Det ses heraf, at de karakteristiske energier, der giver anledning til molekylernes rotationsspektre, er endnu mindre end vibrationsenergierne, svarende til faktoren $\sqrt{m/M}$, der også angiver forholdet mellem vibrationsenergierne og energierne svarende til de elektroniske overgange, jvf. (1.49). Denne vurdering af størrelsen af energierne er i kvalitativ overensstemmelse med detaljerede kvanteteoretiske beregninger og eksperimentelle iagttagelser. En nøjere sammenligning af kvanteteoriens forudsigelser med de iagttagne spektre kræver naturligvis et andet grundlag end det, der er givet her. Formålet med disse betragtninger er blot at illustrerere såvel rækkevidden som begrænsningen af dimensionsanalysen.

1.5.5 Gravitation

Indtil nu har vi primært baseret diskussionen af de forskellige karakteristiske længder, tider og energier på Coulombs lov (1.18). Som afslutning på dette afsnit skal vi se, hvilke karakteristiske størrelser der kan dannes ud fra Plancks konstant $\hbar$, gravitationskonstanten G og lyshastigheden c.

Metoden er den samme som angivet ovenfor, idet vi danner størrelsen

$$\hbar^x G^y c^z \tag{1.51}$$

og spørger, hvilke værdier eksponenterne x, y og z skal antage for at (1.51) bliver henholdsvis en længde, en energi eller en tid. Det ses, at den eneste længde vi kan danne, er givet ved

$$\sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}}, \tag{1.52}$$

mens den tilsvarende energi er

$$\sqrt{\frac{\hbar c^5}{G}}. \tag{1.53}$$

Endelig fås den karakteristiske tid ved at dividere $\hbar$ med energien (1.53) med resultatet

$$\sqrt{\frac{\hbar G}{c^5}}. \tag{1.54}$$

Størrelsesordenen af disse resultater kan bestemmes ved at indsætte de fundamentale naturkonstanter. Det ses, at den karakteristiske længde er

$$10^{-35}\mathrm{m}, \tag{1.55}$$

mens den karakteristiske energi tilsvarende er

$$10^{28}\text{eV}. \tag{1.56}$$

Endelig er den karakteristiske tid

$$10^{-43}\text{s}. \tag{1.57}$$

Disse størrelser benævnes ofte Planck-længden, Planck-energien og Planck-tiden. Det ses, at Planck-energien er ca. 10^{15} gange så stor som de højeste energier, der kan opnås med eksisterende eller planlagte partikelacceleratorer.

I fysikken, som vi kender den i dag, forekommer der fire forskellige kræfter: elektromagnetiske kræfter, svage vekselvirkninger, kernekræfter (også kaldet stærke vekselvirkninger) og tyngdekræfter. Ved hjælp af kvanteteorien har man nået en vis enhed i beskrivelsen af de første tre, og i de seneste år er der fremsat teorier, der i princippet forener beskrivelsen af alle fire. Størrelsen af Planck-energien i forhold til de energier, der er til rådighed i laboratoriet, gør det imidlertid meget vanskeligt, måske umuligt, at efterprøve sådanne teorier eksperimentelt.

Selvom Planck-energien foreløbigt repræsenterer et utilgængeligt område for eksperimenter, der kan afprøve de omtalte teoriers gyldighed, kan der naturligvis godt være andre fysiske størrelser, hvori Planck-energien eller den tilsvarende Planck-masse $\sqrt{\hbar c/G}$ indgår. For den type stjerner, der betegnes som hvide dværge, kan det vises (kap. 9), at deres størst mulige masse er af størrelsesordenen Planck-massen i tredje divideret med nukleonmassen i anden, svarende til en masse, der er halvanden gange solens eller ca. 10^{30} kg.

1.6 Atomer og lys

Et isoleret atom er en abstraktion. Vi iagttager atomer ved deres udsendelse af lys. Ifølge Bohrs atommodel er de mulige energier af brintatomet givet ved $E_n = -A/n^2$, hvor A er en konstant og n et helt, positivt tal (jvf. ligning (1.11)). Hvis brintatomet befinder sig i en egentilstand for energien, svarende f. eks. til $n = 3$, vil en måling af dets energi med sikkerhed give resultatet E_3 eller $-A/9$. En sådan tilstand svarende til en bestemt energi kaldes for stationær. Ifølge kvantemekanikkens grundlæggende bevægelsesligning, Schrödingerligningen,

vil en tilstand, der til et bestemt tidspunkt er stationær, derefter forblive stationær. Hvis brintatomet til tiden $t = 0$ befinder sig i en tilstand med bestemt energi, f. eks. E_3, vil atomet således forblive i denne tilstand til alle senere tider.

Med dette udgangspunkt er det svært at forstå, hvorledes atomer kan udsende lys. I Bohrs atommodel indgik en antagelse om, at frekvensen ν af det udsendte lys var bestemt af energiforskellen mellem to stationære tilstande ifølge betingelsen

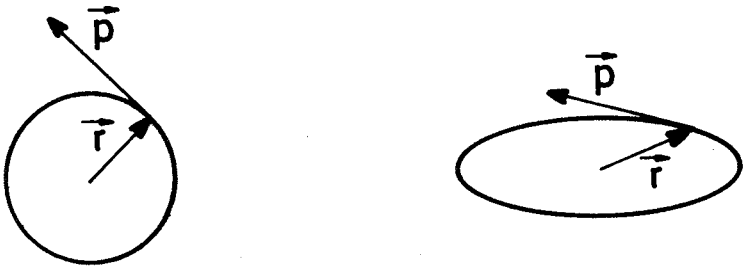
$$h\nu = E_n - E_m, \tag{1.58}$$

hvor n og m er hele, positive tal (det antages, at n er større end m, så energiforskellen $E_n - E_m$ er positiv). Ifølge Bohrs model 'hopper' elektronen fra én stationær tilstand til en anden med mindre energi, således at den overskydende energi bliver udsendt i form af et lyskvantum med energi $h\nu$.

Den tilsyneladende vanskelighed ved at forene begrebet stationær tilstand med udsendelsen af lys forsvinder, når man tager hensyn til, at elektronen i brintatomet foruden kraften fra den positivt ladede kerne også påvirkes af det elektromagnetiske felt. En foton (et lyskvantum) repræsenterer et elektromagnetisk felt, d.v.s. et elektrisk felt og et magnetfelt, der varierer i rum og tid. Da elektronen besidder en (negativ) elektrisk ladning, vil den også påvirkes af disse elektromagnetiske felter. Det er derfor nødvendigt at tage hensyn til det tidsligt varierende elektromagnetiske felt. Forstyrrelsen giver anledning til overgange mellem de stationære tilstande, der er beregnet ved at tage hensyn alene til den potentielle energi $-e_0^2/r$.

Beregningen af overgangssandsynligheden er relativt kompliceret selv for så simpelt et atom som brintatomet og kræver fuld brug af det kvantemekaniske værktøj. En dimensionsbetragtning er ikke tilstrækkelig, da der ud over energien $me_0^4/\hbar^2$, der ifølge (1.31) karakteriserer de stationære tilstande, også indgår den dimensionsløse konstant $\alpha = e_0^2/\hbar c$ i problemet[9]. Inden vi går nærmere ind på atomernes udsendelse og absorption af elektromagnetisk stråling,

[9]Man finder således, at middellevetiden τ af en tilstand hørende til det næstlaveste energiniveau ($n = 2$) i brintatomet på nær en numerisk konstant er givet ved $\hbar/\tau = \alpha^3 me_0^4/\hbar^2$. Dette svarer til en levetid, der er omkring 10^{-9} s eller omkring hundrede millioner gange længere end den karakteristiske tid t_0 defineret ved $\hbar/t_0 = me_0^4/\hbar^2$, idet $t_0 = 2{,}4 \cdot 10^{-17}$ s. Finstrukturkonstanten α er $1/137{,}036$, jvf. ligning (1.35).



Figur 1.11: Cirkel og ellipse

skal vi omtale nogle karakteristiske træk ved atomernes struktur og deres konsekvenser for grundstoffernes periodiske system.

1.6.1 Atomets struktur

Til bestemmelse af energierne i brintatomet benyttede vi i afsnit 1.3.3 en kvantiseringsbetingelse, der indebar, at elektronens impulsmoment var kvantiseret i enheder af $\hbar$, $L = n\hbar$. Som baggrund for at forstå grundstoffernes periodiske system skal vi i dette afsnit gå lidt mere ind på beskrivelsen af impulsmoment i kvantemekanikken.

For en partikel med masse m, der bevæger sig i en cirkelbane med radius r og hastighed v, er impulsmomentet L ifølge den klassiske fysik lig med $L = mrv$. Dimensionen af impulsmoment er åbenbart masse gange areal divideret med tid, og dets enhed er derfor kg m^2/s. Vi bemærker, at et impulsmoment har samme dimension som Plancks konstant.

Som baggrund for den følgende diskussion af atomets struktur vil vi først give en mere almen definition af det klassiske impulsmoment. Vi har ovenfor benyttet en cirkelbane med radius r som udgangspunkt for at indføre impulsmomentet. Hvordan defineres impulsmoment for en ellipseformet bane? I den klassiske fysik er størrelser som elektronens sted og hastighed i virkeligheden vektorer, d.v.s. forbundet med en retning. Dette er illustreret for en ellipsebane ved pilene i fig. 1.11. Til angivelse af elektronens sted $\vec{r}$ hører to koordinater (x, y), mens elektronens impuls $\vec{p}$ (der er proportional med hastigheden $\vec{v}$, idet $\vec{p} = m\vec{v}$) angives ved (p_x, p_y). Der er her benyttet det sædvanlige symbol for vektorer, $\vec{r}$ og $\vec{p}$. Ved bevægelse i en plan har vektorerne altså to komponenter, ved bevægelse i rummet tre. Lad os nu definere impulsmomentet L hørende til bevægelse i planen ved

$$L = xp_y - yp_x. \tag{1.59}$$

Hvis bevægelsen er cirkelformet, reduceres denne definition til den tidligere givne $L = rp$, hvor r og p angiver længden af vektorerne $\vec{r}$ og $\vec{p}$.

Ved bevægelse i tre dimensioner er tilsvarende $\vec{r} = (x, y, z)$ og $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$. Impulsmomentet $\vec{L}$ er selv en vektor med komponenter (L_x, L_y, L_z) givet ved

$$L_x = yp_z - zp_y;\ L_y = zp_x - xp_z;\ L_z = xp_y - yp_x. \tag{1.60}$$

Ifølge Newtons ligninger er impulsmomentet af en partikel konstant i tiden, hvis partiklen er påvirket af en kraft rettet mod koordinatsystemets begyndelsespunkt, (0,0,0). Dette er jo netop tilfældet for jordens bane om solen: tyngdekraften hidrørende fra solen peger mod solens centrum, der kan betragtes som værende i hvile, så længe solens masse kan regnes for at være meget større end jorden. Jordens impulsmoment er derfor uændret i tiden, selv om jordens hastighed skifter retning under omløbet.

Vi har i afsnit 1.4 set, at fysiske størrelser i kvantemekanikken er repræsenteret ved operatorer, der ikke nødvendigvis er indbyrdes ombyttelige. Således er stedkoordinaten x og den tilsvarende impulskoordinat p_x ikke ombyttelige, jvf. Heisenbergs usikkerhedsrelationer (afsnit 1.3.5). Dette medfører imidlertid, som man ser af (1.60), at det ikke er muligt samtidig at angive veldefinerede værdier af <u>både</u> x- og y-komponenten af impulsmomentet. Da L_x afhænger af z og L_y af p_z, er de to operatorer ikke indbyrdes ombyttelige[10], og det er derfor ikke muligt at bestemme tilstande, der svarer til en veldefineret værdi af begge komponenter. En tilstand, der er mærket som $|L_x, L_y, L_z\rangle$, giver derfor ingen mening i kvantemekanikken[11]. Derimod giver en tilstand mærket ved egenværdierne af impulsen, $|p_x, p_y, p_z\rangle$ god mening, da de tre komponenter af impulsen er indbyrdes ombyttelige.

Selv om L_x, L_y og L_z ikke er indbyrdes ombyttelige, kan man ved hjælp af resultatet fra fodnote 10 vise, at en vilkårlig af komponenterne, f. eks. L_z, er ombyttelig med længdekvadratet $\vec{L}^2$ defineret ved

$$\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2. \tag{1.61}$$

Det er derfor muligt at finde fælles egentilstande for $\vec{L}^2$ og L_z.

---

[10] I kapitel 7 vises det, at $L_xL_y - L_yL_x = i\hbar L_z$.

[11] Den eneste undtagelse er den, for hvilke alle tre egenværdier er nul.

Vi skal i kapitel 7 bestemme disse egentilstande og de tilhørende egenværdier. Foreløbig nøjes vi med at konstatere resultatet: egenværdierne for $\vec{L}^2$ er

$$l(l+1)\hbar^2,\ l=0,1,2\ldots, \tag{1.62}$$

mens egenværdierne for L_z er

$$m\hbar=-l\hbar,-(l-1)\hbar\ldots,(l-1)\hbar,l\hbar \tag{1.63}$$

for en given værdi af l. Åbenbart er der $(2l+1)$ forskellige værdier af m hørende til en given værdi af l (for $l=1$ ses (1.63) f. eks. at give de tre værdier $m=-1,0$ og 1).

Det er altså muligt at finde fysiske tilstande, som vi kan angive som $|lm\rangle$, for hvilke der er sikkerhed for at måle værdien $l(l+1)\hbar^2$ af impulsmomentets længdekvadrat og værdien $m\hbar$ af en af impulsmomentets komponenter. Som vi skal se i det følgende, er dette udgangspunktet for at forstå atomernes opbygning og det periodiske system.

Som nævnt er en partikels impulsmoment ifølge den klassiske fysik konstant i tiden, når bevægelsen foregår under påvirkning af en kraft, der er rettet mod et fast punkt i rummet. Man siger da, at bevægelsen sker i et centralfelt. Den potentielle energi vil under disse omstændigheder alene afhænge af afstanden fra partiklen til det faste punkt. Hvis den potentielle energi er omvendt proportional med denne afstand (som for tyngdekraften eller den elektrostatiske kraft mellem to ladede partikler), gennemløber partiklen en ellipseformet bane i en bestemt plan. I kvantemekanikken giver det ikke mening at tale om partiklens bane, da dette indebærer, at det er muligt samtidig at fastlægge partiklens sted og impuls. Derimod er det ved bevægelse i et centralfelt muligt samtidig at angive bestemte værdier af partiklens energi, impulsmomentets længdekvadrat og én af impulsmomentets komponenter, da de tilhørende operatorer er indbyrdes ombyttelige.

Bevægelsen af elektronen i et brintatom er netop en bevægelse i et centralfelt, idet kraften hidrørende fra den positivt ladede kerne er rettet mod denne[12]. Ved at løse den kvantemekaniske bevægelsesligning, Schrödingerligningen, finder man de samme energiværdier E_n som i Bohr-modellen, jvf. ligning (1.11). Imidlertid er der flere forskellige fysiske tilstande

[12]Da kernens masse er så meget større end elektronens, kan man se bort fra kernens medbevægelse og opfatte denne som værende anbragt i et fast punkt i rummet.

svarende til samme energiværdi. Man finder således, at der til en bestemt energiværdi E_n hører værdierne $0, 1, \ldots, (n-1)$ af det kvantetal l, der ifølge (1.62) bestemmer impulsmomentets længdekvadrat. En given værdi af n, f. eks. $n = 3$, rummer altså tilstande, hvori l er 0, 1 og 2. Da der hører én m-værdi til $l = 0$, tre m-værdier ($m = -1, 0, 1$) til $l = 1$ og fem m-værdier ($m = -2, -1, 0, 1, 2$) til $l = 2$, er der knyttet i alt $1 + 3 + 5 = 9$ eller 3^2 forskellige tilstande til niveauet med $n = 3$. Ved at foretage denne optælling for et vilkårligt n, finder man, at der er knyttet n^2 forskellige tilstande til en bestemt værdi af n. Tager man nu ydermere hensyn til, at elektronen har et indre impulsmoment, der betegnes som spin[13], er det ikke længere tilstrækkeligt at angive tilstandene ved de tre kvantetal n, l og m. Man må yderligere angive værdien af det kvantetal m_s, der bestemmer de mulige værdier (egenværdierne) af en af spinnets komponenter. Disse egenværdier er $m_s\hbar$, hvor kvantetallet m_s kan antage værdierne $1/2$ og $-1/2$.

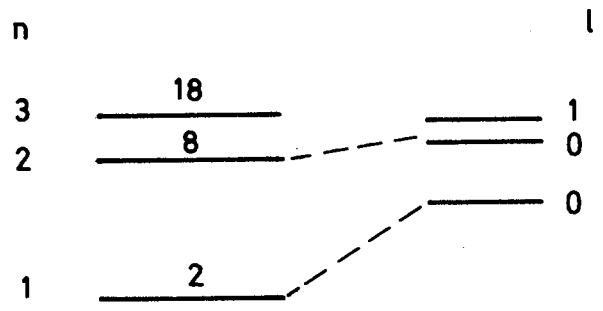
Vi kan nu sammenfatte ovenstående: ved bevægelsen af en elektron i et Coulombpotential svarende til den potentielle energi $-Ze_0^2/r$, hvor Ze er kerneladningen ($Z = 1$ for brintatomet), er energierne givet ved[14]

$$E_n = -\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2n^2}, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{1.64}$$

Dette resultat er i overensstemmelse med (1.11), da vi blot har erstattet konstanten e_0^2 med konstanten Ze_0^2. Til hvert n hører der $2n^2$ forskellige tilstande, der angives som $|nlmm_s\rangle$. På fig. 1.12 har vi tegnet energiniveauer hørende til et bestemt n og for hver af dem angivet, hvor mange elektroner (nemlig $2n^2$), der kan anbringes i det pågældende niveau. Desuden har vi i fig. 1.12 vist, hvad der sker, når man tager hensyn til, at elektronerne også frastøder hinanden indbyrdes. Herved forskydes energien af de tilstande, der før hørte til samme E_n, afhængigt af værdien af kvantetallet l. Til hvert sæt af kvantetal (n, l) hører der nu en bestemt energiværdi. Det periodiske system fremkommer ved gradvis opfyldning af disse energiniveauer, under hensyntagen til at elektroner er fermioner, så at der kun må anbringes én i hver (énpartikel)kvantetilstand. Atomer med 2 og 10 (=2+8) elektroner svarer til særligt

[13]Den engelske fysiker P.A.M. Dirac (1902-1984) viste i 1928, at forekomsten af spin var en konsekvens af kravet om, at kvanteteorien skal være relativistisk invariant, se afsnittene 1.7.5 og 7.5.

[14]Der er her set bort fra de mulige positive energier, der svarer til, at elektronen ikke bundet til kernen, men bevæger sig frit i rummet.



Figur 1.12: Energiniveauer i et centralfelt

stabile konfigurationer, idet disse svarer til, at energiniveauerne hørende til henholdsvis $n = 1$ og $n = 1, 2$ er fyldt helt op. De pågældende atomer helium og neon er begge ædelgasser, der netop kaldes sådan, fordi de har meget lidt tilbøjelighed til at indgå i reaktioner med andre grundstoffer, d.v.s. de er på grund af elektronkonfigurationen særligt stabile. Grundstoffet argon, der har $2 + 8 + 8 = 18$ elektroner, fremkommer ved, at niveauerne hørende til $(n, l) = (1, 0), (2, 0), (2, 1), (3, 0)$ og $(3, 1)$ er fyldt helt op, mens $(3, 2)$ niveauet er tomt. Gennemgår man således det periodiske system, ser man hvorledes periodiciteteten kan forklares simpelt ud fra kvantetallene n, l, m og m_s og opfyldningen af de tilhørende energiniveauer. En detaljeret behandling af atomernes struktur kræver, at der tages hensyn til, at elektronerne både mærker den tiltrækkende kraft fra den positivt ladede atomkerne og frastødningen hidrørende fra de øvrige elektroner. Formålet med ovenstående betragtninger er blot at vise, hvorledes de vigtigste træk i grundstoffernes periodiske system kan føres tilbage til kvantetallene n, l, m og m_s for en enkelt elektrons bevægelse. Det bør understreges, at det kun er med tilnærmelse, at vi kan angive et atoms tilstand ved at anføre de enkeltpartikel-tilstande, der er besat. Selv for det næstsimpleste atom, He-atomet, er dette en relativt grov tilnærmelse, der må forbedres, for at man kan gøre rede for de observerede spektrallinjer. For den negativt ladede ion H^- er tilnærmelsen så dårlig, at man på basis af denne ikke engang kan forklare, at H^--ionen er stabil (jvf. eksempel 8).

1.6.2 Stof og stråling

Navnet Albert Einstein (1879-1955) er i den offentlige bevidsthed først og fremmest knyttet til relativitetsteorien, såvel den specielle fra 1905 som den almene fra årene 1911-16. Men

Figur 1.13: Emission og absorption

Einstein gav fundamentale bidrag til mange andre områder af fysikken. Hans arbejde fra 1905 vedrørende den fotoelektriske effekt, for hvilket han modtog Nobelprisen i 1921, og hans arbejde fra 1916 om ligevægten mellem stof og stråling er to eksempler på disse.

Ud fra simple argumenter for ligevægten mellem stof og stråling lykkedes det Einstein i 1916 at knytte en forbindelse mellem atomernes udsendelse (emission) og absorption af lys. I det følgende skal vi gengive Einsteins argumenter og vise deres betydning for forståelsen af laserens virkemåde.

Vi betragter et hulrum, der foruden en bestemt slags atomer indeholder stråling, der er i ligevægt, karakteriseret ved temperaturen T. Idet E_a og E_b angiver energierne af to forskellige atomare niveauer (se fig. 1.13), definerer vi frekvensen ν_{ba} ved

$$\nu_{ba} = \frac{E_b - E_a}{h}, \tag{1.65}$$

idet vi antager, at E_b er større end E_a. I afsnit 1.1.3 indførte vi tæthedsfunktionen u_ν for at beskrive, hvorledes strålingsenergien i ligevægt er fordelt på alle mulige frekvenser. Når vi undersøger sandsynligheden for, at der sker overgange mellem de to niveauer a og b ved absorption eller emission af lys, får vi brug for $u_{\nu_{ba}}$, der er et mål for strålingens intensitet ved den pågældende frekvens. Antallet af atomer, der i løbet af en tidsenhed (et sekund) går fra tilstand a til tilstand b under absorption af stråling må være proportionalt med det samlede antal atomer N_a i tilstand a og tæthedsfunktionen $u_{\nu_{ba}}$ og kan følgelig skrives som

$$B_{ba} N_a u_{\nu_{ba}}. \tag{1.66}$$

Konstanten B_{ba} kaldes for Einstein-koefficienten for absorption.

Går vi nu over til at se på emission, må det tilsvarende gælde, at antallet af atomer, der i løbet af en tidsenhed (et sekund) går fra tilstand b til tilstand a under emission af stråling er givet ved et udtryk af formen

$$A_{ab}N_b + B_{ab}N_b u_{\nu_{ba}}. \tag{1.67}$$

Her har det sidste led i (1.67) nøjagtig samme form som (1.66), blot indgår antallet N_b af atomer i tilstand b. Konstanten B_{ab} kaldes for Einstein-koefficienten for stimuleret emission. Det første led i (1.67) tager højde for muligheden for spontan emission, der ikke afhænger af intensiteten af den elektromagnetiske stråling, og konstanten A_{ab} betegnes derfor som Einstein-koefficienten for spontan emission. Vi skal nu se, hvorledes betingelsen for, at atomerne er i ligevægt med strålingen, knytter en forbindelse mellem de tre Einstein-koefficenter.

I ligevægt må der per tidsenhed være lige så mange overgange fra a til b som fra b til a. Med andre ord, de to udtryk (1.66) og (1.67) er lige store i ligevægt,

$$B_{ba}N_a u_{\nu_{ba}} = A_{ab}N_b + B_{ab}N_b u_{\nu_{ba}}. \tag{1.68}$$

For at finde sammenhængen mellem de tre Einstein-koefficienter er det nødvendigt at kende forholdet N_b/N_a. Når systemet - som vi har antaget - befinder sig i termisk ligevægt, er forholdet N_b/N_a bestemt alene af temperaturen og mindre end 1, da de højere energiniveauer i ligevægt er mindre befolkede end de lavere. Dette fremgår allerede af hastighedsfordelingen, idet denne er bestemt af faktoren

$$e^{-Mv^2/2kT}, \tag{1.69}$$

der afhænger eksponentielt af forholdet mellem den kinetiske energi $Mv^2/2$ af et molekyle og energien kT. Denne karakteristiske eksponentielle afhængighed af energien gælder alment for systemer, der befinder sig i ligevægt og har en bestemt temperatur[15]. I ligevægt vil forholdet mellem antallet N_b og N_a derfor være givet ved

$$\frac{N_b}{N_a} = \frac{e^{-E_b/kT}}{e^{-E_a/kT}} = e^{-h\nu_{ba}/kT}, \tag{1.70}$$

sålænge det antages, at der kun hører én tilstand til hvert af de betragtede energiniveauer.

[15]I den statistiske mekanik betegnes denne fordeling som Gibbs-fordelingen.

Ved hjælp af (1.68) og (1.70) kan tæthedsfunktionen $u_{\nu_{ba}}$ nu udtrykkes ved Einstein-koefficienterne og temperaturen. Ved at løse ligningen (1.68) for $u_{\nu_{ba}}$ og indsætte (1.70) fås

$$u_{\nu_{ba}} = \frac{A_{ab}}{B_{ba}e^{h\nu_{ba}/kT} - B_{ab}}. \tag{1.71}$$

Vi kan nu sammenligne (1.71) med Plancks strålingsformel i ligning (1.1). Da de to udtryk skal stemme overens, må der være bestemte relationer mellem Einstein-koefficienterne, nemlig

$$B_{ba} = B_{ab} \tag{1.72}$$

og

$$A_{ab} = B_{ab}\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}. \tag{1.73}$$

Der er altså en nøje sammenhæng mellem emissions- og absorptionsprocesser. Sandsynligheden for spontan emission kan derfor bestemmes ved at beregne sandsynligheden for absorption og udnytte (1.72-73). Som et vigtigt eksempel på betydningen af denne sammenhæng skal vi til slut omtale laseren og dens virkemåde.

Sammenhængen mellem stimuleret emission og absorption ligger til grund for laseren og dens mange praktiske anvendelser. Lad os antage, at elektromagnetisk stråling med frekvens ν går igennem et materiale, hvori der befinder sig atomer med energiniveauer E_a og E_b. Hvis det gælder, at $\nu = (E_b - E_a)/h$ (idet det antages, at E_b er større end E_a) vil det være muligt at opnå, at strålingen forstærkes, forudsat at antallet N_b af atomer med energi E_b er <u>større</u> end antallet N_a af atomer med energi E_a (i ligevægt er det, som vi har set ovenfor, mindre). Hvis vi ser bort fra muligheden for spontan emission (der jo ikke afhænger af strålingens intensitet), er ændringen af energitætheden for den elektromagnetiske stråling hidrørende fra absorption per tidsenhed (sekund) givet ved

$$-h\nu N_a W_{ba}, \tag{1.74}$$

hvor N_a er antallet af atomer med energien E_b i et enhedsvolumen, mens W_{ba} er antallet af overgange fra det nederste niveau til det øverste per tidsenhed (sekund) for et enkelt atom. Tilsvarende fås, at ændringen af energitætheden hidrørende fra (stimuleret) emission per tidsenhed er givet ved

$$h\nu N_b W_{ab}. \tag{1.75}$$

Da $W_{ab} = W_{ba}$ ifølge argumenterne ovenfor, ser vi ved addition af de to bidrag (1.74) og (1.75), at strålingen bliver forstærket, hvis der er tale om 'omvendt befolkning', svarende til at N_b er større end N_a. På denne måde fremkommer det karakteristiske laserlys, men som det fremgår af ovenstående, er det ikke blot synligt lys, der kan forstærkes på denne måde. Det samme gælder infrarød stråling eller mikrobølgestråling (*maser* står for microwave amplification by stimulated emission of radiation, mens *laser* tilsvarende står for light amplification by stimulated emission of radiation. Ammoniak-maseren er diskuteret i eksempel 9). Fordelen ved at benytte laserlys ligger i, at den omtalte forstærkning resulterer i *kohærent* lys, d.v.s. elektromagnetiske felter, der ikke blot svinger med samme frekvens, men også indbyrdes er i fase.

1.7 Partikler og bølger

Samspillet mellem begreberne bølge og partikel har præget kvanteteoriens udvikling siden århundredets begyndelse. I 1905 fremsatte Einstein sin teori for den fotoelektriske effekt. Einsteins teori knyttede partikler - de såkaldte fotoner - med energi $h\nu$ og impuls h/λ til elektromagnetisk stråling med frekvens ν og bølgelængde λ. Dermed kunne Einstein forklare eksistensen af en tærskelværdi ν_m for frekvensen af den elektromagnetiske stråling, der kan løsrive elektroner fra et metals overflade. I 1923 foreslog Louis de Broglie det omvendte - at der til en partikel med impuls p skal knyttes en bølge med bølgelængde $\lambda = h/p$.

Allerede i årene 1828-1837 havde William Hamilton (1805-65) bemærket den formelle lighed mellem beskrivelsen af en lysstråle i optikken og bevægelsen af en partikel i den klassiske mekanik. Fermat havde i 1657 indført princippet om 'den travle lysstråle': hvis en lysstråle bevæger sig mellem to punkter A og B i et medium, hvor brydningsforholdet $n = n(x, y, z)$ er en funktion af de rumlige koordinater, vil strålens vej mellem de to punkter være bestemt ved, at gennemløbstiden skal være mindst mulig. Idet strålens fasehastighed[16] er $u = c/n$, er gennemløbstiden for stykket ds lig med ds/u. Da $u = \nu\lambda$, hvor λ er bølgelængden, er gennemløbstiden derfor givet ved linjeintegralet

$$I = \frac{1}{\nu}\int_A^B \frac{ds}{\lambda}. \tag{1.76}$$

[16]Begreberne fasehastighed og gruppehastighed er diskuteret i afsnit 1.7.4 nedenfor.

Minimumsbetingelsen $\delta I = 0$ bliver således

$$\delta \int_A^B ds \frac{1}{\lambda(x,y,z)} = 0, \tag{1.77}$$

idet δI angiver den ændring af integralets værdi, der fremkommer ved en vilkårlig infinitesimal ændring af integrationsvejen mellem A og B.

Et tilsvarende minimumsprincip for bevægelsen af en partikel med masse m i et konservativt kraftfelt blev fremsat af Maupertuis i 1744. Ifølge Maupertuis' princip er partiklens vej mellem to punkter A og B bestemt af, at tidsintegralet af den kinetiske energi T er mindst mulig,

$$\delta \int_A^B dt \;\; 2T = 0. \tag{1.78}$$

Idet $2Tdt = mvds = pds$, kan Maupertuis' princip også udtrykkes ved, at linjeintegralet af p skal være mindst mulig,

$$\delta \int_A^B ds \;\; p = 0, \tag{1.79}$$

i analogi med (1.77). På Hamiltons tid kunne ligheden mellem en lysstråles bevægelse og en partikels banekurve kun være af formel art. Denne formelle lighed blev imidlertid udgangspunktet for de Broglies ideer omkring et hundrede år senere. De Broglie foreslog, at der til en partikel med impuls p og energi E skulle knyttes en bølge med bølgelængde λ og frekvens ν givet ved

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad , \qquad \nu = \frac{E}{h}. \tag{1.80}$$

Ifølge dette skulle en partikel med veldefineret impuls p kunne undergå diffraktion ganske som en bølge med bølgelængde $\lambda = h/p$, kaldet de Broglie-bølgelængden.

Til støtte for identifikationen (1.80) sammenholdt de Broglie fire-vektoren for energi og impuls af en partikel med hvilemasse m og hastighed $\vec{v}$ med formen af en plan bølge. Ifølge den specielle relativitetsteori er fire-vektoren for energi og impuls givet ved

$$(\frac{E}{c}, \vec{p}) = (\frac{mc}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}), \tag{1.81}$$

svarende til, at energien E er givet ved $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$. De Broglie sammenlignede energi-impuls fire-vektoren med formen af en plan bølge,

$$e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}, \tag{1.82}$$

hvis fase $(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)$ er lig med det skalare produkt[17] af fire-vektorerne $(\omega/c,\vec{k})$ og $(ct,\vec{r})$. Idet $\lambda = 2\pi/k$ og $\nu = \omega/2\pi$, er (1.80) åbenbart ensbetydende med, at fire-vektoren $(\hbar\omega/c,\hbar\vec{k})$ identificeres med $(E/c,\vec{p})$.

En direkte eksperimentel bekræftelse af de Broglies ideer kom først i 1927, hvor Davissons og Germers forsøg viste, at reflektionen af en elektronstråle, der blev sendt mod overfladen af en nikkelkrystal, kunne forklares ved at tilordne elektronen en bølge med bølgelængde $\lambda = h/p$, i overensstemmelse med (1.80). De Broglies hypotese blev imidlertid udgangspunktet for Schrödingers bølgemekanik, der blev formuleret i fire banebrydende afhandlinger i det første halvår af 1926.

Erwin Schrödinger (1887-1961) blev uddannet i Wien og underviste i en periode i teoretisk fysik på Zürich Universitet. På dette tidspunkt var Peter Debye professor ved Eidgenössische Technische Hochschule i Zürich. De to institutioner afholdt fælles fysikseminarer under Debyes ledelse. Debye opfordrede Schrödinger til at aflægge en rapport om Louis de Broglies doktorafhandling fra 1924. De Broglie havde som omtalt ovenfor foreslået, at der til en partikel med energi E og impuls p skulle knyttes en bølge med frekvens $\nu = E/h$ og bølgelængde $\lambda = h/p$. Under Schrödingers foredrag bemærkede Debye[18], at man ikke kunne behandle bølger tilfredsstillende uden en bølgeligning. Schrödinger satte sig straks for at finde den ligning, der beskrev de Broglie's bølger. Resultatet var et nyt seminar få uger efter - denne gang **med** en bølgeligning - og en serie af fire afhandlinger i Annalen der Physik under titlen 'Quantizierung als Eigenwertproblem', indsendt i januar, februar, maj og juni 1926. I disse arbejder formulerede Schrödinger både den tidsuafhængige og den tidsafhængige ligning, og anvendte dem på den harmoniske oscillator og en række andre eksempler. Desuden udviklede han perturbationsteorien, som han benyttede til at forklare elektriske felters indflydelse på brintspektret. I den sidste af de fire artikler fandt Schrödinger en relativistisk bølgeligning, der gælder for en partikel uden spin.

Schrödinger kom frem til bølgeligningen ved at udnytte den ovenfor omtalte analogi mellem den klassiske geometriske optik og den klassiske partikeldynamik. Vi skal ikke gengive hans argumentation her, men nøjes med at diskutere løsningerne til bølgeligningen i nogle simple tilfælde.

[17]Det skalare produkt af fire-vektorerne $(k_0,\vec{k})$ og $(q_0,\vec{q})$ er $(-k_0q_0+\vec{k}\cdot\vec{q})$.

[18]F. Bloch, Physics Today, December 1976.

1.7.1 En fri partikel

For en frit bevægelig partikel med masse m er Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{1.83}$$

hvor $\psi=\psi(\vec{r},t)$ betegnes som bølgefunktionen.

Betydningen af bølgefunktionen ψ stod hverken Schrödinger eller hans samtidige klar, som det fremgår af nedenstående vers, der blev forfattet af en kollega ved en udflugt i forbindelse med en konference i Zürich i sommeren 1926:

> Gar Manches rechnet Erwin schon
> Mit seiner Wellenfunktion.
> Nur wissen möcht' man gerne wohl
> Was man sich dabei vorstell'n soll.

Max Borns fortolkning af bølgefunktionens absolutkvadrat, $\psi^*\psi$, som en sandsynlighedstæthed fremkom først senere i 1926 i form af to afhandlinger i Zeitschrift für Physik, **37**, 863 og **38**, 803. I hovedteksten af den første afhandling identificerede Born selve bølgefunktionen ψ med sandsynligheden, men han rettede dette til $|\psi|^2$ i en fodnote, der blev indført under korrekturlæsningen. Schrödinger havde selv foreslået, at $|\psi|^2$ repræsenterede fluktuationer i den elektriske ladningstæthed. Trods kvanteteoriens succes bevarede han en skepsis over for Borns fortolkning i resten af sit liv. Han var ikke ene om denne: hverken Planck, Einstein eller de Broglie kunne acceptere Borns fortolkning som den endegyldige. Alle eksperimenter, der til dato har afprøvet kvanteteoriens forudsigelser, har imidlertid understøttet Borns fortolkning.

Indsætter vi nu en plan bølge af formen (1.82) i ligningen (1.83), følger det, at

$$\hbar\omega=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{1.84}$$

som betingelse for, at bølgen er løsning til ligningen. Hvis $\hbar\omega$ identificeres med energien E og $\hbar k$ med længden af impulsen, p, er (1.84) åbenbart ensbetydende med

$$E=\frac{p^2}{2m}, \tag{1.85}$$

der er den velkendte sammenhæng mellem energien og impulsen af en frit bevægelig partikel. Løsningen til Schrödingerligningen for en fri partikel er altså i overensstemmelse med de

Broglies hypotese. I sig selv er dette ikke overraskende. Schrödingerligningen blev 'opfundet' for at beskrive de Broglie-bølger. Af større betydning er det at undersøge Schrödingerligningens forudsigelser, når partiklen ikke er frit bevægelig.

Schrödinger benyttede som nævnt ligheden mellem den geometriske optik og den klassiske partikeldynamik til at at formulere en bølgeligning, der er mere generel end (1.83), der kun gælder for en fri partikel. Han kom derved frem til, at (1.83) i almindelighed skulle erstattes med

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+V(\vec{r})\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{1.86}$$

der er ligningen for en enkelt partikel, der bevæger sig i et konservativt kraftfelt beskrevet ved den potentielle energi $V(\vec{r})$. Schrödinger udledte ikke (1.86). Hans overvejelser tog udgangspunkt i en formel analogi fra den klassiske fysik. Kun eksperimenter kunne afkræfte eller bekræfte gyldigheden af (1.86).

Schrödinger anvendte selv (1.86) på en række fysiske problemstillinger. Vi skal kort omtale et par af disse i de efterfølgende afsnit af dette kapitel og vender siden tilbage til en mere indgående diskussion af Schrödingerligningen i kapitel 3 og 4.

1.7.2 Partikel i en kasse

Hvis en partikel bevæger sig i et potential V, der er uafhængigt af tiden, er det muligt at separere løsningen til (1.86) i en funktion, der kun afhænger af $\vec{r}$ og én, der kun afhænger af t,

$$\psi(\vec{r},t)=u(\vec{r})f(t). \tag{1.87}$$

Ved at indsætte ψ i (1.86) ses det, at ligningen er opfyldt, hvis $u(\vec{r})$ og $f(t)$ hver for sig tilfredsstiller differentialligningerne

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2u}{\partial z^2}\right)+V(\vec{r})u=Eu \tag{1.88}$$

og

$$i\hbar\frac{df}{dt}=Ef \tag{1.89}$$

hvor E betegnes som en separationskonstant, der i dette tilfælde åbenbart har dimension af energi[19]. Da (1.89) er en differentialligning af første orden i tiden, har ligningen den almindelige løsning

$$f(t) = Ce^{-iEt/\hbar}, \tag{1.90}$$

hvor C er en arbitrær konstant. Løsningen til (1.88) afhænger af potentialets specifikke form. Matematisk set har (1.88) form af en egenværdiligning, idet venstresiden har form af en differentialoperator H virkende på u, mens højresiden er egenværdien E gange u. Som vi skal se i næste kapitel, kaldes H for Hamiltonoperatoren, hvis egenværdier E repræsentererer de mulige resultater af en måling af systemets energi.

I resten af dette afsnit vil vi udelukkende betragte det tilfælde, hvor partiklen bevæger sig i én dimension, hvorved (1.88) bliver

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x). \tag{1.91}$$

Hvis partiklen bevæger sig i et potential $V(x)$ givet ved

$$\begin{aligned} V(x) = \infty \quad &\text{for} \quad x > a \quad \text{og} \quad x < 0 \\ V(x) = 0 \quad &\text{for} \quad 0 < x < a, \end{aligned} \tag{1.92}$$

er en løsning til (1.91) givet ved

$$u_n(x) = A_n \sin(\frac{n\pi x}{a}), \quad \text{for} \quad 0 < x < a, \quad u_n(x) = 0 \quad \text{ellers}, \tag{1.93}$$

hvor n er et helt, positivt tal. Vi har her antaget, at ψ er kontinuert og nul, hvis potentialet er uendeligt stort (denne betingelse diskuteres nærmere i kapitel 4). Funktionerne (1.93) hørende til $n = 1, 2$ og 3 er vist på fig. 1.2.

Man kalder i kvanteteorien løsningen (1.93) for en tilstand, hvis konstanten A er valgt, således at $\int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^* u_n = 1$. Kvanteteoriens tilstandsbegreb diskuteres indgående i de følgende kapitler. Her skal vi blot angive egenværdierne for partiklens Hamiltonoperator og dermed de mulige udfald af en måling af partiklens energi.

[19] At ligningen (1.86) er tilfredsstillet af $\psi = uf$, hvis de to ligninger (1.88-89) hver for sig er opfyldt, kan eftervises ved at gange (1.88) med f og (1.89) med u og derefter subtrahere de to ligninger.

Værdien af konstanten E hørende til løsningen (1.93) ses ved indsættelse at være

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}. \tag{1.94}$$

Den fysiske fortolkning af E_n er, at E_n er partiklens energi i tilstanden u_n. Resultatet (1.94) er i overensstemmelse med, hvad man ville vente ud fra en dimensionsbetragtning, idet den eneste energi, der kan dannes ud fra $\hbar$, m og a er størrelsen $\hbar^2/ma^2$ (på nær en numerisk konstant).

Det er en følge af Fouriers rækkesætning (jvf. kapitel 3), at løsningerne (1.93) udgør en fuldstændig basis for den vilkårlige løsning ψ til Schrödingerligningen, idet ψ skal være nul i punkterne $x = a$ og $x = 0$, hvor potentialet bliver uendeligt stort. Vi har altså den generelle løsning

$$\psi = \sum_n a_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \tag{1.95}$$

Hvis vi ønsker at finde antallet af løsninger, hvis energi E_n ligger inden for intervallet ΔE omkring E, kan vi gå frem som følger: Antallet af løsninger N med energi mindre end E er ifølge (1.94) givet ved

$$N = \frac{a\sqrt{2mE}}{\hbar\pi}, \tag{1.96}$$

forudsat at N er meget større[20] end 1.

Antallet af tilstande mellem E og $E + dE$ betegnes med $g(E)dE$, hvor funktionen $g(E)$ kaldes for tilstandstætheden. Den kan findes ved at differentiere antallet af tilstande med energi mindre end E, med hensyn til E, idet $g(E)dE = N(E + dE) - N(E)$, altså

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{a\sqrt{m}}{\pi\hbar\sqrt{2E}}. \tag{1.97}$$

At tilstandstætheden aftager med voksende E afspejler, at afstanden mellem energiniveauerne (1.94) vokser med voksende n. Vi vender siden tilbage til begrebet tilstandstæthed i kapitel 4.

[20]Idet N per definition er heltallig, skal højresiden af (1.96) opfattes som det hele tal, der er nærmest på $a\sqrt{2mE}/\hbar\pi$.

1.7.3 Harmonisk oscillator

Som et sidste eksempel på brugen af Schrödingerligningen skal vi diskutere bevægelsen af en partikel med masse M i én dimension under indflydelse af den potentielle energi

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2. \tag{1.98}$$

Da vi allerede ved, at den karakteristiske energi er $\hbar\omega$ og den karakteristiske længde $\sqrt{\hbar/M\omega}$, hvor $\omega = \sqrt{K/M}$, kan vi forenkle diskussionen af Schrödingerligningen (1.91) ved straks at gå over til dimensionsløse størrelser svarende til egenværdiligningen

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2u = \lambda u. \tag{1.99}$$

Overgangen til dimensionsløse størrelser foretages ved at indføre den dimensionsløse længdevariabel $x' = x/\sqrt{\hbar/M\omega}$ og den dimensionsløse energivariabel $\lambda = E/\hbar\omega$ i Schrödingerligningen (1.91). Herved fremkommer (1.99), når man (af bekvemmelighedsgrunde) fjerner mærkerne på x'.

Vi søger at bestemme løsninger til (1.99), der er normerbare, dvs. løsninger om hvilke det gælder, at

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x)u_n(x) = 1. \tag{1.100}$$

Det er bekvemt at udtrykke differentialoperatoren på venstre side af (1.99) ved operatorerne a og $a^\dagger$, der er defineret ved

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + \frac{d}{dx}) \tag{1.101}$$

og

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - \frac{d}{dx}). \tag{1.102}$$

Begrundelsen for disse betegnelser vil blive nærmere belyst i kapitel 2 og 3, hvor vi skal se, at operatorerne a og $a^\dagger$ henholdsvis fjerner og skaber energikvanter[21].

Lader vi nu først a og derefter $a^\dagger$ virke på en funktion $f(x)$, får vi henholdsvis

$$af(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(xf + f') \tag{1.103}$$

[21] I kvanteteorien kan partikler opstå og forsvinde: en elektron i et metal kan absorbere eller udsende en fonon (kap. 9), et lyskvantum kan blive til en elektron og en positron (kap. 11), en neutron og en neutrino kan udveksle en vektorboson og blive til en proton og en elektron (kap.11).

og

$$a^\dagger f(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(xf - f') \tag{1.104}$$

hvor f' angiver den afledede af f med hensyn til x. Lad os nu prøve at virke med $a^\dagger$ på (1.103). Vi får da

$$a^\dagger a f(x) = \frac{1}{2}(-f'' + x^2 f - f). \tag{1.105}$$

Tilsvarende fås ved at lade a virke på (1.104), at

$$a a^\dagger f(x) = \frac{1}{2}(-f'' + x^2 f + f). \tag{1.106}$$

Af relationerne (1.103-106) kan vi drage nogle vigtige konsekvenser:

- Det er ikke ligegyldigt, i hvilken orden vi anbringer a og $a^\dagger$: ifølge (1.105-106) er $aa^\dagger f(x) - a^\dagger a f(x) = f$ eller på operatorform $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$, hvor 1 er enhedsoperatoren.

- Schrödingerligningen (1.99) kan udtrykkes som

$$a^\dagger a\, u = (\lambda - \frac{1}{2})u \tag{1.107}$$

idet

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 = a^\dagger a + \frac{1}{2} \tag{1.108}$$

ifølge (1.106).

- Løsningen til differentialligningen

$$a\, u = 0, \tag{1.109}$$

betegnes med u_0 og er givet ved

$$u_0 = Ce^{-x^2/2}, \tag{1.110}$$

som man kan eftervise ved at indsætte u_0 i differentialligningen (1.109). Her er C er en integrationskonstant, hvis størrelse fastlægges ved normeringsbetingelsen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_0^*(x) u_0(x) = 1. \tag{1.111}$$

Det ses ved brug af (1.109), at u_0 også er en løsning til Schrödingerligningen (1.107), hørende til energien $\lambda = 1/2$.

- Funktionen $a^\dagger u_0$ er en løsning til Schrödingerligningen (1.107) hørende til egenværdien $\lambda = 3/2$, idet (1.109) medfører, at

$$a^\dagger a a^\dagger u_0 = a^\dagger (a^\dagger a + 1) u_0 = a^\dagger u_0. \tag{1.112}$$

- Hvis u_n er en løsning til Schrödingerligningen (1.107) med egenværdi $\lambda_n = (n + 1/2)$, er funktionen $a^\dagger u_n$ en løsning med egenværdi $\lambda_{n+1} = \lambda_n + 1$, idet

$$a^\dagger a a^\dagger u_n = a^\dagger (a^\dagger a + 1) u_n = (n+1) a^\dagger u_0. \tag{1.113}$$

Af dette følger, at energiegenværdierne for den harmoniske oscillator er givet ved

$$E_n = \lambda_n \hbar\omega = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \tag{1.114}$$

hvor n er et ikke-negativt heltal, idet der ikke - som vi skal vise i afsnit 2.2.2 - findes andre normerbare løsninger end de anførte.

Lad os vende tilbage til Schrödingerligningen (1.88). Operatoren

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) \tag{1.115}$$

repræsenterer den kinetiske energi, idet vi identificerer differentialoperatoren $(\hbar/i)\nabla$ med impulsen $\vec{p}$, svarende til de Broglie-relationen $\lambda = h/p$. Det følger herefter af definitionerne (1.101-102), at impulsen p for en partikel, der bevæger sig i én dimension, kan udtrykkes ved a og $a^\dagger$,

$$p = \frac{\sqrt{\hbar m\omega}}{i\sqrt{2}}(a - a^\dagger). \tag{1.116}$$

Danner vi udtrykket

$$p_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_n(x)^* p u_m(x), \tag{1.117}$$

har vi dermed angivet en uendelig-dimensional matrix hørende til impulsen p. Bemærk at matricen for p ikke er diagonal, og at det kun er matrixelementerne $p_{n,n+1}$ og $p_{n,n-1}$, der er forskellige fra nul[22].

[22]Dette er en konsekvens af, at a og $a^\dagger$ virkende på u_n er proportional med henholdsvis u_{n-1} og u_{n+1}, forudsat at $n \geq 1$, samt at funktionerne u_n er ortogonale,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_n^*(x) u_m(x) = 0 \quad \text{for} \quad n \neq m. \tag{1.118}$$

I det følgende kapitel skal vi se, hvorledes vi kan repræsentere fysiske størrelser ved sådanne matricer, hvis egenværdier udgør de mulige resultater af en måling af den pågældende fysiske størrelse.

1.7.4 Bølgepakker

Inden vi i det følgende kapitel tager fat på matrixformuleringen af kvantemekanikken, skal vi afslutte denne introduktion til bølgemekanikken med en omtale af begreberne fasehastighed og gruppehastighed. For nemheds skyld betragter vi blot bevægelse i én dimension. Resultaterne lader sig let generalisere til tre.

En plan bølge, der udbreder sig i én dimension, har formen

$$e^{i(kx-\omega t)}. \tag{1.119}$$

Det fremgår af (1.119), at fasen $(kx - \omega t)$ er konstant, når x og t tilfredsstiller

$$x = \text{konst.} + \frac{\omega}{k}t. \tag{1.120}$$

Man betegner ω/k som fasehastigheden. Hvis sammenhængen mellem ω og k ikke er lineær, er fasehastigheden forskellig fra den såkaldte gruppehastighed, der indføres som følger: Lad os betragte en overlejring af bølgefunktioner af formen (1.119),

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{i(kx-\omega t)}. \tag{1.121}$$

Det er ikke nødvendigt at specificere vægtfunktionen $g(k)$, men vil man tænke på noget konkret, kan man som eksempel tage funktionen

$$g(k) = e^{-(k-k_0)^2 a^2}, \tag{1.122}$$

hvor a og k_0 er konstanter. Overlejringen (1.121-122) udgøres i dette tilfælde af en sum af plane bølger, hvis bølgetal[23] $k/2\pi$ fortrinsvis ligger i et interval af størrelsesordenen a^{-1} omkring $k_0/2\pi$. Man kalder en overlejring af denne type en bølgepakke, uden at dette nødvendigvis implicerer, at vægtfunktionen $g(k)$ har den præcise form (1.122).

[23]Vi vil sidenhen, som det er almindeligt, omtale k som bølgetallet, selv om det strengt taget bør kaldes det cykliske bølgetal på grund af faktoren 2π.

Lad os nu undersøge, hvorledes formen af bølgepakken (1.121) ændrer sig i tiden over ikke for lange tidsrum ved at rækkeudvikle $\omega(k)$ omkring k_0,

$$\omega \simeq \omega(k_0) + (k - k_0)\frac{d\omega}{dk}|_0. \tag{1.123}$$

Ved at udføre integrationen over k ved hjælp af den nye variabel $k - k_0$ får vi, at

$$\psi = e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} f(x - v_g t), \tag{1.124}$$

hvor

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}|_0 \tag{1.125}$$

betegner gruppehastigheden og

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} g(k). \tag{1.126}$$

Vi ser, at bølgepakken i denne tilnærmelse bevarer sin form, idet maksimum for funktionen f forskydes i tiden ifølge

$$x = v_g t. \tag{1.127}$$

Dette gælder kun for ikke for lange tidsrum, da den approksimation (1.123), der blev benyttet ovenfor, ikke vedbliver at være gyldig.

I tre dimensioner er gruppehastigheden

$$\vec{v}_g = \frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}}, \tag{1.128}$$

hvorved gruppehastigheden for de Broglie-bølger med $\omega = \hbar k^2/2m$ bliver

$$\vec{v}_g = \frac{\hbar \vec{k}}{m}, \tag{1.129}$$

svarende til den klassiske sammenhæng mellem hastighed og impuls.

1.7.5 En relativistisk bølgeligning

Schrödingerligningen (1.83) for en fri partikel er baseret på den ikke-relativistiske sammenhæng $E = p^2/2m$ mellem energi og impuls af en fri partikel. Ifølge relativitetsteorien er

$$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2, \tag{1.130}$$

og Schrödinger foreslog derfor, at bølgeligningen (1.83) for en fri partikel i en relativistisk teori skulle erstattes med

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - m^2c^4\psi + \hbar^2c^2\nabla^2\psi = 0, \tag{1.131}$$

svarende til, at E erstattes med $i\hbar\partial/\partial t$, mens $\vec{p}$ erstattes med $(\hbar/i)\nabla$.

Schrödingers relativistiske ligning gælder ikke for en elektron, men kun for partikler uden spin. Goudsmit og Uhlenbeck havde i 1925 foreslået, at elektronen besad et spin eller 'indre' impulsmoment. De baserede deres hypotese på iagttagelser af magnetfelters påvirkning af atomernes spektrallinjer, der var givet ved Landés empiriske formel fra 1923. Det lykkedes Dirac i 1928 at finde en relativistisk ligning, der beskrev elektronens spin. Diracs ligning forklarede også den såkaldte finstruktur i brintspektret, altså forskellen mellem de iagttagne spektrallinjer og Bohr-modellens forudsigelser (1.11). Vi skal i dette afsnit introducere Diracs bølgeligning og siden vende tilbage til en diskussion af elektronens spin i forbindelse med teorien for impulsmoment (kap. 7).

Dirac forsøgte at finde en ligning, hvori de rumlige og tidslige afledede indgik lineært. En sådan ligning har for en fri partikel formen

$$(E - \vec{\alpha}\cdot\vec{p} - \beta mc^2)\psi = 0, \tag{1.132}$$

hvor

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla. \tag{1.133}$$

Ved at forlange, at løsninger til (1.132) også tilfredsstiller (1.131), kunne Dirac fastlægge størrelserne $\vec{\alpha}$ og β. Virker man nemlig på (1.132) med operatoren $(E + \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2)$ fås (1.131), **forudsat** at $\vec{\alpha}$ og β tilfredsstiller de algebraiske relationer

$$\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0 \tag{1.134}$$

for alle i $(i = x, y, z)$ og

$$\beta^2 = 1. \tag{1.135}$$

Desuden skal det gælde, at

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0 \tag{1.136}$$

for $i \neq j$, mens

$$\alpha_i \alpha_i = 1 \tag{1.137}$$

for $i = x, y, z$. Når disse betingelser er opfyldt, forsvinder de dobbelte produkter nemlig fra

$$(E + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2)(E - \vec{\alpha} \cdot \vec{p} - \beta mc^2)\psi = 0, \tag{1.138}$$

mens kvadraterne er i overensstemmelse med (1.131).

Det er klart, at α_i og β ikke kan være almindelige talstørrelser, hvis en betingelse som $\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$ skal være opfyldt. Hvis α_i og β i stedet er matricer, er det derimod muligt. Et elementært eksempel på dette udgøres af de to 2×2 matricer

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{1.139}$$

Resultatet af at multiplicere den første matrix med den anden ses at være lig med minus resultatet af at multiplicere den anden med den første. Lad os derfor prøve at repræsentere α_i og β ved

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \tag{1.140}$$

og

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{1.141}$$

hvor det om σ_i skal gælde, at

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0 \tag{1.142}$$

for $i \neq j$, mens

$$\sigma_i^2 = 1. \tag{1.143}$$

Størrelserne σ_i må da også være matricer, for at (1.142) kan være opfyldt. Vi vælger dem som 2×2 matricerne

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{1.144}$$

der betegnes som Pauli-matricerne efter den tyske fysiker Wolfgang Pauli.

Størrelserne α_i $(i = x, y, z)$ og β bliver altså 4×4 matricer. For at tydeliggøre dette skriver vi bølgeligningen ud på matrixform, hvorved bølgefunktionen ψ repræsenteres ved en søjlevektor med fire komponenter $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$,

$$\begin{pmatrix} E - mc^2 & 0 & p_z & p_x - ip_y \\ 0 & E - mc^2 & p_x + ip_y & -p_z \\ p_z & p_x - ip_y & E + mc^2 & 0 \\ p_x + ip_y & -p_z & 0 & E + mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{1.145}$$

Så længe vi kun betragter en fri partikels bevægelse, giver ligningen (1.145) os kun den oplysning, at sammenhængen mellem E og $\vec{p}$ må være givet ved (1.130), for at der eksisterer egentlige (d.v.s. fra nul forskellige) løsninger $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$, hvor hver komponent er proportional med en plan bølge $\exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$. Som vi nærmere skal se i kapitel 7, giver bølgeligningen (1.145) imidlertid mulighed for at beskrive elektronens spin og forklare, hvorledes det påvirkes af et magnetfelt.

1.8 Opgaver

OPGAVE 1.1

Benyt Planck-fordelingen (1.1) til at vise, at den samlede energitæthed er givet ved $u = aT^4$ og angiv konstanten a udtrykt ved de opgivne konstanter.

OPGAVE 1.2

Find ud fra Planck-fordelingen (1.1) den bølgelængde λ_m, ved hvilken fordelingen har sit maksimum, udtrykt ved den absolutte temperatur og de opgivne konstanter. Hvor stor er λ_m for henholdsvis $T = 3$ K og $T = 6000$ K?

OPGAVE 1.3

En myon er en elementarpartikel, der har samme ladning som en elektron, men en masse, der er 207 gange så tung. Angiv størrelsesordenen af bindingsenergien for en myon, der er bundet til en brintkerne (proton). Hvad er atomets karakteristiske længde? Sammenlign med brintatomet.

OPGAVE 1.4

Find energien af en foton svarende til bølgelængden 7000 Å. Hvor stor er energien af en γ-stråle foton med bølgelængde 10^{-13} m?

OPGAVE 1.5

Find de Broglie-bølgelængden for en partikel med masse 10 g og hastighed 1 m/s.

OPGAVE 1.6

Find den kinetiske energi af en neutron med de Broglie-bølgelængde 2 Å.

OPGAVE 1.7

Bestem de Broglie-bølgelængden for et kvælstofmolekyle i atmosfærisk luft ved stuetemperatur. Molekylets hastighed antages at være $\sqrt{< v^2 >}$, hvor $< v^2 >$ er den (termiske) middelværdi af hastighedskvadratet.

OPGAVE 1.8

Undersøg om hver af følgende funktioner er en egenfunktion for paritetsoperatoren defineret i (1.14): a) $\sin x$, b) $\cos x$, c) $\exp ix$. Angiv i bekræftende fald egenværdien.

OPGAVE 1.9

Vis, at differentialoperatoren

$$p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

har funktionen

$$e^{ikx}$$

som egenfunktion, og angiv egenværdien. Er $\sin kx$ en egenfunktion for p? For p^2?

OPGAVE 1.10

Vurder størrelsesordenen af rotationsenergierne i a) iltmolekylet og b) kvælstofmolekylet. Diskuter betydningen af dit resultat for den iagttagne værdi af forholdet mellem varmekapaciteten ved konstant tryk og ved konstant rumfang i atmosfærisk luft ved stuetemperatur.

OPGAVE 1.11

En partikel med masse M bevæger sig i én dimension i et potential givet ved

$$V(x) = \infty \quad \text{for} \quad z < 0; \qquad V(x) = az \quad \text{for} \quad z > 0, \tag{1.146}$$

hvor a er en positiv konstant. Benyt dimensionsanalyse til at finde et udtryk for partiklens energi (på nær en numerisk konstant) i grundtilstanden. Hvor stor er denne, hvis az er partiklens potentielle energi hidrørende fra tyngdekraften ved jordoverfladen, og partiklens masse er 1 g?

OPGAVE 1.12

En elektron med hastighed v_F bevæger sig i det indre af et metal langs dettes overflade under påvirkning af et magnetfelt beskrevet ved den magnetiske induktion B. Idet magnetfeltet er vinkelret på overfladenormalen, og elektronen antages at bevæge sig vinkelret på magnetfeltets retning, er størrelsen af kraften på elektronen lig med $ev_F B$ og bevægelsen med tilnærmelse beskrevet ved den potentielle energi

$$V(z) = \infty \quad \text{for} \quad z < 0, \qquad V(z) = ev_F Bz \quad \text{for} \quad z > 0, \tag{1.147}$$

hvor z angiver afstanden fra metaloverfladen. Benyt dimensionsanalyse til at finde et udtryk for elektronens energi på nær en numerisk konstant, og bestem størrelsesordenen af energiforskellen mellem naboniveauer, når $B = 1$ T og $v_F = 10^6$ m/s. Hvor i det elektromagnetiske spektrum ligger den tilhørende frekvens?

OPGAVE 1.13

En partikel med masse M bevæger sig i potentialet givet ved

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 + ax^4, \tag{1.148}$$

hvor K og a er positive konstanter.

Vis, at der ud fra de opgivne konstanter samt $\hbar$ kan dannes en karakteristisk energi, der er proportional med a, og angiv et udtryk for denne.

OPGAVE 1.14

Find den mindst mulige værdi af energien (1.94) (man betegner denne som nulpunktsenergien). Vurder nulpunktsenergien for et ^{4}He-atom i fast ^{4}He, idet a anslås til at være 10^{-8} cm, og omsæt energien til en karakteristisk temperatur. Benyt svaret til at give en begrundelse for, at helium på væskeform ikke bliver fast, selv om det køles ned til temperaturer på 1 mK (millikelvin).

OPGAVE 1.15

Vis, at matricen for x, der er defineret ved

$$x_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_n(x)^* x u_m(x), \tag{1.149}$$

har diagonalelementer, der alle er nul. Bestem x_{01} og x_{10}.

2 Kvantisering

I den klassiske mekanik spiller små svingninger om ligevægt en vigtig rolle. Hvis en partikel bevæger sig i et område, hvor den potentielle energi har et minimum, kan denne ofte tilnærmes ved en funktion, der afhænger af kvadratet på afstanden fra ligevægtspositionen. Herved bliver partiklens bevægelse simpel at bestemme, da kraften vokser lineært med afstanden fra ligevægtspositionen. Som det er kendt fra mekanikken, vil løsningen til partiklens bevægelse som funktion af tiden være en harmonisk svingning med en angulær frekvens, der er givet ved kvadratroden af forholdet mellem kraftkonstanten og partiklens masse, jvf. (1.43).

I kvantemekanikken er den harmoniske oscillator et af de få eksempler på et fysisk system, for hvilket det er muligt at finde en simpel, eksakt løsning. Samtidig danner den harmoniske oscillator grundlag for at beskrive så forskelligartede fænomener som lydudbredelse, atomers vekselvirkning med stråling, gittersvingninger i faste stoffer og kernevibrationer.

Vi skal i dette kapitel introducere den kvantefysiske begrebsverden ved at tage udgangspunkt i den harmoniske oscillator. Først vil den klassiske behandling af bevægelsesproblemet blive omtalt. Vi skal se, hvorledes den klassiske mekanik kan formuleres, så de kvantefysiske bevægelsesligninger fremkommer ved en tilsyneladende enkel generalisation. Fremstillingen bliver derved uhistorisk. Niels Bohrs atommodel og kvantemekanikkens endelige udformning i tyverne af dette århundrede havde nok rod i den klassiske begrebsverden. De epokegørende fremskridt skyldtes imidlertid ikke formelle generalisationer af den klassiske mekanik, men først og fremmest eksperimentelle iagttagelser af simple lovmæssigheder, der ikke lod sig forklare ud fra den klassiske fysik.

2.1 Analytisk mekanik

William Rowan Hamilton (1805-65) var en irsk astronom og matematiker, der blev født i Dublin, hvor han også siden studerede ved Trinity College. Han var et vidunderbarn, der i en alder af fem oversatte fra latin, græsk og hebraisk, og i en alder af tretten beherskede lige så mange sprog. Han blev professor i astronomi som 22-årig, mens han endnu studerede. Foruden mekanik og optik beskæftigede han sig med algebra og opfandt kvaternionerne, der generaliserer de komplekse tal til en ikke-kommutativ algebra. Han skrev digte og regnede

Wordsworth blandt sine venner, selv om denne skal have rådet ham til hellere at skrive matematik end poesi.

Trods disse fortjenester kan det forekomme mærkeligt, at Hamiltons navn er udødeliggjort igennem en operator i kvantemekanikken, i betragtning af, at der gik 35 år fra hans død til fremsættelsen af Plancks strålingslov. I det følgende skal vi antyde baggrunden for dette ved at indføre nogle af den analytiske mekaniks grundlæggende begreber. Fremstillingen er baseret på et simpelt eksempel, bevægelsen af en harmonisk oscillator, men det vil fremgå, at den analytiske mekanik igennem Hamiltons ligninger udgør en almen formulering af den klassiske mekanik.

2.1.1 Lagrange-formalismen

Vi betragter i det følgende et meget simpelt problem, bevægelsen af en partikel med masse M i et harmonisk oscillatorpotential (1.42). Ifølge Newtons anden lov er partiklens acceleration bestemt ved

$$M\frac{d^2x}{dt^2} = -Kx, \tag{2.1}$$

med den velkendte løsning

$$x = x_0\cos(\omega t + \phi), \tag{2.2}$$

hvor

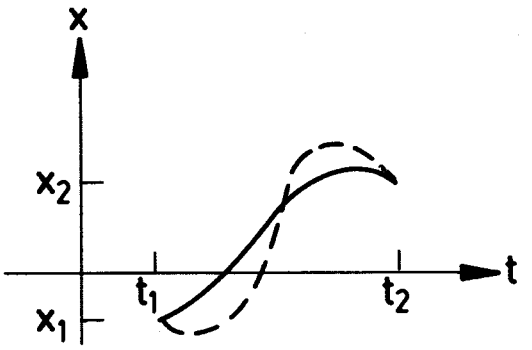
$$\omega = \sqrt{\frac{K}{M}}, \tag{2.3}$$

mens x_0 og ϕ er arbitrære konstanter, der fastlægges ved begyndelsesbetingelserne. Vi betragter nu to tidspunkter, t_1 og t_2 , således at partiklen til tidspunktet t_1 befinder sig i punktet x_1, mens den til tidspunktet t_2 befinder sig i x_2 . Værdierne af x til tidspunkter imellem t_1 og t_2 er givet ved løsningen (2.2) til bevægelsesligningen. Lad os alligevel lade, som om vi ikke kender denne løsning, og forsøge at bestemme den 'vej' $x(t)$, som partiklen tilbagelægger imellem tidspunkterne t_1 og t_2 ved at danne størrelsen

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(x, \frac{dx}{dt}) \tag{2.4}$$

hvor

$$L = T - V \tag{2.5}$$



Figur 2.1: To veje

kaldes systemets Lagrangefunktion, idet

$$T = \frac{1}{2}M(\frac{dx}{dt})^2 \tag{2.6}$$

er systemets kinetiske energi og

$$V = \frac{1}{2}Kx^2 \tag{2.7}$$

er den potentielle energi. Man kalder S for *virkningen.* Det ses, at virkningen har samme dimension som Plancks konstant, nemlig energi gange tid eller impuls gange længde.

Ifølge (2.4) er virkningen en funktion af den funktion $x(t)$, der beskriver en mulig 'vej', forstået på den måde, at $x(t)$ til tiden $t = t_1$ antager værdien x_1, mens $x(t)$ til tiden t_2 antager værdien x_2, men i øvrigt kan være vilkårlig. I det følgende vil vi vise, at virkningen S har et ekstremum, når bevægelsesligningen (2.1) er opfyldt, svarende til at $x(t)$ er givet ved (2.2). For nemheds skyld vil vi ofte skrive den afledede dx/dt med hensyn til tiden som $\dot{x}$.

Opgaven består nu i at variere virkningen S med hensyn til $x(t)$ og finde dens ekstremum. Vi undersøger derfor, hvorledes S ændrer sig, når $x(t)$ erstattes med $x(t) + \delta x(t)$, hvor det om den infinitesimale størrelse $\delta x(t)$ gælder, at

$$\delta x(t_1) = \delta x(t_2) = 0, \tag{2.8}$$

som illustreret i fig. 2.1. Vi danner altså differencen

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(x + \delta x, \dot{x} + \dot{\delta x}) - \int_{t_1}^{t_2} dt L(x, \dot{x}), \tag{2.9}$$

der ses at være

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt(\frac{\partial L}{\partial x}\delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta \dot{x}), \tag{2.10}$$

når δS rækkeudvikles[1] til første orden i δx og $\delta\dot{x}$.

Betingelsen for, at S har ekstremum er, at (2.10) er nul for et vilkårligt δx, der tilfredsstiller grænsebetingelserne (2.8). For at udtrykke integranden i (2.10) ved δx benytter vi partiel integration[2] til at eliminere $\delta\dot{x}$. Ved partiel integration af det andet led i (2.10) og brug af (2.8) fås således

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}))\delta x, \tag{2.11}$$

idet $\int_{t_1}^{t_2} dt(\partial L/\partial\dot{x})\delta\dot{x} = [\delta x \partial L/\partial\dot{x}]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dt\delta x d(\partial L/\partial\dot{x})/dt = 0 - \int_{t_1}^{t_2} dt\delta x d(\partial L/\partial\dot{x})/dt$. Ekstremumsbetingelsen $\delta S = 0$ bliver da

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \tag{2.12}$$

da δx er vilkårlig bortset fra betingelsen (2.8).

Ligningen (2.12) kaldes for Lagrange-ligningen. Den erstatter Newtons ligning (2.1) og har samme fysiske indhold. Når udtrykket for L indsættes ifølge (2.5-7), fremkommer (2.1). I dette konkrete eksempel har vi altså vist, at Newtons ligning (2.1) kan udledes ud fra den betingelse, at virkningen har et extremum.

Selv om vi i det foregående har taget udgangspunkt i et konkret eksempel, den harmoniske oscillator, ses det umiddelbart, at Lagrange-ligningen (2.12) må gælde for bevægelse i et vilkårligt potential $V(x)$, når vi identificerer L med $T - V = M\dot{x}^2/2 - V(x)$. Herved bliver Lagrange-ligningen (2.12) jo

$$M\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{dV}{dx} = 0, \tag{2.13}$$

der er Newtons anden lov.

Også for et system med flere frihedsgrader kan vi indføre Lagrange-formalismen baseret på ekstremum-betingelsen $\delta S = 0$. Idet systemet antages at være beskrevet ved koordinaterne

[1] Bemærk, at denne rækkeudvikling ikke skal opfattes som en approksimation. Brugen af rækkeudviklingen svarer til at bestemme differentialkvotienten df/dx af en funktion $f(x)$ ved at danne forskellen $f(x+\Delta)-f(x)$ og rækkeudvikle denne til første orden i Δ, hvorved $f(x+\Delta) - f(x) = \Delta df/dx$.

[2] Ved partiel integration udnyttes identiteten $fg' = (fg)' - gf'$, hvor f og g begge er funktioner af t, mens $'$ angiver differentiation med hensyn til t. Når begge sider af denne ligning integreres med hensyn til t over intervallet fra t_1 til t_2 fås

$$\int_{t_1}^{t_2} dtfg' = [fg]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dtf'g$$

hvor $[fg]_{t_1}^{t_2} = f(t_2)g(t_2) - f(t_1)g(t_1)$ er nul, hvis f. eks. $g(t_2) = g(t_1) = 0$.

q_i, hvor i antager værdierne $1, 2, \ldots, s$, er Langrange-funktionen som før givet ved differensen mellem systemets kinetiske energi T og dets potentielle energi V,

$$L = T - V, \tag{2.14}$$

og Lagrange-ligningerne fremkommer ud fra betingelsen

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q_1, q_2, \ldots, q_s; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \ldots, \dot{q}_s) = 0, \tag{2.15}$$

der resulterer i de s ligninger

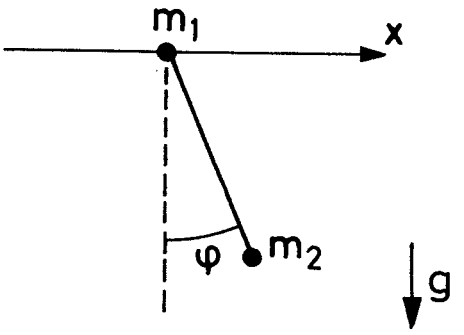
$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0. \tag{2.16}$$

Man kalder koordinaterne q_i for de generaliserede koordinater, idet de ikke nødvendigvis svarer til de cartesiske koordinater for hver af systemets partikler. Hvis vi ønsker at beskrive bevægelsen af en partikel i tre dimensioner, kunne vi vælge partiklens cartesiske koordinater x, y og z som generaliserede koordinater, men vi kunne lige så godt benytte de sfæriske koordinater r, θ og ϕ. Hvis vi betragter et system bestående af N partikler, der kan vekselvirke indbyrdes, vil antallet s af generaliserede koordinater altså være givet ved $s = 3N$. Valget af generaliserede koordinater kan i praksis være betinget af, hvilken afhængighed systemets potentielle energi udviser af de pågældende koordinater. Lagrange-formalismen er særlig bekvem til løsning af problemer med bånd imellem de variable, så at systemets mekaniske tilstand er specificeret ved et relativt lille antal generaliserede koordinater. I denne sammenhæng skal vi primært udnytte Lagrange-formalismen som baggrund for at indføre de såkaldte generaliserede impulser og udtrykke den klassiske mekaniks love på Hamiltonsk form. Inden dette vil brugen af Lagrange-formalismen blive illustreret ved et eksempel.

EKSEMPEL 1. ET FORSKYDELIGT PENDUL.

Vi vil benytte Lagrange-formalismen til at bestemme bevægelsen af to masser, m_1 og m_2, der som vist på fig. 2.2 er anbragt for hver ende af en vægtløs stang af længde l. Massen m_1 kan bevæge sig gnidningsfrit langs en vandret skinne, mens massen m_2 bevæger sig i figurens plan. Tyngdeaccelerationen kaldes g. Vi indlægger et koordinatsystem som vist på figuren. Koordinaterne for massen m_1 er $(x, 0)$, mens koordinaterne for massen m_2 er $(x + l\sin\phi, l\cos\phi)$. Udtrykt ved de tidsafledede $\dot{x}$ og $\dot{\phi}$ bliver den kinetiske energi T da

$$T = \frac{1}{2}m_1\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m_2((\dot{x} + l\dot{\phi}\cos\phi)^2 + l^2\dot{\phi}^2\sin^2\phi) = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m_2l^2\dot{\phi}^2 + m_2l\dot{x}\dot{\phi}\cos\phi. \tag{2.17}$$



Figur 2.2: Det forskydelige pendul

Den potentielle energi er

$$V = m_2 g l(1 - \cos\phi), \tag{2.18}$$

svarende til, at den potentielle energi er valgt til at være nul i ligevægtsstillingen $\phi = 0$.

Lagrange-ligningerne er

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \tag{2.19}$$

og

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0. \tag{2.20}$$

Bevægelsesligningerne for ϕ og x fremkommer ved at indsætte $L = T - V$ i (2.19-20). Vi vil i det følgende nøjes med at se på små udsving om ligevægtspositionen og tilnærmer derfor Lagrange-funktionen med et udtryk, der er kvadratisk i de små størrelser $\dot{x}, \phi, \dot{\phi}$. Herved kan $\cos\phi$ erstattes med 1 i den kinetiske energi T, mens $\cos\phi$ i den potentielle energi skal approksimeres ved $1 - \phi^2/2$.

Herved bliver Lagrange-ligningerne (2.19-20)

$$(m_1 + m_2)\ddot{x} + m_2 l\ddot{\phi} = 0, \tag{2.21}$$

og

$$m_2 l^2\ddot{\phi} + m_2 l\ddot{x} = -m_2 g l\phi. \tag{2.22}$$

Disse to koblede lineære differentialligninger har løsninger, der varierer harmonisk i tiden med den angulære frekvens ω,

$$x = a_1 \sin(\omega t + \phi_1), \quad \phi = a_2 \sin(\omega t + \phi_2), \tag{2.23}$$

hvor a_1, a_2, ϕ_1, ϕ_2 er konstanter. Man kalder sådanne løsninger for normalsvingninger (engelsk: normal modes). Vi skal nu vise, at bevægelsesligningerne er tilfredsstillet af løsninger af denne type, og bestemme ω udtrykt ved de opgivne konstanter l, g, m_1 og m_2.

Når vi indsætter løsninger af den angivne form i (2.21-22), kan $\ddot{x}$ og $\ddot{\phi}$ erstattes med henholdsvis $-\omega^2 x$ og $-\omega^2\phi$, hvorved de to koblede differentialligninger bliver simplificeret til to almindelige (algebraiske) ligninger

for de variable x og ϕ,

$$-(m_1+m_2)\omega^2 x - m_2 l\omega^2\phi = 0, \tag{2.24}$$

og

$$-m_2\omega^2 x - m_2 l(\omega^2-\omega_0^2)\phi = 0. \tag{2.25}$$

Vi har indført ω_0 ved definitionen $\omega_0^2 = g/l$. Da ligningssystemet (2.24-25) er homogent, skal den tilhørende determinant være nul, for at der findes egentlige løsninger. Den resulterende andengradsligning i ω^2 bestemmer de to mulige frekvenser ω_1 og ω_2 til at være

$$\omega = \omega_1 = 0 \tag{2.26}$$

og

$$\omega = \omega_2 = \sqrt{\frac{m_2+m_1}{m_1}}\omega_0. \tag{2.27}$$

Bemærk, at ω_2 er større end svingningsfrekvensen ω_0 af det matematiske pendul, der fremkommer ved, at massen m_1 holdes fast. Det betragtede system er i øvrigt specielt ved, at koordinaten x ikke indgår i Lagrange-funktionen (man kalder en sådan koordinat for cyklisk). Den tilhørende generaliserede impuls, der er defineret nedenfor i (2.31), er derfor bevaret i tiden.

2.1.2 Hamiltons ligninger

Vi vender nu tilbage til at betragte et system beskrevet ved én generaliseret koordinat for at indføre begrebet generaliseret impuls. Lagrangefunktionen $L = M\dot{x}^2/2 - V(x)$ afhænger af den generaliserede koordinat

$$q = x \tag{2.28}$$

og den tilhørende generaliserede hastighed

$$\dot{q} = \dot{x}. \tag{2.29}$$

Differentialet dL kan således udtrykkes som

$$dL = \frac{\partial L}{\partial q}dq + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q}. \tag{2.30}$$

Den generaliserede impuls p indføres nu ved definitionen

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}. \tag{2.31}$$

I det betragtede tilfælde er den generaliserede impuls åbenbart lig med massen gange hastigheden, $p = M\dot{x}$. I almindelighed behøver en generaliseret impuls ikke at have samme dimension

som impuls. Hvis den generaliserede koordinat er en vinkelkoordinat, vil den tilhørende generaliserede impuls have samme dimension som et impulsmoment.

Lagrangefunktionen afhænger af de variable q og $\dot{q}$. Vi indfører nu Hamiltonfunktionen H ved transformationen

$$H = p\dot{q} - L \tag{2.32}$$

og opfatter H som en funktion af p og q . Differentialet dH er

$$dH = pd\dot{q} + \dot{q}dp - dL = -\dot{p}dq + \dot{q}dp \tag{2.33}$$

idet

$$\dot{p} = \frac{\partial L}{\partial q} \tag{2.34}$$

ifølge (2.12).

Af (2.33) følger, at bevægelsesligningen for systemet kan skrives på følgende form

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \tag{2.35}$$

og

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \tag{2.36}$$

der er Hamiltons ligninger. Variabelskiftet fra $(q, \dot{q})$ til (q, p), der er tilvejebragt ved transformationen (2.32), benyttes i mange andre sammenhænge, f. eks. i termodynamikken ved overgang fra energi til entalpi eller fri energi. Det kaldes en Legendre-transformation.

Da H ikke afhænger af eksplicit af tiden, er $dH/dt = (\partial H/\partial q)\dot{q} + (\partial H/\partial p)\dot{p}$. Ved at benytte (2.35-36) fås derfor, at $dH/dt = 0$. Når $p = M\dot{q}$ og $L = M\dot{q}^2/2 - Kq^2/2$ indsættes i (2.32), ser man, at H er den samlede energi (lig summen af den kinetiske og den potentielle energi). Udtrykt ved de generaliserede koordinater q og p, der også kaldes de kanonisk konjugerede koordinater, er Hamiltonfunktionen

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}Kq^2. \tag{2.37}$$

I qp-planen er kurver med konstant energi åbenbart ellipseformede.

For et system beskrevet ved s generaliserede koordinater vil Hamiltons ligninger være

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{2.38}$$

og

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \tag{2.39}$$

idet Hamiltonfunktionen H er givet ved

$$H = -L + \sum_{i=1}^{s} p_i \dot{q}_i. \tag{2.40}$$

Ligningerne (2.38-39) med definitionen (2.40) for Hamiltonfunktionen er ækvivalente med Newtons ligninger. I det følgende skal vi omforme disse ligninger for at komme frem til et udgangspunkt for den kvantemekaniske behandling af den harmoniske oscillator.

2.1.3 Poisson-parenteser

Hamiltons ligninger kan udtrykkes på en anden form ved brug af de såkaldte Poisson-parenteser. For et system beskrevet ved s generaliserede koordinater og s generaliserede impulser, defineres Poisson-parentesen $\{,\}$ ved

$$\{u, v\} = \sum_{i=1}^{s} \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial v}{\partial q_i} \frac{\partial u}{\partial p_i} \right) \tag{2.41}$$

idet u og v betegner funktioner af de variable $q_1, q_2, \ldots, q_s; p_1, p_2, \ldots, p_s$.

Ved brug af denne definition kan Hamiltons ligninger (2.38-39) skrives på den symmetriske form

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} \tag{2.42}$$

og

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\}. \tag{2.43}$$

Desuden bemærker vi, at

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}, \tag{2.44}$$

hvor δ_{ij} er 1, hvis $i = j$ og nul, hvis $i \neq j$, samt at

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0. \tag{2.45}$$

Af definitionen (2.41) følger, at Poisson-parentesen af en funktion u med sig selv altid vil være nul,

$$\{u, u\} = 0. \tag{2.46}$$

Det ses endvidere, at Poisson-parentesen af en funktion u med en konstant c er nul,

$$\{u, c\} = 0, \tag{2.47}$$

samt at

$$\{u, v\} = -\{v, u\}. \tag{2.48}$$

Ved at anvende sædvanlige regneregler for differentiation fås, at

$$\{u + v, w\} = \{u, w\} + \{v, w\} \tag{2.49}$$

samt

$$\{u, vw\} = \{u, v\}w + v\{u, w\}. \tag{2.50}$$

Poisson-parenteser gør det muligt at angive et kompakt udtryk for den tidsafledede af en vilkårlig funktion u,

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{i=1}^{s}(\frac{\partial u}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial u}{\partial p_i}\dot{p}_i) = \frac{\partial u}{\partial t} + \{u, H\}, \tag{2.51}$$

hvor vi ved den sidste omformning har udnyttet Hamiltons ligninger (2.38-39) og definitionen (2.41) på Poisson-parentesen. For alle størrelser, i hvilke tiden ikke indgår eksplicit, vil

$$\{u, H\} = 0 \tag{2.52}$$

derfor være ensbetydende med, at $du/dt = 0$. Sådanne størrelser er altså konstante i tiden, hvis deres Poisson-parentes med Hamiltonfunktionen er nul. Man kalder disse for bevægelseskonstanter. Energien af en harmonisk oscillator er tydeligvis en bevægelseskonstant, idet H ifølge (2.37) ikke afhænger eksplicit af tiden.

Bevægelsesligningen (2.1) for en harmonisk oscillator kan udtrykkes ved Poisson-parenteser. Vi har åbenbart ifølge de generelle ligninger (2.38-39), at

$$\dot{q} = \{q, H\} \tag{2.53}$$

og

$$\dot{p} = \{p, H\}, \tag{2.54}$$

hvor H er givet ved (2.37). Idet

$$\{q, p\} = 1 \tag{2.55}$$

fås ved anvendelse af regnereglerne (2.49-50) at

$$\dot{q} = \frac{p}{M} \tag{2.56}$$

samt

$$\dot{p} = -Kq. \tag{2.57}$$

De to ligninger (2.56-57) medfører, at

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \omega^2 q = 0 \tag{2.58}$$

i overensstemmelse med (2.1), idet ω er givet ved (2.3).

EKSEMPEL 2. POISSON-PARENTESER OG DEN TODIMENSIONALE HARMONISKE OSCILLATOR.

Som eksempel på brug af Poisson-parenteser skal vi i det følgende diskutere bevægelsen af en partikel med masse m i et todimensionalt harmonisk oscillatorpotential karakteriseret ved to kraftkonstanter K_1 og K_2.

Den klassiske Hamiltonfunktion er

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}(K_1 x^2 + K_2 y^2) \tag{2.59}$$

Endvidere indfører vi størrelsen L givet ved

$$L = xp_y - yp_x, \tag{2.60}$$

der ses at være z-komposanten af partiklens baneimpulsmoment.

Vi har

$$\{x, p_x\} = \{y, p_y\} = 1, \tag{2.61}$$

og

$$\{x, p_y\} = \{y, p_x\} = \{x, y\} = \{p_x, p_y\} = 0. \tag{2.62}$$

Endvidere ses det, at

$$\{x, p_x^2\} = 2p_x, \quad \{x^2, p_x\} = 2x \tag{2.63}$$

og tilsvarende for y-koordinaten. Det følger af disse relationer, at

$$\{H, L\} = (K_2 - K_1)xy. \tag{2.64}$$

Hvis de to kraftkonstanter er ens, er højresiden af (2.64) lig med nul, og z-komposanten af impulsmomentet, L, derfor en bevægelseskonstant.

Vi kan altså konkludere, at L er en bevægelseskonstant, hvis den potentielle energi er uændret ved drejninger om z-aksen, svarende til, at de to kraftkonstanter K_1 og K_2 er lige store. I den resterende del

af dette eksempel skal vi udelukkende betragte det tilfælde, hvor de to kraftkonstanter er ens, således at partiklen bevæger sig i xy-planen i et harmonisk oscillatorpotential givet ved $V(x,y) = K(x^2+y^2)/2$. Den tilhørende Hamiltonfunktion er dermed

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2), \tag{2.65}$$

hvor $\omega = \sqrt{K/m}$.

Vi har set ovenfor, at størrelsen L givet ved (2.60) er en bevægelseskonstant for en isotrop todimensional harmonisk oscillator. Oscillatoren har imidlertid yderligere to bevægelseskonstanter M og N givet ved

$$M = \frac{m\omega}{2}(x^2-y^2) + \frac{1}{2m\omega}(p_x^2 - p_y^2) \tag{2.66}$$

samt

$$N = m\omega xy + \frac{1}{m\omega}p_x p_y. \tag{2.67}$$

Dette ses ved direkte udregning af $\{H,M\}$ og $\{H,N\}$, der begge bliver nul. Forekomsten af bevægelseskonstanterne M og N er et specielt træk ved det harmoniske oscillatorpotential. Hvis der til den potentielle energi i (2.65) f. eks føjes et udtryk af formen $a(x^2+y^2)^2$, hvor a er en konstant, er hverken M eller N bevægelseskonstanter. Derimod vil det fortsat gælde, at $\{L,H\} = 0$, så længe den potentielle energi kun afhænger af længden $\sqrt{x^2+y^2}$ af stedvektoren (x,y). At Poisson-parentesen $\{L,H\}$ er identisk nul, udtrykker potentialets symmetri over for drejninger om en akse gennem $(x,y) = (0,0)$ vinkelret på xy-planen. Så længe den potentielle energi kun afhænger af længden $\sqrt{x^2+y^2}$, er Hamiltonfunktionen uændret under drejninger om denne akse, og impulsmomentets komposant langs symmetriaksen dermed en bevægelseskonstant.

Til slut vil vi udregne Poisson-parenteserne $\{L,M\}$, $\{M,N\}$ og $\{N,L\}$. Ved at benytte (2.61-63) ses det, at

$$\{L,M\} = 2N;\ \{M,N\} = 2L;\ \{N,L\} = 2M. \tag{2.68}$$

Som det vil fremgå af kapitel 7, er der en sammenhæng mellem dette resultat og beskrivelsen af elektronens spin.

2.2 Fra klassisk mekanik til kvantemekanik

Vejen er nu banet til det store spring fremad: overgangen til kvantemekanikken. Ved at benytte Hamiltons ligninger som basis for kvantiseringen af den harmoniske oscillator springer vi ikke blot hen over årtiers eksperimentelt erhvervede indsigt i de atomare spektres lovmæssigheder. Vi ignorerer også den historiske betydning af de vanskeligheder, der affødtes af forsøget på at forene Rutherfords påvisning af atomkernens eksistens med den klassiske elektrodynamiks love for udstråling af energi fra bevægede ladninger. Disse vanskeligheder

var baggrunden for, at Bohr i 1913 med sin atommodel fremsatte et sæt postulater, der førte til overensstemmelse mellem de beregnede og målte linjer i brintspektret og lagde grunden til den udvikling, der kulminerede med kvantemekanikkens endelige udformning i tyverne af dette århundrede.

I det følgende repræsenterer u og v to fysiske størrelser som f. eks. sted og impuls. Vi indfører kommutatoren $[,]$ ved definitionen

$$[u, v] = uv - vu. \tag{2.69}$$

Hvis u og v blot var simple talstørrelser, ville kommutatoren (2.69) være nul. For at opnå, at kommutatoren $[u, v]$ lige som den klassiske Poisson-parentes $\{u, v\}$ kan blive forskellig fra nul, vil vi repræsentere de fysiske størrelser u og v ved matricer. Hermed er der indført en kommutatoralgebra, der svarer nøje til Poisson-parentesernes algebra, idet kommutatoren defineret ved (2.69) tilfredsstiller de samme relationer (2.49-50) som Poisson-parenteserne (jvf. (2.72-73) nedenfor).

Da q gange p har dimension af virkning, kan vi imidlertid ikke uden videre identificere $\{,\}$ med $[,]$. Vi indfører derfor en konstant med dimension af virkning og vælger denne som Plancks konstant $\hbar$. Valget af konstanten som $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ J·s er nødvendigt for at få overensstemmelse med eksperimenterne. Hermed er korrespondensen mellem Poisson-parenteser og kommutatorer fastlagt ved reglen

$$\{u, v\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[u, v]. \tag{2.70}$$

Ud over Plancks konstant har vi i denne ligning indført den imaginære enhed i, der opfylder $i^2 = -1$. Som det senere vil fremgå, er dette nødvendigt, for at kvanteteorien kan indeholde den klassiske mekanik som et grænsetilfælde. Ifølge forskriften (2.70) består kvantiseringen altså i at identificere kommutatoren $[q_i, p_j]$ med $i\hbar$ gange den klassiske Poisson-parentes $\{q_i, p_j\}$. Vi kan opfatte (2.70) som et postulat, der i hvert fald ikke strider mod dimensionsanalysen. I det følgende vil det blive vist, at dette postulat fører til kvantisering af den harmoniske oscillators energi.

Når (2.55) sammenholdes med (2.70), ses det, at q og p må tilfredsstille ombytningsrelationen

$$qp - pq = i\hbar. \tag{2.71}$$

Man siger, at q og p ikke er indbyrdes ombyttelige. Samtidig er det klart, at q er ombyttelig med sig selv, lige såvel som p er det. Idet u, v og w angiver matricer, ses de at opfylde regnereglerne

$$[u+v,w] = [u,w] + [v,w] \tag{2.72}$$

og

$$[u,vw] = [u,v]w + v[u,w], \tag{2.73}$$

svarende til (2.49-50).

I stedet for at benytte matricer kan man, som vi skal se i det følgende kapitel, beskrive manglen på ombyttelighed ved at repræsentere de fysiske størrelser ved operatorer. Som eksempel på operatorer, der ikke er indbyrdes ombyttelige, tjener q og d/dq, hvis kommutator er

$$[q, \frac{d}{dq}] = -1. \tag{2.74}$$

For at verificere gyldigheden af (2.74) skal vi blot opfatte venstresiden som en operator, der virker på en funktion $u(q)$ af q, og benytte at $q(du/dq) - d(uq)/dq = -u$. Åbenbart vil kommutatorrelationen (2.70) blive opfyldt, hvis vi repræsenterer impulsen ved

$$p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}. \tag{2.75}$$

En nærmere diskussion af operatorbegrebet vil vi imidlertid udskyde til næste kapitel, hvor også den nære sammenhæng mellem matrix- og operatorformuleringen vil blive belyst.

2.2.1 Matricer og egenværdier

At fysiske størrelser ikke er indbyrdes ombyttelige kan udtrykkes matematisk ved at repræsentere disse ved matricer. Matrixmultiplikation er som bekendt ikke kommutativ, idet produktet AB i almindelighed er forskelligt fra BA, når A og B er matricer.

Heisenbergs afhandling 'Über quantentheoretischen Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen' fra juli 1925 (Zeitschrift für Physik **33**, 879, 1925) lagde grunden til matrixmekanikken. Afhandlingens resumé lyder: 'In der Arbeit soll versucht werden, Grundlagen zu gewinnen für eine quantentheoretische Mechanik, die ausschliesslich auf Beziehungen zwischen prinzipiell beobachtbaren Grössen basiert ist'. I indledningen til dette banebrydende arbejde anførte Heisenberg, at Einstein-Bohr frekvensbetingelsen repræsenterer

et komplet brud med kinematikken i den klassiske mekanik. Denne betingelse knytter en frekvens $\nu(n, n-\alpha)$ til energiforskellen $W(n) - W(n-\alpha)$ divideret med Plancks konstant, og afhænger altså af to variable n og α. På samme måde søgte Heisenberg at repræsentere fysiske variable som f. eks. $x(t)$, der indgår i den klassiske bevægelsesligning for en harmonisk oscillator

$$\ddot{x} + \omega^2 x(t) = 0,$$

ved størrelser, der afhænger af to sæt af variable. Han bemærkede i afhandlingen: 'Während klassisch $x(t).y(t)$ stets gleich $y(t).x(t)$ wird, brauch dies in der Quantentheorie im allgemeinen nicht der Fall zu sein. - In speziellen Fällen, z. B. bei der Bildung von $x(t).x(t)^2$ tritt diese Schwierigkeit nicht auf'. Heisenberg kendte på dette tidspunkt ikke til matricer og matrixmultiplikation. Det var Max Born, der umiddelbart efter (september 1925) sammen med sin elev Pascual Jordan viste, hvorledes matrixregning udgjorde den naturlige matematiske ramme om Heisenbergs ideer. Som Born og Jordan beskrev i deres afhandling, havde de haft lejlighed til at diskutere med Heisenberg, inden denne havde indsendt sit arbejde, og allerede i september 1925 færdiggjorde de deres afhandling 'Zur Quantenmechanik', der blev fulgt af 'Zur Quantenmechanik II' af Born, Heisenberg og Jordan fra november samme år. Hermed havde kvantemekanikken fået sin almene formulering.

Som et elementært eksempel på matricer, der ikke er ombyttelige, kan vi tage de tre 2×2 matricer, σ_x, σ_y og σ_z, der blev indført i afsnit 1.7.5 i forbindelse med diskussionen af den relativistiske bølgeligning. Disse såkaldte Pauli-matricer er givet ved

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.76}$$

Det ses umiddelbart, at Pauli-matricerne ikke er indbyrdes ombyttelige. F. eks. har vi

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \tag{2.77}$$

mens de to andre kommutatorer fremkommer af (2.77) ved cyklisk forskydning af x, y og z. Samtidig bemærker vi, at egenværdierne for hver af de tre matricer er 1 og -1 . Selvom matricerne (for σ_ys vedkommende) indeholder komplekse tal, er egenværdierne reelle. Denne egenskab er sikret af, at matricerne tilfredsstiller betingelsen

$$A_{ij} = A^*_{ji}, \tag{2.78}$$

hvor $*$ angiver kompleks konjugation[3] af elementerne i matricen A. En matrix, der tilfredsstiller (2.78), siges at være hermitesk. Beviset for, at egenværdierne af en hermitesk matrix er reelle, vil blive givet i det følgende kapitel. Det er ikke altid muligt at repræsentere fysiske størrelser ved matricer af endelig dimension. Som vist i det følgende bliver positionen af den harmoniske oscillator ligesom impulsen og energien knyttet til en matrix af uendelig dimension.

De til σ_z hørende egenvektorer kan vælges som

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2.79}$$

svarende til egenværdien 1, og

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2.80}$$

svarende til egenværdien -1. *Det grundlæggende postulat i kvanteteorien er, at fysiske størrelser repræsenteres ved matricer (eller operatorer), der i almindelighed ikke er ombyttelige, og at egenværdierne for disse angiver de mulige resultater af en måling af den pågældende fysiske størrelse.* I det foreliggende eksempel er de mulige resultater af en måling åbenbart 1 og -1. Det bør tilføjes, at vi med dette eksempel har benyttet en størrelse uden dimension, vektoren $\vec{\sigma}$. Det vil blive vist i kapitel 7, at elektronens spin $\vec{S}$, der har dimension af impulsmoment, er givet ved

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma} \tag{2.81}$$

svarende til ombytningsrelationerne

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \tag{2.82}$$

og tilsvarende ved cyklisk forskydning. De mulige resultater af en måling af en komposant af elektronens spin er således $\hbar/2$ og $-\hbar/2$ ifølge den anlagte fortolkning af matricernes egenværdier.

Efter dette mellemspil vender vi tilbage til den harmoniske oscillator i et forsøg på at bestemme de mulige værdier af oscillatorens energi.

[3]Bemærk at dette symbol, der er udbredt i fysikken, adskiller sig fra det, der anvendes i matematikken, hvor den kompleks konjugerede af c betegnes med $\bar{c}$.

2.2.2 Energikvanter

I dette afsnit vil vi ud fra ombytningsrelationen (2.71) for p og q finde de mulige værdier af den harmoniske oscillators totale energi. For at tydeliggøre, at p og q skal opfattes som matricer, benyttes betegnelsen $\hat{p}$ og $\hat{q}$ og tilsvarende for andre matricer[4]. Som anført er de mulige værdier af oscillatorens energi givet ved egenværdierne for energimatricen. Disse kan bestemmes ved at indføre matricerne $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$ ifølge definitionen (smlgn. (1.101-102))

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}(\hat{q} + i\frac{\hat{p}}{M\omega}) \tag{2.83}$$

og

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}(\hat{q} - i\frac{\hat{p}}{M\omega}). \tag{2.84}$$

De omvendte relationer er åbenbart

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \tag{2.85}$$

og

$$\hat{p} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \tag{2.86}$$

Da såvel $\hat{q}$ som $\hat{p}$ er hermiteske matricer, er $\hat{a}^\dagger$ den hermitesk konjugerede af $\hat{a}$, idet vi generelt indfører den hermitesk konjugerede matrix $A^\dagger$ til A ved definitionen

$$A^\dagger_{ij} = A^*_{ji}. \tag{2.87}$$

For en hermitesk matrix gælder det, at $A^\dagger = A$, der åbenbart er ensbetydende med (2.78).

Idet $\hat{q}$ og $\hat{p}$ tilfredsstiller ombytningsrelationen

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \tag{2.88}$$

mens $[\hat{q}, \hat{q}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0$, ser vi, at

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \tag{2.89}$$

Når vi i Hamiltonfunktionen (2.37) erstatter p med $\hat{p}$ og q med $\hat{q}$, fremkommer energimatricen

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}K\hat{q}^2, \tag{2.90}$$

[4]Denne notation, der i reglen benyttes til angivelse af operatorer, er valgt for at tydeliggøre, at de følgende matrixligninger også gælder for de tilsvarende operatorer, jvf. kapitel 3.

hvis egenværdier vi søger. Ved at benytte (2.85-86) til at udtrykke $\hat{q}$ og $\hat{p}$ ved $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$ og indsætte resultatet i (2.90) ses det, at $\hat{H}$ antager formen

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}). \tag{2.91}$$

Dette resultat for energimatricen kan verificeres ved at indsætte (2.83-84) i (2.91) og anvende ombytningsrelationen (2.88). Ud fra vore erfaringer med dimensionsanalysen i det foregående kapitel er det ikke overraskende, at $\hat{H}$ bliver udtrykt ved $\hbar\omega$ gange en dimensionsløs størrelse.

For at finde egenværdierne for $\hat{H}$ er det åbenbart tilstrækkeligt at bestemme egenværdierne af matricen $\hat{N}$, der er defineret ved

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}.$$

Det følger umiddelbart af (2.89), at

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \tag{2.92}$$

samt

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger. \tag{2.93}$$

Vi opfatter altså $\hat{H}$ som en matrix, hvis egenværdier E er bestemt af

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle. \tag{2.94}$$

Notationen $|E\rangle$ skyldes Dirac. Egenvektoren $|E\rangle$ er i lighed med (2.79-80) en søjlevektor svarende til, at $\hat{H}$ opfattes som en matrix. I kvanteteorien kaldes $|E\rangle$ for en tilstand, og den er mærket med E, der er en egenværdi af energimatricen. Man benytter betegnelsen *ket* om søjlevektoren $|E\rangle$, et navn, der hidrører fra det engelske ord bracket, der kan deles i bra-(c)ket. En *bra* er symboliseret ved $\langle E|$. Den kan opfattes som en egenvektor 'fra venstre' eller en rækkevektor og tilfredsstiller ligningen

$$\langle E|\hat{H} = \langle E|E.$$

Hvis $|\alpha\rangle$ angiver søjlevektoren

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{2.95}$$

er $\langle\alpha|$ rækkevektoren

$$\begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* & a_3^* & \cdots \end{pmatrix} \tag{2.96}$$

således at det skalære produkt er defineret ved

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_i a_i^* a_i = |a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 + \cdots. \tag{2.97}$$

Det ses, at $\langle\alpha|$ er den hermitesk konjugerede af $|\alpha\rangle$. Hvis summen af absolutkvadraterne i (2.97) er 1, siger man, at tilstanden er normeret, altså $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$.

Den hermitesk konjugerede af matrixproduktet AB fås af regnereglen

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \tag{2.98}$$

Rigtigheden af (2.98) indses ved at benytte

$$(AB)^\dagger_{ik} = \sum_j A^*_{kj} B^*_{ji} = \sum_j B^\dagger_{ij} A^\dagger_{jk}. \tag{2.99}$$

Det følger af (2.98), at kommutatoren $[A, B]$ af to hermiteske matricer ikke selv er hermitesk, idet den hermitesk konjugerede er $[B, A]$. Det ses imidlertid, at $i[A, B]$ er hermitesk. Dette er baggrunden for, at i optræder i (2.70), idet en hermitesk matrix som nævnt har reelle egenværdier.

Egenværdierne E kan nu findes ved at bestemme egenværdierne af $\hat{N}$. Foreløbigt ved vi intet om disse, men vi skal vise, at egenværdierne udgøres af alle de naturlige tal.

Vi skriver egenværdiligningen for $\hat{N}$ på formen

$$\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \tag{2.100}$$

og søger at bestemme λ og de tilhørende normerede tilstandsvektorer $|\lambda\rangle$, der tilfredsstiller $\langle\lambda|\lambda\rangle = 1$.

Argumentationen forløber som følger:

1. Først vil vi vise, at egenværdierne af $\hat{N}$ er større end eller lig med nul. Dette kan indses ved at skrive λ som $\langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle$, idet $|\lambda\rangle$ jo er forudsat normeret, og benytte omformningen

$$\lambda = \langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \langle\lambda|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\lambda\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0.$$

Her er $|\alpha\rangle = \hat{a}|\lambda\rangle$, og vi har udnyttet definitionen (2.97) på det skalære produkt samt regnereglen (2.98). Åbenbart fremkommer egenværdien $\lambda = 0$ hvis og kun hvis, at $\hat{a}|\lambda\rangle = 0$.

2. Dernæst vises, at hvis $|\lambda\rangle$ er en egentilstand, så er $|\lambda - 1\rangle$ det også, med mindre $\lambda = 0$. Dette følger af ombytningsrelationen (2.91) i forbindelse med egenværdiligningen (2.100), idet

$$\hat{N}\hat{a}|\lambda\rangle = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|\lambda\rangle = (\lambda - 1)\hat{a}|\lambda\rangle, \tag{2.101}$$

der viser, at tilstanden $\hat{a}|\lambda\rangle$ er en egentilstand hørende til egenværdien $\lambda - 1$ og derfor må være proportional med $|\lambda - 1\rangle$, med mindre $\lambda = 0$.

3. Vi kan nu slutte, at rækken af egentilstande $|\lambda\rangle$, $|\lambda - 1\rangle$, $|\lambda - 2\rangle$ må bryde af nedadtil, da egenværdierne skal som vist under 2. skal være større end eller lig med nul. Den pågældende værdi af λ, for hvilken rækken af egentilstande brydes af, må netop være nul, da $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ virkende på den tilhørende egentilstand skal give nul. Vi har altså

$$\hat{a}|0\rangle = 0. \tag{2.102}$$

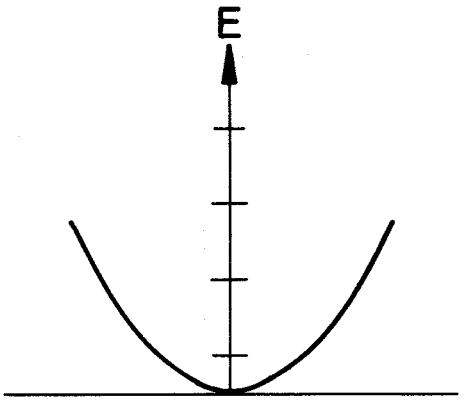
Der er kun én lineær uafhængig tilstandsvektor $|0\rangle$, der er løsning til (2.102), nemlig søjlevektoren, der er angivet nedenfor i (2.105).

4. Endelig kan vi slutte, at hvis $|\lambda\rangle$ er en egentilstand, så er $|\lambda + 1\rangle$ det også. Dette følger af ombytningsrelationen (2.93) i forbindelse med egenværdiligningen (2.100), idet

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle = (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|\lambda\rangle = (\lambda + 1)\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle.$$

Dette viser, at tilstanden $\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$ er en egentilstand hørende til egenværdien $\lambda + 1$ og derfor må være proportional med $|\lambda + 1\rangle$. Tilstanden $\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$ kan nemlig ikke være nul, da $\hat{a}\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle = (1 + \hat{a}^\dagger\hat{a})|\lambda\rangle = (\lambda + 1)|\lambda\rangle \neq 0$.

Vi har således vist, at egenværdierne af $\hat{N}$ udgøres af alle ikke-negative heltal. Det fremgår af de nedenfor fundne egenvektorer som (2.105) og (2.106) i forbindelse med udtrykket (2.104) for energimatricen, at der kun hører én lineært uafhængig tilstandsvektor $|\lambda\rangle$ til hver egenværdi.



Figur 2.3: Energiegenværdier for den harmoniske oscillator

Da egenværdierne for $\hat{N}$ hermed er fundet til at være de naturlige tal, følger det, at energiegenværdierne er givet ved

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \; n = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.103}$$

Den mindst mulige energi, der kaldes oscillatorens grundtilstandsenergi, er altså $\hbar\omega/2$. Spektret af egenværdier (2.103) er illustreret i fig. 2.3, hvor vi også har indtegnet den potentielle energi $V(x)$. Ud fra en klassisk betragtning forekommer det naturligvis ejendommeligt, at den lavest mulige energi ikke er nul. Dette er det første eksempel på betydningen af usikkerhedsrelationerne, der blev formuleret af Heisenberg i 1927, og som vil blive nærmere belyst i det følgende kapitel.

Lad os nu vende tilbage til matrixrepræsentationen af de fysiske størrelser. Ved at have fundet egenværdierne for energien har vi bestemt energimatricen, der er diagonal i den basis, der udgøres af energiegentilstandene. Matricen har uendelig dimension, da spektret (2.103) ikke er begrænset opadtil. Den er givet ved

$$\hat{H}/\hbar\omega : \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.104}$$

Egenvektorerne hørende til disse egenværdier har formen

$$|0\rangle : \begin{pmatrix} e^{i\phi_0} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{2.105}$$

hørende til den laveste egenværdi,

$$|1\rangle : \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\phi_1} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{2.106}$$

hørende til den næstlaveste etc. Her er faserne $\phi_0, \phi_1, \cdots$ vilkårlige reelle tal. Egenvektorerne ses at være normerede og ortogonale, idet

$$\langle m|n\rangle = \delta_{nm}. \tag{2.107}$$

Mens energimatricen (2.104) er på diagonalform, er matricerne svarende til $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$ ikke diagonale. Når vi virker med $\hat{a}^\dagger$ på en egentilstand $|n\rangle$ for energien, fremkommer tilstanden $|n+1\rangle$ gange en konstant c, altså $\hat{a}^\dagger|n\rangle = c|n+1\rangle$. Idet konstanten c vælges reel, gælder derfor

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = c^2. \tag{2.108}$$

For at bestemme c benytter vi, at det ifølge (2.87) gælder, at $\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$. Da $\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$, ser vi, at

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1). \tag{2.109}$$

Da c er valgt reel, kan vi slutte af (2.108) og (2.109), at $c = (n+1)^{\frac{1}{2}}$. Vi har altså

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \tag{2.110}$$

På ganske tilsvarende måde kan vi bestemme konstanten c' i relationen $\hat{a}|n\rangle = c'|n-1\rangle$ til at være $c' = \sqrt{n}$, idet vi udnytter, at $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n$. Vi har altså

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \tag{2.111}$$

Ved brug af (2.110-111) kan matricerne $\langle m|\hat{a}|n\rangle$ og $\langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle$ for henholdsvis $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$ nu nedskrives

$$\hat{a}: \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.112}$$

og

$$\hat{a}^\dagger: \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.113}$$

De to matricer (2.112-113) er hinandens transponerede. De tilfredsstiller altså ikke betingelsen (2.78) og har som følge deraf ikke nødvendigvis reelle egenværdier. Det ses i øvrigt ud fra (2.112), at løsningen til (2.102) netop er givet ved (2.105). Man kalder $\hat{a}^\dagger$ og $\hat{a}$ for skabelses- og annihilationsoperatorer, da de henholdsvis øger og mindsker antallet af energikvanter. Tilstanden (2.105) kan opfattes som en vakuumtilstand - en betegnelse, der i kvantefysikken benyttes i mange forskellige sammenhænge - da den ifølge (2.102) ikke indeholder nogen energikvanter. Skabelses- og annihilationsoperatorer som $\hat{a}^\dagger$ og $\hat{a}$ finder anvendelse overalt i kvantefysikken. Hvis den klassiske Hamiltonfunktion f. eks. foruden $p^2/2M + Kq^2/2$ indeholder et led proportionalt med q^4, vil energimatricen foruden (2.91) indeholde et led proportionalt med $(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^4$. Selv om det i dette tilfælde ikke er muligt at bringe energimatricen på diagonalform ved en enkel transformation, kan det være bekvemt at benytte egenskaberne ved skabelses- og annihilationsoperatorerne ved en tilnærmet behandling af problemet.

Ud fra (2.112-113) og relationerne (2.85-86), der udtrykker $\hat{p}$ og $\hat{q}$ ved $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$, kan ma-

tricerne for $\hat{q}$ og $\hat{p}$ umiddelbart nedskrives med resultatet

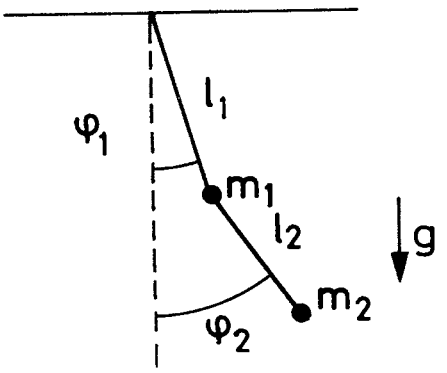
$$\hat{q}/(\hbar/2M\omega)^{\frac{1}{2}}: \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.114}$$

samt

$$\hat{p}/(M\omega\hbar/2)^{\frac{1}{2}}: \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.115}$$

Det ses, at (2.114-115) er hermiteske matricer, idet matricen for $\hat{q}$ er symmetrisk og reel, mens matricen for $\hat{p}$ er antisymmetrisk og rent imaginær, således at betingelsen (2.78) i begge tilfælde er tilfredsstillet.

Ifølge kvanteteorien fortolkes egenværdierne af en fysisk størrelse som de mulige resultater af en måling af denne. Det forudgående har vist, at energien af en harmonisk oscillator er kvantiseret, og at kvantets størrelse er $\hbar\omega$. For en klassisk tankegang er dette fuldkommen fremmed, og det er derfor ikke mærkeligt, at det krævede et omfattende grundlag af spektroskopiske iagttagelser, før skridtet fra Hamiltons ligninger til kvanteteorien kunne tages. Herudover ønsker vi naturligvis også at kunne udtale os om andre fysiske størrelser end netop energien. I det følgende kapitel vil vi diskutere partiklens sted og impuls. Ifølge ovenstående er hverken sted- eller impulsmatricen diagonal, og vi må derfor konkludere, at vores kvanteteoretiske beskrivelse foreløbigt ikke har givet os mulighed for at udtale os om andet end energien. Ved at overlejre tilstande svarende til forskellige energier er det imidlertid muligt at sammenligne den kvantemekaniske beskrivelse mere direkte med den klassiske. Det vil vise sig, at den klassiske bevægelse (2.2) fremkommer, når vi konstruerer tilstande, der er overlejringer (også kaldet superpositioner) af egentilstandene $|n\rangle$ for energien (afsnit 4.2).



Figur 2.4: To penduler

2.3 Opgaver

OPGAVE 2.1

Et matematisk pendul består af en masseløs stang (længde l), der er fastgjort i det ene endepunkt, mens der i det andet endepunkt er anbragt massen m. Stangens drejningsvinkel ud fra lodret betegnes med ϕ, mens tyngdeaccelerationen kaldes g.

a) Udtryk systemets Lagrangefunktion ved de opgivne konstanter og vinklen ϕ samt dennes afledede med hensyn til tiden.

b) Angiv bevægelsesligningen (2.16) for systemet.

c) Bestem et tilnærmet udtryk for Lagrangefunktionen, der er gyldigt for små udsving fra ligevægt, og angiv den tilhørende bevægelsesligning.

d) Vis, at den under c) fundne bevægelsesligning har løsninger, der varierer harmonisk i tiden, og udtryk frekvensen ved de opgivne konstanter.

OPGAVE 2.2

To matematiske penduler er ophængt som vist på fig. 2.4. De to stænger med længde l_1 og l_2 er masseløse, og bevægelsen af masserne m_1 og m_2 foregår i figurens plan. Tyngdeaccelerationen betegnes med g.

a) Udtryk systemets Lagrangefunktion ved de opgivne konstanter og vinklerne ϕ_1 og ϕ_2 samt disses afledede med hensyn til tiden.

b) Angiv bevægelsesligningerne (2.16) for systemet.

c) Bestem et tilnærmet udtryk for Lagrangefunktionen, der er gyldigt for små udsving og angiv de tilhørende bevægelsesligninger.

d) Vis, at de under c) fundne bevægelsesligninger har løsninger, der varierer harmonisk i tiden, og udtryk de tilhørende frekvenser ved de opgivne konstanter.

OPGAVE 2.3

Find egenværdierne af følgende matricer

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \tag{2.116}$$

og

$$\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \tag{2.117}$$

samt

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 3i+1 \\ 0 & 0 & -3i+1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.118}$$

Er matricerne hermiteske?

OPGAVE 2.4

Vis, at Poisson-parentesen $\{L_x, L_y\}$ er lig med L_z, hvor $\vec{L}$ er baneimpulsmomentet $\vec{r} \times \vec{p}$ for en partikel, der bevæger sig i tre dimensioner. Begrund, at $\{L_y, L_z\}$ er lig med L_x.

OPGAVE 2.5

Angiv den kompleks-konjugerede matrix A^*_{ij} for hver af de følgende matricer A_{ij}.

1.
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

2.
$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

3.
$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix}$$

4.
$$\begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & e^{-i\pi/4} \\ 1 & -1 \\ e^{-i\pi/4} & 3-4i \end{pmatrix}$$

5.
$$\begin{pmatrix} i & i^2 & i^3 & i^4 & i^5 & i^6 \end{pmatrix}$$

OPGAVE 2.6

Angiv den transponerede, den kompleks-konjugerede og den hermitesk konjugerede matrix for hver af de følgende matricer A_{ij}.

1.

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

2.

$$\begin{pmatrix} 0 & i \end{pmatrix}$$

3.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2i & 3 \\ -1 & 7 & 4i \end{pmatrix}$$

4.

$$\begin{pmatrix} i & 0 & i \\ 0 & i & 0 \\ i & 0 & i \end{pmatrix}$$

5.

$$\begin{pmatrix} 0 & i & 0 & i \\ -i & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & i \\ -i & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

OPGAVE 2.7

Angiv bra-vektoren $\langle n|$ hørende til hver af de følgende ket-vektorer $|n\rangle$.

1.

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

2.

$$\begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}$$

3.

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

4.

$$\begin{pmatrix} e^{i\pi/4}/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ e^{-i\pi/4}/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

5.

$$\begin{pmatrix} i/2 \\ i/2 \\ i/2 \\ -i/2 \end{pmatrix}$$

OPGAVE 2.8

Find $\langle m|n\rangle$ og $|m\rangle\langle n|$ for hvert af de følgende par af tilstande $|m\rangle$ og $|n\rangle$.

1.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

3.

$$\begin{pmatrix} i \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} i \\ 0 \end{pmatrix}$$

4.

$$\begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ -i \end{pmatrix}$$

5.

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

6.

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

OPGAVE 2.9

Find $\sum_n |n\rangle\langle n|$ for hvert af de følgende sæt af tilstande $|n\rangle$.

1.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

2.

$$\begin{pmatrix} i \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ -i \end{pmatrix}$$

3.

$$\begin{pmatrix} i/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

4.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

5.

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ -2/\sqrt{6} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

OPGAVE 2.10

Find AB og BA samt summen $AB + BA$ og differensen $AB - BA$ for hvert af følgende par matricer A, B.

1.

$$\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

2.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

3.

$$\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

I hver af de to følgende spørgsmål 4. og 5. kombineres matricerne parvist som i spørgsmål 1-3.

4.

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

5.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

3 Sandsynlighedsamplituder

I det forudgående kapitel har vi indført det for kvantemekanikken centrale tilstandsbegreb og bestemt de mulige resultater af en måling af energien for en harmonisk oscillator. Hver tilstand $|n\rangle$ blev mærket med et kvantetal n, der via $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ angav resultatet E_n af en måling af energien i den pågældende tilstand. Tilstanden $|n\rangle$ blev repræsenteret ved en søjlevektor, der havde nul på alle pladser bortset fra nummer $n+1$ fra oven, idet kvantetallet n antog værdierne $0, 1, 2, \cdots$.

I dette kapitel vil vi fortsat benytte den harmoniske oscillator som et konkret eksempel, men det understreges, at begreber som tilstand og sandsynlighedsamplitude, der er emne for dette kapitel, er grundlæggende for kvanteteorien og dens anvendelser, hvadenten disse vedrører faste stoffer, atomer, molekyler, kerner eller elementarpartikler. Kvantetallet n for den harmoniske oscillator skal i almindelighed erstattes af en samling af kvantetal knyttet til forskellige fysiske størrelser, der kan måles samtidig. At de pågældende fysiske størrelser kan måles samtidig, indebærer at det er muligt at bestemme en basis, i hvilken de tilhørende matricer er på diagonalform. Inden vi diskuterer andre fysiske størrelser som sted og impuls, skal vi indføre det operatorbegreb, der blev omtalt i forrige kapitel, og se hvorledes kvanteteorien kan formuleres ved at knytte lineære operatorer til de forskellige fysiske størrelser.

3.1 Lineære operatorer

Udgangspunktet for den matematiske formulering af kvantemekanikken ved brug af operatorer er teorien for Hilbert rum. I en indledning til kvantemekanikken er det ikke nødvendigt at gå nøjere ind på denne teori. Vi indskrænker os derfor til at opsummere de vigtigste egenskaber ved Hilbert rum og omtale nogle elementære resultater vedrørende lineære operatorer.

Et Hilbert rum $\mathcal{H}$ er et komplekst vektorrum, om hvilket det gælder, at der foreligger et indre produkt $\langle\cdot|\cdot\rangle$, der opfylder følgende fire betingelser (f, g og h angiver elementer i vektorrummet),

$$(i) \qquad \langle f|f\rangle \geq 0, \tag{3.1}$$

idet lighedstegnet kun gælder, hvis f er nul-elementet,

$$(ii) \qquad \langle f|g+h\rangle = \langle f|g\rangle + \langle f|h\rangle, \tag{3.2}$$

samt

$$(iii) \qquad \langle f|\alpha g\rangle = \alpha\langle f|g\rangle, \tag{3.3}$$

hvor α angiver et vilkårligt komplekst tal, og

$$(iv) \qquad \langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^* \tag{3.4}$$

Desuden skal $\mathcal{H}$ være fuldstændigt, det vil sige, at enhver Cauchy-følge er konvergent[1].

Som man ser af ovenstående, giver disse egenskaber grundlag for at indføre en norm $||f||$ ved definitionen

$$||f|| = \langle f|f\rangle^{\frac{1}{2}}. \tag{3.5}$$

Eksistensen af en sådan norm gør det muligt at pålægge betingelser svarende til ortonormeringsrelationerne (2.107) for den harmoniske oscillator.

Lineære operatorer på Hilbert rum defineres som lineære afbildninger af et Hilbert rum $\mathcal{H}$ på et andet $\mathcal{H}'$ (der eventuelt kan være identisk med $\mathcal{H}$). I dette afsnit skal vi især interessere os for hermiteske operatorer $\hat{L}$, der tilfredsstiller[2]

$$\langle f|\hat{L}g\rangle = \langle \hat{L}f|g\rangle. \tag{3.6}$$

For hermiteske operatorer gælder den vigtige sætning, som vi nu skal vise, at deres egenværdier er reelle, d.v.s. at egenværdiligningen

$$\hat{L}f = \lambda f \tag{3.7}$$

kun har løsninger for reelle egenværdier λ. Dette følger af

$$\langle f|\hat{L}f\rangle = \lambda\langle f|f\rangle, \tag{3.8}$$

[1] Den anvendte notation for det indre produkt er udbredt i fysikken. I den matematiske analyse bruges $\langle\cdot,\cdot\rangle$, og man ser også $(\cdot,\cdot)$ benyttet. Bemærk, at $\langle\cdot|\cdot\rangle$ er lineær i anden variabel og konjugeret lineær i første variabel, som det er sædvane i fysikken.

[2] I den matematiske analyse kaldes sådanne operatorer symmetriske.

og

$$\langle \hat{L}f|f\rangle = \lambda^*\langle f|f\rangle. \tag{3.9}$$

På grund af hermiticiteten (3.6) er udtrykkene (3.8) og (3.9) imidlertid identiske, og da $\langle f|f\rangle$ kun er nul for $f = 0$, må λ være lig med λ^*, og egenværdierne dermed reelle.

Hvis λ_1 og λ_2 betegner to forskellige egenværdier hørende til den hermiteske operator $\hat{L}$, svarende til

$$\hat{L}f_1 = \lambda_1 f_1 \tag{3.10}$$

og

$$\hat{L}f_2 = \lambda_2 f_2, \tag{3.11}$$

er f_1 og f_2 ortogonale i den forstand, at

$$\langle f_1|f_2\rangle = 0. \tag{3.12}$$

Dette indses ved at benytte, at $\hat{L}$ er hermitesk, $\langle f_1|\hat{L}f_2\rangle = \langle \hat{L}f_1|f_2\rangle$, der medfører, at $\lambda_2\langle f_1|f_2\rangle = \lambda_1\langle f_1|f_2\rangle$, eller

$$(\lambda_2 - \lambda_1)\langle f_1|f_2\rangle = 0. \tag{3.13}$$

Der gælder en vigtig sætning for ombyttelige operatorer: **Hvis to lineære operatorer er ombyttelige,**

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = 0, \tag{3.14}$$

er det muligt at finde fælles egenfunktioner. Dette vises nemmest i det tilfælde, hvor egenværdierne ikke er udartede, det vil sige, at der kun findes én lineært uafhængig løsning til (3.7) for en given værdi af λ, men det følgende bevis for dette specielle tilfælde kan let generaliseres til at gælde også for udartede egenværdier. Idet

$$\hat{L}_1 f = \lambda_1 f \tag{3.15}$$

fås

$$\hat{L}_1\hat{L}_2 f = \hat{L}_2\hat{L}_1 f = \lambda_1\hat{L}_2 f, \tag{3.16}$$

som viser, at $\hat{L}_2 f$ må være proportional med f,

$$\hat{L}_2 f = \lambda_2 f. \tag{3.17}$$

Omvendt ses det, at hvis samtlige egenfunktioner er fælles for de to operatorer, vil de være indbyrdes ombyttelige. Dette kan indses ved følgende ræsonnement: Lad f være en fælles egenfunktion for L_1 og L_2. Ifølge antagelsen gælder det, at $\hat{L}_1\hat{L}_2 f = \lambda_1\lambda_2 f$ og $\hat{L}_2\hat{L}_1 f = \lambda_2\lambda_1 f$. Da en vilkårlig funktion ψ kan udvikles på det fuldstændige sæt af egenfunktioner for $\hat{L}_1$ og $\hat{L}_2$, er $(\hat{L}_1\hat{L}_2 - \hat{L}_2\hat{L}_1)\psi = 0$ og derfor $[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = 0$.

Kommentar. Hvis egenværdierne er udartede, kan ovenstående bevis generaliseres som følger: Lad f_i være én af de i alt s lineært uafhængige egenfunktioner for $\hat{L}_1$ hørende til egenværdien λ_1 ($i = 1, \ldots, s$). Ifølge antagelsen er

$$\hat{L}_1 f_i = \lambda_1 f_i$$

samt

$$\hat{L}_1\hat{L}_2 f_i = \hat{L}_2\hat{L}_1 f_i = \lambda_1\hat{L}_2 f_i,$$

svarende til (3.15-16) ovenfor. Vi kan nu slutte, at $\hat{L}_2 f_i$ kan udtrykkes ved en linearkombination af de s funktioner f_i, og vil derfor søge at bestemme en linearkombination ψ af de s funktioner $f_1, \ldots, f_s$, $\psi = \sum_{j=1}^{s} c_j f_j$ således at

$$\hat{L}_2\psi = \lambda_2\psi = \lambda_2 \sum_{j=1}^{s} c_j f_j.$$

Idet de s funktioner f_j er valgt til at være ortonormale, kan vi finde løsninger til ovenstående ligning ved at sætte determinanten af matricen

$$\langle f_k|\hat{L}_2 f_j\rangle - \lambda_2\delta_{kj}$$

lig med nul. Hermed har vi vist, at det er muligt at finde fælles egenfunktioner. Den omvendte sætning, at L_1 og L_2 må kommutere, hvis de har samtlige egenfunktioner fælles, forløber som i det ikke-udartede tilfælde.

I det følgende betegner f_i en fuldstændig ortonormal basis i den forstand, at

$$\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}, \tag{3.18}$$

mens det for et vilkårligt element ψ gælder, at

$$\psi = \sum_i c_i f_i. \tag{3.19}$$

Koefficienterne c_i bestemmes ved at danne det indre produkt af f_i og ψ og udnytte (3.18). Heraf fås

$$c_i = \langle f_i|\psi\rangle. \tag{3.20}$$

Hvis ψ er normeret, $||\psi|| = 1$, må summen af absolutkvadraterne på c_i være 1,

$$\sum_i |c_i|^2 = 1. \tag{3.21}$$

I operatorformuleringen af kvantemekanikken knyttes de fysiske størrelser som energi, impulsmoment etc. til bestemte lineære, hermiteske operatorer. Egenværdierne for disse repræsenterer de mulige resultater af en måling af den pågældende fysiske størrelse. Hvis ψ betegner en tilstand, hvori energien har en veldefineret værdi E, bestemmes denne ved at løse egenværdiligningen

$$\hat{H}\psi = E\psi, \tag{3.22}$$

der således modsvarer (2.94) i matrixformuleringen. Vi ser også, at matrixformuleringen følger af ovenstående ved valg af en bestemt basis som i (3.19), idet (3.22) i så fald resulterer i

$$\sum_j c_j \langle f_i|\hat{H}f_j\rangle = Ec_i \tag{3.23}$$

under brug af (3.18).

Kommentar. Rigtigheden af (3.23) indses ved at indsætte (3.19) i (3.22), idet summationsindex i omdøbes til j. Ved at tage det indre produkt af hver side med f_j fås

$$\sum_j \langle f_i|\hat{H}c_j f_j\rangle = \sum_j \langle f_i|Ec_j f_j\rangle,$$

der ses at give (3.23), når ortonormalitetsbetingelsen (3.18) udnyttes.

I stedet for $\langle f_i|\hat{H}f_j\rangle$ skriver man i reglen $\langle f_i|\hat{H}|f_j\rangle$ eller mere kompakt $\langle i|\hat{H}|j\rangle$, evt. $\langle i|H|j\rangle$, idet i på entydig måde nummererer egenværdierne. For den harmoniske oscillator kan det vises, at den valgte basis, der udgøres af (2.105-106) etc., er fuldstændig.

Allerede i forrige kapitel omtalte vi, hvorledes valget af operatoren (2.75) for en partikels impuls er i overensstemmelse med ombytningsrelationen (2.71). For en partikel, der bevæger sig i tre dimensioner, er impulsoperatoren altså

$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right), \tag{3.24}$$

mens energioperatoren, som kaldes Hamiltonoperatoren, er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \tag{3.25}$$

for en partikel med masse m og potentiel energi $V(\vec{r})$. Løsningen ψ til egenværdiligningen (3.22) er en funktion af $\vec{r}$ og betegnes som partiklens bølgefunktion. Hamiltonoperatoren fremkommer altså ved i den klassiske Hamiltonfunktion at erstatte $\vec{p}$ med $\hbar\nabla/i$. Den fremkomne egenværdiligning (3.22) kaldes for den tidsuafhængige Schrödingerligning.

3.1.1 Et Hilbert rum

Egenfunktionerne for Hamiltonoperatoren hørende til den éndimensionale harmoniske oscillator udgør et Hilbert rum. Idet Hamiltonfunktionen er

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}Kx^2, \tag{3.26}$$

bliver Hamiltonoperatoren givet ved

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2. \tag{3.27}$$

Egenværdiligningen (3.22) for energien er da

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2\psi = E\psi. \tag{3.28}$$

Vi vil forlange om ψ, at den er kvadratisk integrabel, d.v.s. at

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi|^2 < \infty. \tag{3.29}$$

Det indre produkt er i dette tilfælde

$$\langle f|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x). \tag{3.30}$$

Ved at benytte at de normerbare bølgefunktioner forsvinder i det uendelige, er det let at vise ved brug af partiel integration, at operatoren d^2/dx^2 og dermed også H er hermitesk, således at egenværdierne er reelle.

Egenværdiproblemet for den harmoniske oscillator kan løses ved potensrækkemetoden, der er en almindeligt benyttet metode til løsning af differentialligninger. I dette afsnit skal vi blot diskutere nogle simple løsninger til egenværdiligningen (3.28), mens den generelle løsning ved brug af potensrækkemetoden er emnet for opgave 3.1.

Først bringer vi (3.28) på dimensionsløs form ved at indføre variablen $\xi = x/a$, hvor a er $\sqrt{\hbar/M\omega}$. Herved bliver differentialligningen

$$u'' + \lambda u - \xi^2 u = 0, \tag{3.31}$$

hvor u er den søgte løsning, og $'$ angiver den afledede med hensyn til ξ. Den dimensionsløse konstant λ er givet ved $\lambda = 2E/\hbar\omega$, hvor E er den søgte energiegenværdi.

Det er nærliggende først at undersøge løsningerne til differentialligningen for store $|\xi|$. Det ses, at (3.31) er tilfredsstillet af funktioner af typen

$$u(\xi) = \xi^p e^{\pm\xi^2/2}, \tag{3.32}$$

hvor p er en vilkårlig eksponent, så længe man kun medtager de dominerende led i differentialligningen.

Resultatet (3.32) i forbindelse med kravet om, at bølgefunktionen skal være kvadratisk integrabel, gør det naturligt at lede efter løsninger af typen

$$u = H(\xi)e^{-\xi^2/2}, \tag{3.33}$$

hvor H er et polynomium i ξ. Ved at indsætte (3.33) i (3.31) ses det, at H skal tilfredsstille ligningen

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0. \tag{3.34}$$

Det fremgår af (3.34), at ligningen tilfredsstilles af H lig med en konstant, forudsat at λ er lig med 1. Den konstante værdi af H kan vi uden indskrænkning vælge til at være 1, da bølgefunktionen under alle omstændigheder skal normeres. Vi har altså løsningen

$$H = 1,\ \lambda = 1, \tag{3.35}$$

hvortil svarer energien $\hbar\omega/2$. Endvidere ses (3.34) at have løsningen $H = \xi$, forudsat at λ er lig med 3, altså

$$H = \xi,\ \lambda = 3, \tag{3.36}$$

svarende til energien $3\hbar\omega/2$. Ved at gætte på funktioner af det simplest mulige udseende har vi således fundet løsninger hørende til det laveste og næstlaveste energiniveau for den harmoniske oscillator, jvf. (2.103).

Forsøger vi nu at gætte på en løsning, der er proportional med ξ^2, ser vi imidlertid, at ligningen ikke længere er opfyldt, idet den anden afledede af ξ^2 er en konstant, mens andet og tredje led i (3.34) giver bidrag, der er proportionale med ξ^2, uanset værdien af λ. Hvis vi derimod forsøger med $H = \xi^2 + c$, hvor c er en konstant, kan (3.34) tilfredsstilles, hvis $-4 + (\lambda - 1) = 0$ og $2 + (\lambda - 1)c = 0$, svarende til løsningen

$$H = \xi^2 - \frac{1}{2}, \ \lambda = 5. \tag{3.37}$$

Energien hørende til denne løsning er altså $5\hbar\omega/2$. Det fremgår, at denne løsning hører til det tredjelaveste energiniveau for den harmoniske oscillator[3].

I opgave 3.1 bestemmes samtlige normerbare løsninger, der udgøres af funktionerne

$$u_n = N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \tag{3.38}$$

med tilhørende egenværdier

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \ n = 0, 1, 2 \cdots. \tag{3.39}$$

Her er H_n de såkaldte Hermite-polynomier, der er defineret ved

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

mens normeringskonstanterne N_n er givet ved

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi} 2^n n!}}.$$

Hermite-polynomierne tilfredsstiller rekursionsformlerne

$$H_n' = 2nH_{n-1} \tag{3.40}$$

og

$$H_{n+1} - 2\xi H_n + 2nH_{n-1} = 0. \tag{3.41}$$

[3]I stedet for blot at gætte på løsninger kunne vi have udnyttet vores viden fra kapitel 2 og indføre operatoren $\hat{a}^\dagger = (\xi - d/d\xi)/\sqrt{2}$ svarende til (2.84). Ved at virke med denne operator n gange på den (unormerede) grundtilstandsbølgefunktion $\exp(-\xi^2/2)$ fremkommer en løsning svarende til energiegenværdien $(n + 1/2)\hbar\omega$. Specielt svarer (3.36) og (3.37) til henholdsvis $n = 1$ og $n = 2$.

$$u_0 = N_0 e^{-\xi^2/2}, \qquad N_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}}$$

$$u_1 = N_1 2\xi e^{-\xi^2/2}, \qquad N_1 = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2a}}$$

$$u_2 = N_2(4\xi^2 - 2)e^{-\xi^2/2}, \qquad N_2 = \frac{1}{\pi^{1/4}2\sqrt{2a}}$$

$$u_3 = N_3(8\xi^3 - 12\xi)e^{-\xi^2/2}, \qquad N_3 = \frac{1}{\pi^{1/4}4\sqrt{3a}}$$

$$u_4 = N_4(16\xi^4 - 48\xi^2 + 12)e^{-\xi^2/2}, \qquad N_4 = \frac{1}{\pi^{1/4}8\sqrt{6a}}$$

$$u_5 = N_5(32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi)e^{-\xi^2/2}, \qquad N_5 = \frac{1}{\pi^{1/4}16\sqrt{15a}}$$

$$u_6 = N_6(64\xi^6 - 480\xi^4 + 720\xi^2 - 120)e^{-\xi^2/2}, \qquad N_6 = \frac{1}{\pi^{1/4}96\sqrt{5a}}$$

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}, \qquad \omega = \sqrt{\frac{K}{M}}$$

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}Kx^2$$

Tabel 3.1: Energiegentilstande hørende til de syv laveste energiegenværdier ($n = 0, 1 \cdots, 6$) for den éndimensionale harmoniske oscillator med $\xi = x/a$.

Som det fremgår af ovenstående har vi eftervist, at H_0, H_1 og H_2 tilfredsstiller (3.34). De eksplicite udtryk for disse polynomier er $H_0 = 1$, $H_1 = 2\xi$ og $H_2 = 4\xi^2 - 2$, smlgn. (3.35-37).

For grundtilstanden er den normerede bølgefunktion

$$u_0(x) = (a\sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-x^2/2a^2}, \tag{3.42}$$

hvor a er den karakteristiske længde givet ved

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}. \tag{3.43}$$

På baggrund af dimensionsanalysen i kapitel 1 er det ikke overraskende, at vi genfinder den karakteristiske længde (1.44) i udtrykket for grundtilstandens bølgefunktion. Som vist i kapitel 1 er denne længde den eneste (på nær en numerisk konstant) der kan dannes ud fra konstanterne $\hbar$, M og K. Bølgefunktionen er normeret i overensstemmelse med

$$||u_n||^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |u_n(x)|^2 = 1. \tag{3.44}$$

Det er naturligvis altid muligt at multiplicere bølgefunktionen med en vilkårlig fasefaktor $e^{i\phi}$, så at normeringsbetingelsen stadig er opfyldt. Udtrykket (3.42) for grundtilstandsbølgefunktionen svarer til, at fasen ϕ er valgt til at være 0 modulo 2π.

Det kan vises, at funktionerne u_n udgør en fuldstændig basis i Hilbert rummet, idet en vilkårlig kvadratisk integrabel funktion $\psi(x)$, der er defineret på den reelle akse, kan udvikles på egenfunktionerne u_n,

$$\psi(x) = \sum_n a_n u_n. \tag{3.45}$$

Ved at benytte denne basis, kan egenværdiligningen (3.22) omdannes til en matrixligning af samme art som dem vi undersøgte i kapitel 2, idet

$$\hat{H} : H_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} dx u_m^* H u_n, \tag{3.46}$$

således at Schrödingerligningen (3.28) antager formen

$$\sum_n H_{mn} a_n = E a_m, \tag{3.47}$$

jvf. kommentaren til (3.23). Tilsvarende finder man matricer for $\hat{p}$ og $\hat{x}$ ud fra

$$\hat{p} : \int_{-\infty}^{\infty} dx u_m^* \frac{\hbar}{i} \frac{du_n}{dx} \tag{3.48}$$

og tilsvarende for x. Ved at benytte rekursionsformlerne (3.40-41) kan det eftervises, at de fremkomne matricer for impuls- og stedoperatoren bliver identiske med (2.114-115), jvf. opgave 3.4.

Som det fremgår af ovenstående udgøres det betragtede Hilbert rum af kvadratisk integrable funktioner. Egenfunktionerne for impulsoperatoren (3.24) er imidlertid plane bølger

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{3.49}$$

med tilhørende egenværdier

$$\hbar\vec{k}. \tag{3.50}$$

Disse funktioner er åbenbart ikke kvadratisk integrable, da absolutværdien af (3.49) er 1, således at integralet over hele rummet er uendeligt. Egenværdierne (3.50) ses at udgøre et kontinuum. Egenfunktionerne for impulsoperatoren kan derfor ikke tilhøre Hilbert rummet, da de ikke opfylder betingelserne (3.1-4). Det samme gælder egenfunktionerne for stedoperatoren. En tilfredsstillende matematisk diskussion af disse operatorer kræver anvendelse af distributionsteori. I praksis behandles sted- og impulsoperatorerne ofte på lige fod med operatorer, hvis spektrum er diskret. Baggrunden for dette er, at man ved anvendelserne af kvanteteorien ofte kan lade det betragtede system være indeholdt i et endeligt volumen. Ved brug af periodiske grænsebetingelser (jvf. kapitel 4) bliver egenværdierne for impulsoperatoren diskrete og tilstandene normerbare på sædvanlig måde. Alternativt kan man som i det følgende benytte den af Dirac indførte deltafunktion ved normeringen af sådanne tilstande. Når vi anvender betegnelser som $|\vec{k}\rangle$ for (3.49) og benytter den sædvanlige teori for Hilbert rum, skal det altså opfattes som udtryk for, at det i praksis normalt ikke fører til vanskeligheder, selvom det matematiske grundlag for denne fremgangsmåde kan være ufuldstændigt.

3.2 Middelværdi og fluktuation

Vi skal nu indføre begrebet sandsynlighedsamplitude ved at tage udgangspunkt i energiegentilstandene $|n\rangle$ for den harmoniske oscillator. Det følger af (2.110), at $|n\rangle = n^{-1/2}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle$, hvorfor de normerede egentilstande for Hamiltonoperatoren kan skrives på formen

$$|n\rangle = (n!)^{-1/2}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle. \tag{3.51}$$

Hvis den harmoniske oscillator befinder sig i tilstanden $|n\rangle$, er der altså vished for, at en måling af dens energi vil give resultatet $(n + 1/2)\hbar\omega$. Energien af den harmoniske oscillator er imidlertid ikke den eneste fysiske størrelse, der er observabel. Partiklens sted og impuls er, som vi har set i det foregående kapitel, repræsenteret ved ikke-diagonale matricer i den basis, der udgøres af egentilstandene (3.51). Åbenbart kan disse fysiske størrelser ikke tillægges nogen bestemt værdi i en tilstand $|n\rangle$. Hvis en måling af partiklens sted derimod vides at give et bestemt resultat x, angives systemets tilstand ved $|x\rangle$. Idet det antages, at energiegentilstandene udgør et fuldstændigt sæt, kan tilstanden $|x\rangle$ udvikles på disse,

$$|x\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|x\rangle |n\rangle, \tag{3.52}$$

svarende til udviklingen (3.19-20).

Udviklingskoefficienterne $\langle n|x\rangle$ kaldes for sandsynlighedsamplituder. Det er en grundlæggende antagelse i kvanteteorien, at sandsynligheden for at opnå et resultat mellem x og $x + dx$ ved en måling af partiklens sted, når systemet vides at befinde sig i tilstanden $|n\rangle$, er givet ved absolutkvadratet på sandsynlighedsamplituden, $|\langle n|x\rangle|^2$, gange dx eller

$$|\langle n|x\rangle|^2 dx. \tag{3.53}$$

Da der er sandsynlighed 1 (det vil sige vished) for at observere partiklen et eller andet sted, må betingelsen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\langle n|x\rangle|^2 = 1 \tag{3.54}$$

være opfyldt.

Sandsynlighedsamplituderne er foreløbig introduceret med et konkret eksempel for øje, men den anlagte fortolkning af udviklingskoefficienterne gælder uanset hvilke fysiske størrelser, vi har i tankerne. F. eks. kunne vi i ovenstående erstatte egenværdierne x for partiklens stedoperator $\hat{q}$ med p, egenværdierne af impulsoperatoren $\hat{p}$, og anlægge en tilsvarende fortolkning af udviklingskoefficienterne $\langle n|p\rangle$ som sandsynlighedsamplituder. Overgangen fra tilstande mærket med n til tilstande mærket med x eller til tilstande mærket med p kan opfattes som en transformation fra én basis i vektorrummet til en anden. Den nærmere begrundelse for fuldstændigheden af den valgte basis gives i den matematiske analyse. I det

følgende skal vi blot antage, at egentilstandene hørende til en given fysisk størrelse udgør et fuldstændigt sæt i den forstand, at en udvikling som (3.52) er mulig.

Vi skal nu angive et generelt udtryk for sandsynligheden for at observere en bestemt værdi af en given fysisk størrelse A. Lad os antage, at et system befinder sig i tilstanden $|\nu\rangle$. Den til A hørende operator antages kun at have diskrete egenværdier a. Sandsynligheden $P(a)$ for at observere en bestemt af disse er da

$$P(a) = |\langle a|\nu\rangle|^2.$$

Hvis egenværdierne a udgør et kontinuum, er $P(a)$ en sandsynlighedstæthed, om hvilken det gælder, at

$$P(a)da$$

angiver sandsynligheden for at observere en værdi mellem a og $a + da$. Da summen af sandsynlighederne skal være 1, må der i det diskrete tilfælde gælde at

$$\sum_a P(a) = 1.$$

Hvis egenværdierne udgør et kontinuum er den tilsvarende betingelse

$$\int daP(a) = 1.$$

Middelværdien eller forventningsværdien af den fysiske størrelse A i tilstanden $|\nu\rangle$ kan da skrives som

$$< A >= \sum_a P(a)a = \sum_a |\langle a|\nu\rangle|^2 a \tag{3.55}$$

i det tilfælde, hvor egenværdierne a udgør et diskret sæt. Er egenværdispektret helt (eller delvist) et kontinuum, skal summen over a omfatte en integration over den kontinuerte del af spektret, svarende til substitutionen $\sum_a \rightarrow \int da$.

Det er nu bekvemt at omforme udtrykket for middelværdien af A ved at udnytte, at enhedsoperatoren $\hat{I}$ generelt kan skrives som

$$\hat{I} = \sum_a |a\rangle\langle a|, \tag{3.56}$$

hvor summen løber over alle tilstande hørende til diskrete egenværdier (eventuelt suppleret med integration over et kontinuum), jvf. opgave 2.9[4]. Ved hjælp af (3.56) kan vi nu indse, at middelværdien $< A >$ generelt kan udtrykkes ved $\langle \nu | A | \nu \rangle$,

$$< A >= \sum_a |\langle a|\nu\rangle|^2 a = \sum_a \langle \nu|a\rangle\langle a|\nu\rangle a = \langle \nu|A|\nu\rangle. \tag{3.57}$$

Ved den sidste omformning har vi benyttet, at A er hermitesk, så at $a\langle a|\nu\rangle = \langle a|A|\nu\rangle$, i forbindelse med (3.56). I eksempel 3 nedenfor vil udtrykket (3.57) for middelværdien af en fysisk størrelse blive anvendt på den todimensionale harmoniske oscillator.

Tilsvarende er operatoren

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x|$$

en enhedsoperator. Vi vil nu udtrykke ombytningsrelationen (2.86) i en basis, der udgøres af tilstandene $|x\rangle$. For disse gælder ortonormeringsbetingelsen

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x), \tag{3.58}$$

hvor $\delta(x)$ er deltafunktionen. Relationen (3.58) generaliserer (2.107) til det tilfælde, at egenværdispektret er kontinuert. Deltafunktionen tilfredsstiller relationerne

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) = 1 \tag{3.59}$$

og

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(x) = f(0), \tag{3.60}$$

hvor $f(x)$ er en kontinuert funktion af x. Deltafunktionen kan opfattes som grænsen af en følge af funktioner, eksempelvis givet ved

$$\delta(x) = \lim_{x_0 \to 0} (x_0\sqrt{\pi})^{-1} e^{-x^2/x_0^2}, \tag{3.61}$$

[4]Vi illustrerer betydningen af (3.56) ved den éndimensionale harmoniske oscillator. I dette tilfælde er enhedsoperatoren

$$\hat{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|,$$

som kan eftervises ved at lade ligningens højre side virke på $|n'\rangle$ med resultatet

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|n'\rangle = |n'\rangle$$

i kraft af ortonormeringsbetingelsen (2.107).

hvor x_0 går mod nul gennem positive værdier. Det bemærkes, at integralet af Gaussfunktionen (3.61) er 1, uanset værdien af x_0. Vi ser altså, at egentilstanden $|x\rangle$ kan repræsenteres ved sandsynlighedsamplituden $\langle x'|x\rangle$, som er en deltafunktion af x'. Fysisk set svarer det til, at $|x\rangle$ er en tilstand, for hvilken det gælder, at en måling af partiklens sted med sikkerhed giver resultatet x.

3.2.1 Fourier-transformationen

Operatoren for impuls er i én dimension givet ved

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}. \tag{3.62}$$

Idet ψ_1 og ψ_2 betegner kvadratisk integrable funktioner, der forsvinder i det uendeligt fjerne, ses det ved partiel integration, at $\hat{p}$ er hermitesk,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_1)^*\psi_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi_1^*\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_2. \tag{3.63}$$

Det ses ligeledes ved partiel integration, at operatoren d^2/dx^2 er hermitesk, mens d/dx er anti-hermitesk, idet dens hermitesk konjugerede er lig med $-d/dx$.

Egenfunktionerne for $\hat{p}$ er

$$e^{ikx} \tag{3.64}$$

med tilhørende egenværdier $\hbar k$. Vi vil nu udvikle en vilkårlig bølgefunktion $\psi(x)$ på egenfunktionerne (3.64) for impulsoperatoren og skriver derfor

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk f(k)e^{ikx}. \tag{3.65}$$

Faktoren $1/\sqrt{2\pi}$ foran integraltegnet er medtaget for at kunne fortolke absolutkvadratet på $f(k)$ som en sandsynlighedstæthed, se (3.76) nedenfor. Man kalder f for den Fourier-transformerede af ψ. For at bestemme f vil vi danne udtrykket

$$F(k') = \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi(x)e^{-ik'x}. \tag{3.66}$$

Indsætter vi i dette ψ fra (3.65) og bytter om på integrationsordenen, ser vi, at højresiden af (3.66) indeholder funktionen $I(k-k')$, hvor

$$I(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iqx}. \tag{3.67}$$

Erstatter vi i (3.67) øvre og nedre grænse med henholdsvis L og $-L$, fås ved udregning

$$I(q) = \frac{2}{q} \sin qL. \tag{3.68}$$

Når L går mod uendelig, går $I(0)$ mod uendelig, idet $I(0) = 2L$. Samtidig ser vi, at det første nulpunkt i $I(q)$ for $q = \pi/L$ rykker ind mod punktet $q = 0$ ved denne grænseovergang. Arealet under kurven (3.68) er

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} dq I(q) = 2\pi. \tag{3.69}$$

Det ses, at arealet under $I(q)$ er uafhængigt af L. Det er hermed gjort plausibelt (men naturligvis ikke bevist i matematisk forstand), at funktionsfølgen (3.68) for L gående mod uendelig på nær konstanten 2π udgør en repræsentation af deltafunktionen. Da det for en kontinuert funktion $g(x)$ gælder, at

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy g(y)\delta(y - x), \tag{3.70}$$

har vi hermed vist, at funktionen $f(k)$ i (3.65) er $F(k)/\sqrt{2\pi}$ eller

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-ikx}. \tag{3.71}$$

Ligningerne (3.65) og (3.71) udgør Fouriers integralsætning.

Vi skal i det følgende se, hvorledes Fouriers integralsætning fremkommer ved at gå ud fra Fouriers rækkesætning og foretage en passende grænseovergang. Har vi f. eks. forelagt funktionen

$$g(x) = x \text{ for } -l < x < l, \tag{3.72}$$

bestemmer denne ved periodisk fortsættelse en funktion, om hvilken det gælder, at den er 1) periodisk med perioden $2l$ og 2) integrabel i periodeintervallet $-l \leq x \leq l$. For en sådan funktion gælder rækkesætningen

$$g(x) = \sum_n a_n e^{in\pi x/l} \tag{3.73}$$

hvor Fourier-koefficienterne a_n er givet ved

$$a_n = \frac{1}{2l} \int_{-l}^{l} dx g(x) e^{-in\pi x/l}. \tag{3.74}$$

Her gennemløber n alle hele tal, positive såvel som negative samt nul.

Den basis, hvorpå vi udvikler g, består altså af funktionsmængden $a_n e^{in\pi x/l}$. Funktioner hørende til forskellige n er ortogonale, idet

$$\int_{-l}^{l} dx e^{-im\pi x/l} e^{in\pi x/l} = 2l\delta_{mn}. \tag{3.75}$$

Vi kan eftervise gyldigheden af Fourier-rækkeudviklingen (3.73-74) ved at gange (3.73) med $e^{-im\pi x/l}$, integrere over x og benytte (3.75), hvorved højresiden af (3.73) bliver $2la_m$, i overensstemmelse med (3.73).

Fouriers rækkesætning gør det altså muligt ud fra en given funktion $f(x)$ at bestemme Fourier-koefficienterne a_n. For funktionen $f(x)$ givet i (3.72) ses Fourier-koefficienterne at blive

$$a_n = -\frac{i}{l}\int_0^l dx x \sin(n\pi x/l) = \frac{i(-1)^n l}{n\pi}, \qquad n \neq 0,$$
$$a_0 = 0, \tag{3.76}$$

svarende til rækkefremstillingen

$$g(x) = \frac{2l}{\pi}\left(\frac{\sin(\pi x/l)}{1} - \frac{\sin(2\pi x/l)}{2} + \frac{\sin(3\pi x/l)}{3}\cdots\right). \tag{3.77}$$

Vi foretager nu en grænseovergang, hvor vi lader periodicitetsintervallet $2l$ gå mod uendelig og erstatter summen over n med en integration ifølge forskriften $\sum_n \to (l/\pi)\int dk$, idet $k = \pi n/l$. Herved får vi

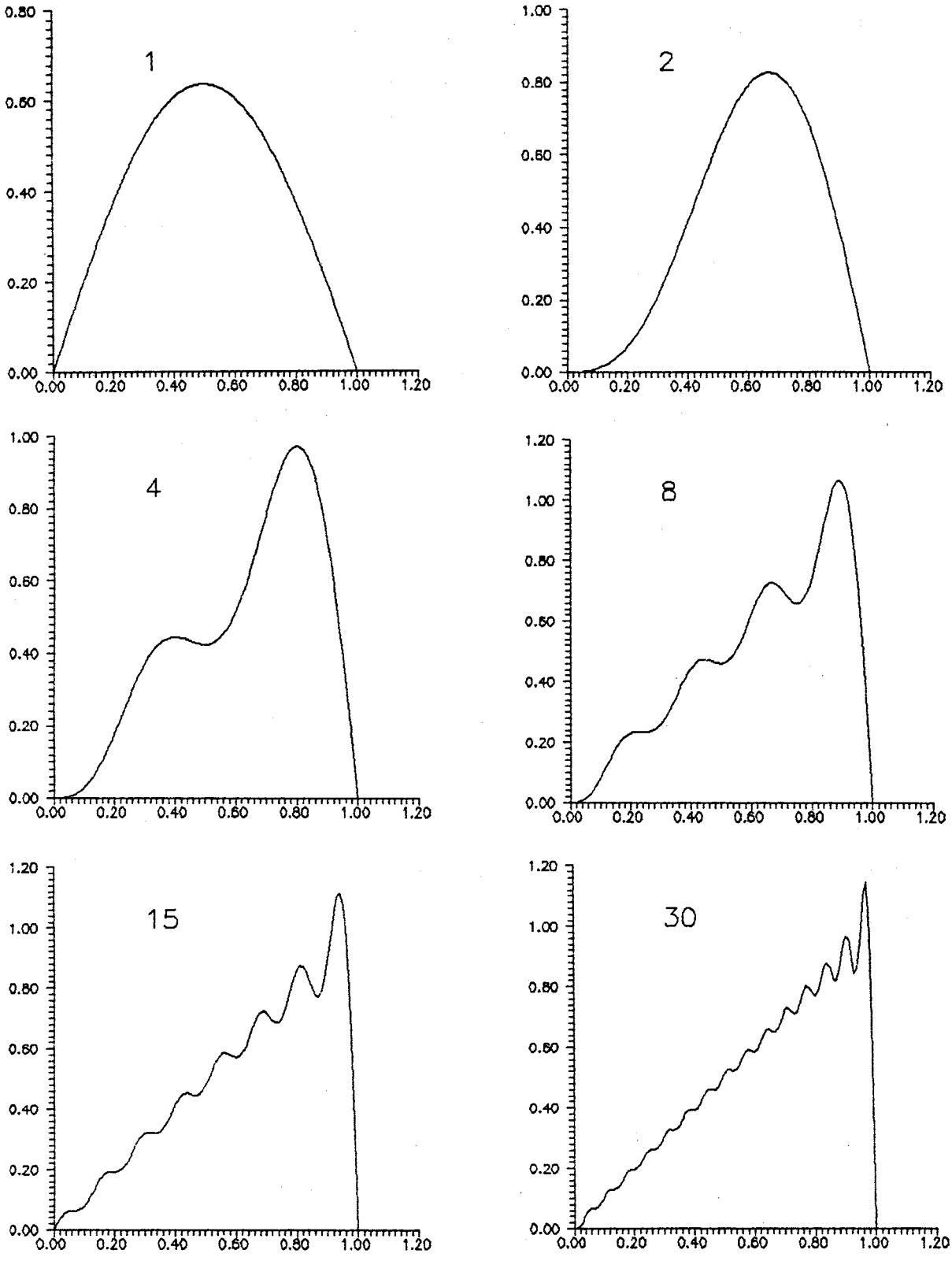
$$g(x) = \frac{l}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} a(k)$$

og

$$a(k) = \frac{1}{2l}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} g(x),$$

der er identisk med (3.65) og (3.71), når $g(x)$ identificeres med $\psi(x)$ og $a(k)$ med $f(k)\pi/l\sqrt{2\pi}$.

For at illustrere Fourier-rækkeudviklingen har vi på den følgende side vist resultatet af at medtage de n første led i Fourier-rækken (3.77), idet vi for nemheds skyld har sat længden l til 1. Antallet af medtagne led er anført på hver af de i alt seks figurer, svarende til $n = 1, 2, 4, 8, 15$ og 30 (sammenlign resultatet med funktionen (3.72) i intervallet $0 \leq x/l \leq 0$).



Figur 3.1: Fourier-rækkeudviklingen af funktionen (3.72)

Det følger af (3.65) og (3.71), at deltafunktionen $\delta(x)$ kan repræsenteres ved

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}, \tag{3.78}$$

som er et nyttigt resultat at huske.

Vi skal nu forsøge at bestemme $f(k)$ i det tilfælde, at ψ er grundtilstandsbølgefunktionen u_0 (se (3.42)) for den harmoniske oscillator. Ved hjælp af

$$-x^2/2a^2 - ikx = -(x + ia^2k)^2/2a^2 - a^2k^2/2 \tag{3.79}$$

kan integralet over x i (3.71) udføres ved at indføre den ny variable $x' = x + ia^2k$ med resultatet

$$f(k) = (\sqrt{\pi}/a)^{-1/2} e^{-k^2a^2/2}. \tag{3.80}$$

Den Fouriertransformerede af Gaussfunktionen (3.42) er altså selv en Gaussfunktion i variablen k. Dette er et specielt træk ved Gaussfunktionen. Ellers vil den Fouriertransformerede af en funktion have et andet udseende end den oprindelige funktion. Idet vi benytter den sædvanlige betegnelse $u_0(x)$ for bølgefunktionen hørende til grundtilstanden for den harmoniske oscillator, har vi hermed vist, at

$$u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) e^{ikx}, \tag{3.81}$$

hvor $f(k)$ er givet ved (3.74). Absolutkvadratet $|f(k)|^2$ på udviklingskoefficienterne tilfredsstiller normeringsbetingelsen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk |f(k)|^2 = 1, \tag{3.82}$$

i overensstemmelse med, at absolutkvadratet på f er sandsynlighedstætheden på k-aksen for at observere en bestemt værdi af k.

3.2.2 Usikkerhedsrelationerne

Den Fourier-transformerede $f(k)$ af bølgefunktionen $\psi(x)$ bestemmer middelværdien af $\hat{p} = (\hbar/i)d/dx$ ifølge

$$< p >= \int_{-\infty}^{\infty} dk |f(k)|^2 \hbar k, \tag{3.83}$$

idet $|f|^2 dk$ er sandsynligheden for at finde partiklen med bølgetal mellem k og $k + dk$. Det er ofte bekvemt at udtrykke middelværdien direkte ved bølgefunktionen $\psi(x)$. Indsætter vi $f(k)$ og $f^*(k)$ fra (3.71) i udtrykket (3.77) for middelværdien, fås

$$< p >= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^*(x') \psi(x) \hbar k e^{-ik(x-x')}. \tag{3.84}$$

Ved at benytte $ke^{-ik(x-x')} = i(d/dx)e^{-ik(x-x')}$ og partiel integration med hensyn til x, ses det, at middelværdien kan udtrykkes ved

$$< p >= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x), \tag{3.85}$$

efter at integrationen over k og x' er udført ved hjælp af (3.72).

Middelværdien af impulsen er altså i overensstemmelse med det generelle udtryk (3.57). Den findes ved at anbringe den tilhørende operator mellem ψ^* og ψ, således at den virker på ψ. Ganske tilsvarende ses det, at middelværdien af kvadratet på impulsen bliver givet ved

$$< p^2 >= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* (-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}) \psi, \tag{3.86}$$

mens middelværdien af energien er

$$< H >= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \hat{H} \psi, \tag{3.87}$$

hvor $\hat{H}$ er operatoren $-(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + V(x)$.

Ovenstående udtryk for middelværdien af impuls og energi kan uden videre generaliseres til tre dimensioner og til systemer bestående af flere partikler.

For en vilkårlig tilstand vil kvadratet på middelværdien af en fysisk størrelse A i almindelighed være forskelligt fra middelværdien af kvadratet på A, med mindre tilstanden netop er en egentilstand for operatoren hørende til den fysiske størrelse A. Man indfører det såkaldte fluktuationskvadrat Δ^2 ved definitionen

$$\Delta^2(A) = < (A - < A >)^2 >= < A^2 > - < A >^2, \tag{3.88}$$

hvor $< A >$ angiver middelværdien af den fysiske størrelse A i den forelagte tilstand. Det ses af (3.82), at Δ^2 altid er positiv eller nul. Specielt ses det, at Δ^2 er nul, hvis den pågældende tilstand er en egentilstand for operatoren hørende til A.

For at illustrere begreberne middelværdi og fluktuation kan vi betragte en partikel i grundtilstanden (3.42) for den harmoniske oscillator. Det ses umiddelbart, at $< x >= 0$, da bølgefunktionens kvadrat er en lige funktion af x. Fluktuationskvadratet $\Delta^2(x)$ bliver således identisk med $< x^2 >$, der for den pågældende tilstand findes at være $a^2/2$. Tilsvarende fås $\Delta^2(p) =< p^2 >= \hbar^2/2a^2$ ved enten at benytte den Fourier-transformerede (3.74) eller at anvende (3.79) med ψ givet ved (3.42). Det ses, at produktet af fluktuationskvadraterne er uafhængigt af a, idet

$$\Delta(x)\Delta(p) = \frac{\hbar}{2}. \tag{3.89}$$

Dette er et eksempel på Heisenbergs usikkerhedsrelationer. For en vilkårlig tilstand ψ kan fluktuationsproduktet $\Delta(x)\Delta(p)$ vises (opgave 3.13) at være større end eller lig med $\hbar/2$ som en konsekvens af ombytningsrelationen $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

EKSEMPEL 3. KVANTISERING AF DEN TODIMENSIONALE HARMONISKE OSCILLATOR

Den todimensionale harmoniske oscillator er velegnet til at illustrere kvanteteoriens begreber. Vi vil i det følgende beskæftige os med den isotrope harmoniske oscillator, d.v.s. det tilfælde hvor kraftkonstanterne hørende til bevægelse i x- og y-retningen er ens, lig med K. Idet partiklens masse kaldes M, er den klassiske angulære frekvens altså $\omega = \sqrt{K/M}$. Hamiltonoperatoren H er

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{p_y^2}{2M} + \frac{1}{2}Ky^2. \tag{3.90}$$

Vi indfører dimensionsløse variable x_1, x_2 og p_1, p_2 ved definitionerne

$$x = x_1\sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}};\ y = x_2\sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}, \tag{3.91}$$

og

$$p_x = p_1\sqrt{\hbar M\omega};\ p_y = p_2\sqrt{\hbar M\omega}. \tag{3.92}$$

Herved får Hamiltonoperatoren følgende udseende

$$H = \hbar\omega\frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 + p_1^2 + p_2^2). \tag{3.93}$$

Vi indfører nu skabelses- og annihilationsoperatorer på sædvanlig måde jvf. (2.85-86),

$$x_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_j + a_j^\dagger),\ j = 1, 2 \tag{3.94}$$

og

$$p_j = \frac{1}{\sqrt{2}}i(a_j^\dagger - a_j),\ j = 1, 2. \tag{3.95}$$

Bemærk, at to operatorer hørende til forskellige indices j er indbyrdes ombyttelige, altså $[a_1^\dagger, a_2] = 0$, da $[x_1, p_2] = [x_2, p_1] = 0$.

Partiklens impulsmoment vinkelret på xy-planen kaldes L. Udtrykt ved de oprindelige variable x, y og p_x, p_y er dette

$$L = xp_y - yp_x. \tag{3.96}$$

Vi indfører nu de dimensionsløse variable x_1, x_2 og p_1, p_2 i L, med resultatet

$$L = \hbar(x_1 p_2 - x_2 p_1). \tag{3.97}$$

Ved indsættelse af transformationen (3.94-95) fås

$$L = i\hbar(a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2). \tag{3.98}$$

Transformationen af Hamiltonoperatoren forløber analogt med det éndimensionale tilfælde, jvf. (2.89),

$$H = H_1 + H_2, \tag{3.99}$$

hvor

$$H_j = \hbar\omega(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2}). \tag{3.100}$$

Operatoren L er hverken ombyttelig med H_1 eller H_2, idet

$$[a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2, a_1^\dagger a_1] = a_1 a_2^\dagger - a_1^\dagger a_2 \tag{3.101}$$

og

$$[a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2, a_2^\dagger a_2] = -a_1 a_2^\dagger + a_1^\dagger a_2. \tag{3.102}$$

Derimod ses L at være ombyttelig med $H = H_1 + H_2$, idet summen af højresiderne i (3.101) og (3.102) er nul. Denne ombyttelighed svarer til, at impulsmomentet L klassisk set er en bevægelseskonstant.

Som vi tidligere har set (eksempel 2 i kapitel 2) er den klassiske bevægelse foruden af L og H karakteriseret af bevægelseskonstanterne M og N givet ved (2.66-67). De tilsvarende operatorer er ifølge (3.94-95)

$$M = \hbar(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) \tag{3.103}$$

og

$$N = \hbar(a_1 a_2^\dagger + a_2 a_1^\dagger). \tag{3.104}$$

For at mindske skrivearbejdet vil vi i det følgende udelukkende betragte dimensionsløse størrelser. Vi dividerer derfor H med $\hbar\omega$ og kalder $H/\hbar\omega$ for H (dette kan selvfølgeligt være risikabelt, hvis man ikke husker, hvad man har gjort. Vil man være sikker på ikke at kludre med enhederne, må man kalde den nye operator for H' eller lignende). På tilsvarende måde dividerer vi L, M og N med $\hbar$. De egenværdier og middelværdier, som angives nedenfor, skal da blot omsættes til energi og impulsmoment ved at gange med henholdsvis $\hbar\omega$ og $\hbar$.

Ud fra ovenstående udtryk for H, L, M og N ses det ved hjælp af

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \; [a_i, a_j] = 0, \tag{3.105}$$

at L, M og N er ombyttelige med H. Derimod er L, M og N ikke indbyrdes ombyttelige. Lad os som et eksempel bestemme kommutatoren $[L, N]$. Denne er givet ved

$$i[a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2, a_1 a_2^\dagger + a_2 a_1^\dagger] = -i2M \tag{3.106}$$

Man ser på denne måde, at L, M og N tilfredsstiller de samme ombytningsrelationer som Paulimatricerne (se (2.77)) og derfor ikke samtidig kan bringes på diagonal form.

Oscillatorens mulige tilstande kan angives ved talsættet (n_1, n_2), der fastlægger energiegenværdierne for hver af oscillatorerne,

$$E_{n_1} = n_1 + \frac{1}{2}, \; E_{n_2} = n_2 + \frac{1}{2}. \tag{3.107}$$

Den totale energi er

$$E = E_{n_1} + E_{n_2}. \tag{3.108}$$

En tilstand (egenvektor) hørende til egenværdierne (n_1, n_2) angives ved $|n_1 n_2\rangle$. Den kan opfattes som en søjlevektor, der har nul på alle pladser bortset fra den, der er tilordnet talsættet (n_1, n_2). På denne plads står der 1, hvis tilstanden er normeret (jvf. (2.97)). Når man tilordner hver plads i søjlevektoren et talsæt, er det naturligt at gå frem efter voksende totalenergi E. Vi starter derfor med $(0,0)$ og fortsætter med $(1,0)$, $(0,1)$ og videre med $(2,0)$, $(1,1)$ og $(0,2)$, etc. Bemærk, at der til en given værdi af E i almindelighed hører flere lineært uafhængige tilstandsvektorer. Man siger, at energiniveauerne er udartede, og udartningsgraden angiver antallet af lineært uafhængige tilstandsvektorer hørende til det betragtede niveau. Åbenbart er grundtilstanden ikke udartet, men det næstlaveste niveau har udartningsgraden 2, det følgende 3 etc. Matricen for den totale energi er diagonal i denne basis, med værdierne 1, 2, 2, 3, 3, 3, etc. ned langs diagonalen. Også matricen for M er diagonal i denne basis, med værdierne 0, 1, -1, 2, 0, -2 etc. (dens egenværdier er jo $n_1 - n_2$). Hverken L eller N er derimod diagonale, idet for eksempel $a_1 a_2^\dagger$ 'flytter' et energikvantum fra x- til y-oscillatoren, $a_1 a_2^\dagger |10\rangle = |01\rangle$, således at

$$L|10\rangle = i|01\rangle, \; L|01\rangle = -i|10\rangle. \tag{3.109}$$

Dette viser, at L-matricen i det betragtede underrum hørende til energiniveauet $E = 2$ er identisk med Paulimatricen σ_y, jvf. (2.76). Tilsvarende bliver N-matricen hørende til dette underrum lig med σ_x.

Vi kan nu spørge om følgende: Givet at partiklen befinder sig i tilstanden mærket med kvantetallene (n_1, n_2), hvad er da sandsynligheden for at observere en bestemt værdi af impulsmomentet L? Hvad er middelværdien af L, og hvad er fluktuationskvadratet? For at besvare disse spørgsmål udvikler vi tilstanden $|n_1 n_2\rangle$ på det fuldstændige sæt af basisvektorer $|nm\rangle$, der er fælles egenvektorer for totalenergien og impulsmomentet,

$$H|nm\rangle = (n+1)|nm\rangle, \; L|nm\rangle = m|nm\rangle. \tag{3.110}$$

Herved fås

$$|n_1 n_2\rangle = \sum_{n,m} \langle nm|n_1 n_2\rangle |nm\rangle. \tag{3.111}$$

Sandsynligheden for at observere energien $(n+1)$ og impulsmomentet m er derfor

$$|\langle nm|n_1 n_2\rangle|^2. \tag{3.112}$$

Hermed bliver middelværdien af L i den betragtede tilstand

$$< L >= \sum_{nm} |\langle nm|n_1 n_2\rangle|^2 m = \sum_{nm} \langle n_1 n_2|nm\rangle m \langle nm|n_1 n_2\rangle = \langle n_1 n_2|L|n_1 n_2\rangle. \tag{3.113}$$

Disse omformninger viser, hvorfor middelværdien i tilstanden specificeret ved (n_1, n_2) er givet ved matrixelementet $\langle n_1 n_2|L|n_1 n_2\rangle$. En tilsvarende omformning kan foretages for en vilkårlig hermitesk operator, forudsat at den valgte basis (her $|nm\rangle$) er fuldstændig (jvf. (3.57)). Middelværdien fremkommer som en vægtet sum af egenværdierne, idet hver egenværdi er vægtet med sandsynligheden for at observere den pågældende værdi i den forelagte tilstand. Går man i stedet ud fra matrixelementet $\langle n_1 n_2|L|n_1 n_2\rangle$, kan man indskyde enhedsoperatoren

$$1 = \sum_{nm} |nm\rangle\langle nm| \tag{3.114}$$

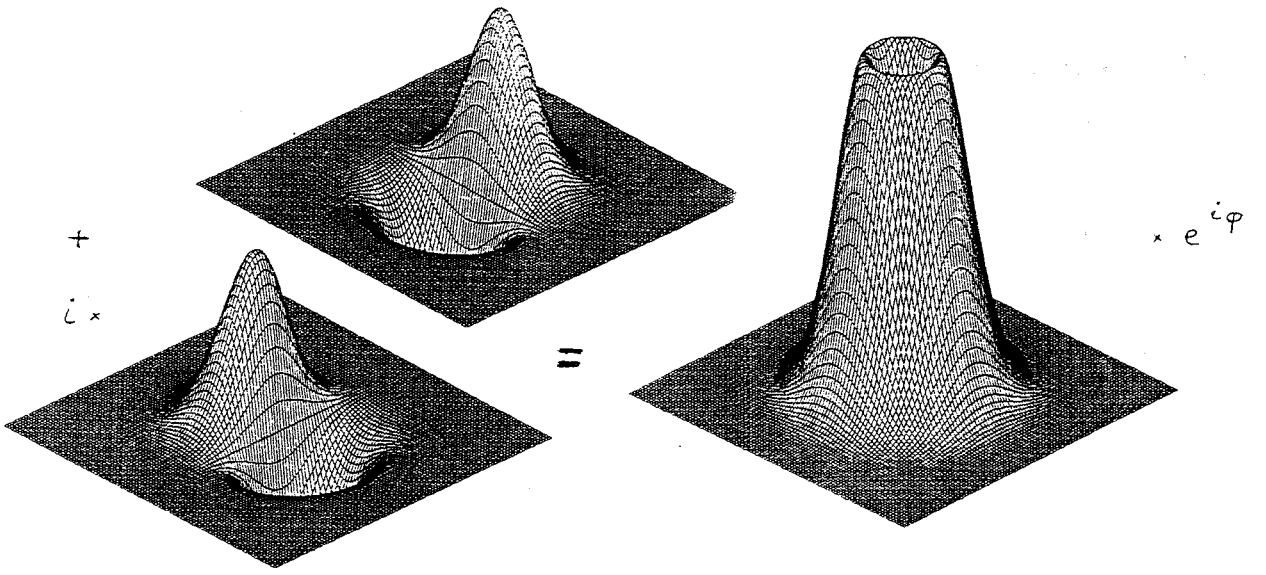
mellem L og $|n_1 n_2\rangle$ og se, at det er identisk med den vægtede sum af egenværdierne.

Lad os som et konkret eksempel betragte tilstanden $|10\rangle$, svarende til $n_1 = 1, n_2 = 0$. Enhver sandsynlighedsamplitude $\langle nm|10\rangle$ er nul, med mindre $n = n_1 + n_2 = 1$, da tilstandsvektorer hørende til forskellige energier er ortogonale. Amplituderne $\langle 1m|10\rangle$, hvor $m = \pm 1$, er derimod ikke nul. Matricen for L udtrykt i en basis bestående af de to tilstande $|10\rangle$ og $|01\rangle$ (svarende til henholdsvis $(n_1, n_2) = (1, 0)$ og $(n_1, n_2) = (0, 1)$) er givet ved Paulimatricen σ_y, jvf. (3.97), idet

$$\langle 10|L|10\rangle = \langle 01|L|01\rangle = 0, \quad \text{og} \quad \langle 10|L|01\rangle = -\langle 01|L|10\rangle = -i,$$

jvf. (3.109). Egenværdierne af matricen σ_y er ± 1 og linearkombinationerne $(|10\rangle \pm i|01\rangle)/\sqrt{2}$ er derfor de normerede egentilstande $|1 \pm 1\rangle$ for L hørende til egenværdierne ± 1. Det følger af dette, at $\langle 11|10\rangle = \langle 1-1|10\rangle = 1/\sqrt{2}$.

Vi ser altså, at sandsynligheden for at observere partiklen med impulsmoment 1 er 1/2, mens der er en lige så stor sandsynlighed (1/2) for at observere partiklen med impulsmoment -1, givet at systemet befinder sig i tilstanden svarende til $n_1 = 1, n_2 = 0$. Middelværdien af L i denne tilstand er derfor nul, mens fluktuationskvadratet $\Delta^2(L)$ ses at være 1. Ved at superponere tilstanden svarende til $n_1 = 1, n_2 = 0$ med tilstanden svarende til $n_1 = 0, n_2 = 1$ fremkommer tilstandene svarende til $n = 1, m = 1$ og $n = 1, m = -1$. På figur 3.1 er superpositionen anskueliggjort ved at tegne bølgefunktionerne $x_1 \exp[-(x_1^2 + x_2^2)/2]$ (svarende til $n_1 = 1, n_2 = 0$) og $x_2 \exp[-(x_1^2+x_2^2)/2]$ svarende til $n_1 = 0, n_2 = 1$. Som man kan eftervise, tilfredsstiller begge disse bølgefunktioner den tidsuafhængige Schrödingerligning med samme egenværdi 2 $(= 1+1)$ for den totale



Figur 3.1: Superposition af to tilstande

energi. Til højre på figuren er absolutværdien af superpositionen $|10\rangle + i|01\rangle$ tegnet op (målestoksforholdet vinkelret på $x_1 - x_2$ planen ændret). I denne tilstand er der sandsynligheden 1 (det vil sige sikkerhed) for at observere værdien 1 af partiklens impulsmoment.

3.3 Opgaver

OPGAVE 3.1

Egenværdiproblemet for den harmoniske oscillator kan løses ved potensrækkemetoden, der er en almindeligt brugt metode til løsning af differentialligninger.

Som diskuteret i afsnit 3.1.1 leder vi efter løsninger af typen

$$u = H(\xi)e^{-\xi^2/2}, \tag{3.115}$$

hvor H er et polynomium i ξ.

a) Vis, at H skal tilfredsstille ligningen

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0. \tag{3.116}$$

Ligningen (3.104) løses ved at udtrykke H som en potensrække

$$H(\xi) = \xi^s \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^\nu, \tag{3.117}$$

hvor s er større end eller lig med nul, og $a_0 \neq 0$. I følge (3.104) er ligningens venstre side og dermed også dens rækkeudvikling lig med nul, hvorfor koefficienten hørende til enhver potens af ξ i rækkeudviklingen af venstre side er nul.

b) Benyt denne betingelse til at vise, at $a_{\nu+2}/a_\nu \to 2/\nu$ for $\nu \to \infty$, med mindre rækken bryder af for en eller anden værdi af ν, og vis, at dette forhold også karakteriserer rækkeudviklingen af $\xi^p e^{\xi^2}$, hvor p er en vilkårlig eksponent. Begrund ud fra dette, at rækken (3.105) bryder af ved en endelig værdi af ν, hvis bølgefunktionen skal være kvadratisk integrabel.

c) Vis, at rækken (3.105) bryder af, hvis

$$\lambda = 2s + 2\nu + 1, \tag{3.118}$$

samt at betingelsen $a_0 \neq 0$ medfører, at s er enten 0 eller 1. Det følger derfor af (3.106), at λ må være et helt, ulige tal, $\lambda = 2n + 1$, således at koefficienterne $a_{n-s+2}, a_{n-s+4}, \cdots$ er lig med nul. Heraf ses, at $n - s$ må være lige, da rækken (3.105) indeholder led med lige ν. Da

rækken af led med ulige ν ikke bryder af i medfør af betingelsen (3.106), skal a_1 sættes lig med nul, hvorved koefficienterne hørende til ulige ν bliver nul.

d) Benyt resultatet af c) til at vise, at energiegenværdierne er givet ved (2.103) og bestem normerede bølgefunktioner hørende til $n = 0, 1$ og 2. Kvantetallet n er åbenbart den største værdi af $s + \nu$ i rækkeudviklingen af H. Det pågældende polynomium H givet ved (3.105) betegnes med H_n og kaldes et Hermite-polynomium (jvf. appendix A). Det ses, at H_n er en lige eller ulige funktion af ξ, alt efter som n er lige eller ulige.

OPGAVE 3.2

Vis ved brug af operatorerne $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$ i (2.83-84), at fluktuationsproduktet $\Delta(x)\Delta(p)$ for den harmoniske oscillator er $(n + \frac{1}{2})\hbar$ i tilstanden $|n\rangle$.

OPGAVE 3.3

Find for den todimensionale harmoniske oscillator middelværdien og fluktuationskvadratet for impulsmomentet i tilstanden $|02\rangle$ svarende til $n_1 = 0, n_2 = 2$.

OPGAVE 3.4

Find matricerne for operatorerne x og $(\hbar/i)d/dx$ ved hjælp af rekursionsformlerne (3.40-41) og sammenlign med (2.114-115).

OPGAVE 3.5

En partikel med masse M bevæger sig i et tredimensionalt harmonisk oscillatorpotential givet ved $V(x, y, z) = K(x^2 + y^2 + z^2)/2$.

a) Vis, at Hamiltonoperatoren kan skrives på formen

$$\hat{H} = \frac{3}{2}\hbar\omega + \sum_{i=1,2,3} \hbar\omega \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \tag{3.119}$$

og angiv ombytningsrelationerne mellem skabelses- og annihilationsoperatorerne $\hat{a}_i^\dagger$ og $\hat{a}_j$.

b) Find spektret og udartningsgraden af de tre laveste energiniveauer.

OPGAVE 3.6

En partikel med masse M bevæger sig i et tredimensionalt harmonisk oscillatorpotential givet ved $V(x,y,z) = K(x^2+y^2+z^2)/2$.

a) Vis, at Schrödingerligningen separerer i de cartesiske koordinater og skitser, hvorledes metoden fra opgave 3.1 kan anvendes til bestemmelse af energiniveauerne og de tilhørende bølgefunktioner. Angiv bølgefunktioner hørende til de to laveste energiniveauer.

OPGAVE 3.7

En partikel med masse M bevæger sig i potentialet givet ved

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 + Ax^4, \tag{3.120}$$

hvor A er en positiv konstant. Opgaven går ud på at bestemme middelværdien af Ax^4 i grundtilstanden for det harmoniske oscillatorpotential svarende til $A = 0$.

a) Benyt (2.110-111) til at udtrykke tilstanden $(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle$ som en superposition af tilstande $|n\rangle$.

b) Find ved hjælp af resultatet fra a) middelværdien af Ax^4 i tilstanden $|0\rangle$. Sammenlign med resultatet af dimensionsanalysen, opg. 1.12.

c) Eftervis, at man får samme resultat for middelværdien af x^4 ved at vægte x^4 med sandsynlighedstætheden hørende til oscillatorens grundtilstandsbølgefunktion og integrere det fremkomne udtryk over alle x.

OPGAVE 3.8

Find den Fourier-transformerede af funktionen

$$\psi(x) = e^{iqx} \text{ for } |x| < a, \ \psi(x) = 0 \text{ for } |x| > a. \tag{3.121}$$

Find ligeledes den Fourier-transformerede af funktionen

$$\psi(x) = \frac{a}{a^2+x^2}, \tag{3.122}$$

hvor a er en positiv konstant (brug integraltabel!).

OPGAVE 3.9

En partikel bevæger sig i én dimension. Til et bestemt tidspunkt er den beskrevet ved bølgefunktionen

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}} \frac{1}{a^2 + x^2} e^{ikx}. \tag{3.123}$$

a) Find impulsfordelingen svarende til denne tilstand og benyt denne til at finde middelværdien $< p >$ og fluktuationskvadratet $\Delta^2(p)$ (brug integraltabel!).

b) Udregn fluktuationsproduktet $\Delta(x)\Delta(p)$ og sammenlign med grundtilstanden for en harmonisk oscillator.

OPGAVE 3.10

Hamiltonoperatoren for en todimensional harmonisk oscillator er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}(K_1 x^2 + K_2 y^2), \tag{3.124}$$

hvor K_1 og K_2 er positive konstanter.

a) Vis, at løsningerne til Schrödingerligningen

$$H\psi = E\psi \tag{3.125}$$

kan separeres, idet de kan skrives som

$$\psi = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y) \tag{3.126}$$

hvor n_1 og n_2 kan antage alle mulige heltallige positive værdier eller nul. Vi har benyttet betegnelsen $\psi_n(x)$ for løsningen til Schrödingerligningen for en éndimensional harmonisk oscillator.

b) Vis ved at indsætte den separerede løsning (3.126) i (3.125), at energiegenværdierne er givet ved

$$E = \hbar\omega_1(n_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_2(n_2 + \frac{1}{2}), \tag{3.127}$$

hvor $n_1, n_2 = 0, 1, 2 \cdots$, og udtryk frekvenserne ω_1 og ω_2 ved de givne konstanter.

OPGAVE 3.11

Hamiltonoperatoren for en partikel, der bevæger sig i to dimensioner, er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}) + \frac{1}{2}K(x^2 + y^2) + Axy, \tag{3.128}$$

hvor K_1 og K_2 er positive konstanter, mens konstanten A kan være enten positiv eller negativ.

a) Benyt en koordinattransformation til at vise, at Hamiltonoperatoren kan opfattes som summen af Hamiltonoperatorerne for to uafhængige oscillatorer, forudsat at $|A| < K$. Vis, at energiegenværdierne under disse omstændigheder er givet ved

$$E = \hbar\omega_1(n_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_2(n_2 + \frac{1}{2}), \tag{3.129}$$

hvor $n_1, n_2 = 0, 1, 2 \cdots$. Udtryk frekvenserne ω_1 og ω_2 ved de givne konstanter og sammenlign med opgave 3.10.

OPGAVE 3.12

Vis, at funktionerne $u = \exp(\xi^2/2)$ og $u = \xi\exp(\xi^2/2)$ er løsninger til (3.31) og bestem de tilhørende værdier af λ. Har de fundne værdier af λ nogen fysisk betydning?

OPGAVE 3.13

I denne opgave skal vi vise, at fluktuationsproduktet $\Delta(A)\Delta(B)$ hørende til de hermiteske operatorer $\hat{A}$ og $\hat{B}$ ikke kan blive mindre end $\hbar/2$, hvis $\hat{A}$ og $\hat{B}$ tilfredsstiller ombytningsrelationerne

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar. \tag{3.130}$$

a) Vis at uligheden $\langle h, h\rangle \geq 0$, hvor

$$h = f - g\frac{\langle g, f\rangle}{\langle g, g\rangle} \tag{3.131}$$

medfører, at

$$\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2. \tag{3.132}$$

Vi indfører nu operatorerne $\hat{\alpha}$ og $\hat{\beta}$ ved definitionerne $\hat{\alpha}\psi = (\hat{A} - < A >)\psi$ og $\hat{\beta}\psi = (\hat{B} - < B >)\psi$, hvor ψ er en vilkårlig bølgefunktion.

b) Idet f identificeres med $\hat{\alpha}\psi$ og g med $\hat{\beta}\psi$, skal det vises ud fra (3.132), at

$$\Delta(A)\Delta(B) \geq |\langle\psi|\hat{\alpha}\hat{\beta}\psi\rangle|. \tag{3.133}$$

c) Benyt omskrivningen

$$\hat{\alpha}\hat{\beta} = \frac{1}{2}(\hat{\alpha}\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}) + \frac{1}{2}(\hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha}) \tag{3.134}$$

til at udlede

$$\Delta(A)\Delta(B) \geq \frac{\hbar}{2} \tag{3.135}$$

ud fra uligheden (3.133) [hjælp: bemærk, at operatoren $(\hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha})$ er en antihermitesk operator, idet den er lig med (-1) gange dens hermitesk konjugerede, og udnyt at $(\psi, (\hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha})\psi)$ som følge af dette er rent imaginær].

d) Diskuter, hvorledes uligheden (3.135) ændres, hvis højre side af (3.130) erstattes med en vilkårlig hermitesk operator $\hat{C}$.

Opgave 3.14

Angiv hvilke af følgende operatorer $\hat{O}$, der er lineære:

$$\hat{O}f = f(x) + x, \quad \hat{O}f = -d^2f/dx^2, \quad \hat{O}f = (df/dx)^2,$$

hvor f er en funktion af x.

OPGAVE 3.15

I det følgende indfører vi et indre produkt defineret ved

$$\langle f_i|f_j\rangle = \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi f_i^*(\theta,\phi) f_j(\theta,\phi),$$

svarende til, at θ er polarvinklen og ϕ azimuthalvinklen i et polært koordinatsystem. I opgaven skal vi finde en matrixfremstilling $A_{ij} = \langle f_i|Af_j\rangle$ af forskellige differentialoperatorer A.

1. Vi betragter funktionsrummet udspændt af de tre funktioner f_1, f_2 og f_3, der er proportionale med henholdsvis

$$\sin\theta e^{i\phi}, \quad \cos\theta, \quad \sin\theta e^{-i\phi}.$$

Bestem normeringskonstanter så at

$$\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$$

2. Find matricen hørende til operatoren

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

3. Find matricen hørende til operatoren A givet ved

$$A = e^{i\phi}(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}).$$

4. Find matricen hørende til operatoren B givet ved

$$B = e^{-i\phi}(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}).$$

5. Find matricen hørende til operatoren

$$\frac{1}{2}(A+B)$$

6. Find matricen hørende til operatoren

$$\frac{1}{2i}(A-B)$$

7. Find egenværdierne af de under 2., 5. og 6. bestemte matricer.

8. Angiv ombytningsrelationerne mellem de under 2. 5. og 6. bestemte matricer.

OPGAVE 3.16

Som i den foregående opgave benytter vi et indre produkt defineret ved

$$\langle g_i|g_j\rangle = \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi g_i^*(\theta,\phi) g_j(\theta,\phi),$$

svarende til, at θ er polarvinklen og ϕ azimuthalvinklen i et polært koordinatsystem. Vi skal finde en matrixfremstilling $A_{ij} =< g_i|Ag_j >$ af forskellige differentialoperatorer A med en anden basis end den, der er anvendt i opgave 3.15.

1. Vi betragter funktionsrummet udspændt af de tre funktioner g_1, g_2 og g_3, der er proportionale med henholdsvis

$$\sin\theta\cos\phi, \quad \sin\theta\sin\phi, \quad \cos\theta.$$

Bestem normeringskonstanter, så at

$$\langle g_i|g_j\rangle = \delta_{ij}$$

2. Find matricen hørende til operatoren

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

3. Find matricen hørende til operatoren A givet ved

$$A = e^{i\phi}(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}).$$

4. Find matricen hørende til operatoren B givet ved

$$B = e^{-i\phi}(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}).$$

5. Find matricen hørende til operatoren

$$\frac{1}{2}(A+B)$$

6. Find matricen hørende til operatoren

$$\frac{1}{2i}(A-B)$$

7. Find egenværdierne af de under 2., 5. og 6. bestemte matricer.

8. Angiv ombytningsrelationerne mellem de under 2., 5. og 6. bestemte matricer.

OPGAVE 3.17

I denne opgave skal vi benytte den i opgave 3.15 angivne basis til at bestemme matricer

$$\langle f_i|Ff_j\rangle = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi f_i^*(\theta,\phi)F(\theta,\phi)f_j(\theta,\phi),$$

hørende til forskellige størrelser $F(\theta,\phi)$.

1. Find matricen hørende til
$$\cos\theta$$
2. Find matricen hørende til
$$\cos^2\theta$$
3. Find matricen hørende til
$$\cos^3\theta$$
4. Find matricen hørende til
$$\sin\theta\sin\phi$$
5. Find matricen hørende til
$$\sin^2\theta\sin^2\phi$$
6. Find matricen hørende til
$$\sin^3\theta\sin^3\phi$$
7. Find matricen hørende til
$$-\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

OPGAVE 3.18

Gentag opgave 3.17 med den i opgave 3.16 angivne basis til at finde matricer

$$\langle g_i|Fg_j\rangle = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi g_i^*(\theta,\phi)F(\theta,\phi)g_j(\theta,\phi),$$

hørende til forskellige størrelser $F(\theta,\phi)$.

Vis, at de i opgave 3.15 og 3.16 indførte basisfunktioner er relateret ved

$$f_i = \sum_j \langle g_j|f_i\rangle g_j$$

og bestem koefficienterne $\langle g_j|f_i\rangle$.

4 Schrödingerligningen

De tilstande, vi indtil nu har betragtet, har været uafhængige af tiden. Vi skal nu generalisere den tidsuafhængige Schrödingerligning, så vi får mulighed for at behandle tidsafhængige fænomener. Den fremkomne ligning, der betegnes som den tidsafhængige Schrödingerligning eller blot Schrödingerligningen, er kvanteteoriens grundlæggende bevægelsesligning, der modsvarer Newtons ligninger i den klassiske fysik. Ligesom Newtons ligninger gælder Schrödingerligningen kun i den grænse, hvor man kan se bort fra relativistiske effekter.

Vi skal i det følgende postulere den tidsafhængige Schrödingerligning og derefter vise, hvorledes den under stationære betingelser reduceres til egenværdiligningen for systemets energi. De egentilstande, der er løsninger til denne ligning, benævnes også stationære tilstande, idet de tilhørende sandsynlighedstætheder er uafhængige af tiden. Først når vi superponerer stationære tilstande, får vi mulighed for at beskrive tidsafhængige fænomener og sammenligne med resultatet af at løse de klassiske bevægelsesligninger. Selv om en given tilstand ikke er en egentilstand for energioperatoren, kan den være egentilstand for andre operatorer hørende til f. eks impulsen eller impulsmomentet. Som vi skal se i eksempel 4 nedenfor, kan et systems tilstand også være karakteriseret ved at være en egentilstand for en ikke-hermitesk operator. Det særlige ved egentilstandene for energioperatoren er, at deres tidslige udvikling er meget simpel, som det vil fremgå nedenfor.

Vi betragter en enkelt partikel med masse m, der bevæger sig i potentialet $V(\vec{r})$. Den tidsuafhængige Schrödingerligning er givet ved egenværdiligningen (3.22) med $H = T + V$, hvor den kinetiske energi er $T = p^2/2m$. Vi vil nu generalisere Schrödingerligningen $H\psi = E\psi$ til en ligning, hvori energiegenværdien E erstattes af $i\hbar\partial/\partial t$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}. \tag{4.1}$$

Hvis tidsafhængigheden af ψ er givet ved $\exp(-iEt/\hbar)$, reduceres (4.1) til $H\psi = E\psi$, der udtrykker, at ψ er en egentilstand for energioperatoren. Man kalder en sådan tilstand for stationær, idet absolutkvadratet på bølgefunktionen ses at være uafhængigt af tiden ($|\exp(-iEt/\hbar)| = 1$).

I almindelighed er bølgefunktionen $\psi(\vec{r},t)$ ikke nødvendigvis en egentilstand for energien

og kan derfor ikke mærkes med en energiegenværdi. Dens fysiske fortolkning er som i det tidsuafhængige tilfælde givet ved, at

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r} \tag{4.2}$$

er sandsynligheden for, at en måling af partiklens stedvektor giver et resultat i volumenelementet $d\vec{r}(= dxdydz)$ omkring $\vec{r}$.

Hvis tilstanden er en egentilstand for energien med egenværdi E, er venstre side af (4.1) lig med $E\psi$ og (4.1) har derfor løsningen

$$\psi = u_E(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}. \tag{4.3}$$

hvor $u_E(\vec{r})$ betegner den rumlige del af bølgefunktionen, der tilfredsstiller $Hu_E = Eu_E$. Tilstanden (4.3) betegnes som en stationær tilstand, idet absolutværdien af ψ er tidsuafhængig. I en tilstand karakteriseret ved en bestemt energi er absolutkvadratet på sandsynlighedsamplituderne - og dermed sandsynligheden for udfaldet af en måling af den tilhørende fysiske størrelse - altså uafhængigt af tiden. Dette harmonerer godt med den klassiske fysik. For et system karakteriseret ved en Hamiltonfunktion, der ikke afhænger eksplicit af tiden, vil energien være en bevægelseskonstant, jvf. (2.51-52).

Den almindelige løsning til (4.1) er

$$\psi = \sum_E c_E u_E(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}, \tag{4.4}$$

hvor $Hu_E = Eu_E$, og konstanterne c_E kan fastlægges ud fra kendskabet til bølgefunktionen til tiden $t = 0$. Vi har her antaget, at energiegentilstandene udgør en fuldstændig basis. Hvis nogle af energiegentilstandene hører til et kontinuum af egenværdier, indbefatter summationen i (4.4) en integration over dette.

Den tidsafhængige Schrödingerligning (4.1) er her formuleret for en enkelt partikel, men den kan uden videre generaliseres til det tilfælde, hvor et system er specificeret ved et stort antal generaliserede koordinater. Som eksempel på et sådant system kan vi tage de ca. 10^{22} ledningselektroner, som er indeholdt i en kubikcentimeter kobber (kapitel 9). Hamiltonoperatoren fremkommer i dette tilfælde som summen af elektronernes kinetiske energi og den potentielle energi hidrørende fra elektronernes indbyrdes frastødning og deres vekselvirkning med

de positivt ladede metalioner. At man i sådanne tilfælde kan nedskrive Schrödingerligningen i analogi med (4.1) er naturligvis ikke ensbetydende med, at man kan løse den.

Det er afgørende ved løsningen af Schrödingerligningen at tage hensyn til de symmetrier, der omtales i kapitel 8, og det er desuden ofte nødvendigt at supplere Hamiltonoperatoren i Schrödingerligningen med led, der ikke har nogen klassisk analogi (som for eksempel koblingen mellem en partikels baneimpulsmoment og dens spin, der er en relativistisk effekt). Endelig bør det nævnes, at Hamiltonoperatoren ikke nødvendigvis er entydigt fastlagt ud fra kendskabet til Hamiltonfunktionen. Kvantiseringen tager udgangspunkt i Poisson-parenteserne (2.44) for de generaliserede koordinater og impulser, idet venstresiden erstattes med kommutatoren for de tilhørende operatorer og højresiden med $i\hbar\delta_{ij}$. Hvis den klassiske Hamiltonfunktion indeholder produkter af generaliserede koordinater med generaliserede impulser, er overgangen til Hamiltonoperatoren ikke veldefineret, såfremt de pågældende operatorer ikke kommuterer. Under sådanne omstændigheder skriver man normalt Hamiltonfunktionen på symmetrisk form i de tilsvarende klassiske variable, før disse variable erstattes med operatorer.

Den generelle form for den tidsafhængige Schrödingerligning er altså

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{4.5}$$

hvor Hamiltonoperatoren for det pågældende system fremkommer af Hamiltonfunktionen som beskrevet ovenfor, eventuelt med tilføjelse af relativistiske korrektionsled.

Den relativistiske ligning for en enkelt elektron, der betegnes som Dirac-ligningen, er som (4.5) lineær, men bølgefunktionen har i dette tilfælde fire komponenter, hvorved (4.5) erstattes af en 4×4 matrix-differentialligning, jvf. (1.145). I den grænse, hvor de relativistiske effekter kan behandles som korrektionsled, er det tilstrækkeligt at tage hensyn til to af bølgefunktionens fire komponenter. Herved fremkommer de søjlevektorer, der i kapitel 7 vil blive benyttet til at repræsentere elektronens spin (jvf. (2.79-80)).

4.1 Ehrenfests sætning

Kvanteteorien skal indeholde den klassiske mekanik som et grænsetilfælde. For at belyse denne grænse vil vi nu udlede et udtryk for den tidsafledede af middelværdien af en vilkårlig

fysisk størrelse. Det følger af Schrödingerligningen

$$H\psi = i\hbar\partial\psi/\partial t \tag{4.6}$$

ved kompleks konjugation, at

$$H\psi^* = -i\hbar\partial\psi^*/\partial t. \tag{4.7}$$

Den tidsafledede af middelværdien $< A >= \langle\psi|A\psi\rangle$ af en vilkårlig fysisk størrelse A er

$$\frac{d < A >}{dt} = \langle\psi|A\frac{\partial\psi}{\partial t}\rangle + \langle\frac{\partial\psi}{\partial t}|A\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial A}{\partial t}\psi\rangle, \tag{4.8}$$

hvor vi har taget hensyn til, at operatoren A kan afhænge explicit af tiden. Ved at indsætte (4.6-7) i (4.8) og udnytte at H er hermitesk, får vi resultatet

$$\frac{d < A >}{dt} = \frac{1}{i\hbar} < [A, H] > + < \frac{\partial A}{\partial t} > . \tag{4.9}$$

Dette er Ehrenfests sætning. Vi vil benytte (4.9) til at vise, hvorledes middelværdien af en partikels sted og impuls i en passende grænse adlyder de klassiske bevægelsesligninger.

For simpelheds skyld betragter vi en partikel med masse m, der bevæger sig i én dimension under indflydelse af den potentielle energi $V(x)$. Idet $[x, H] = i\hbar p/m$, har vi ifølge (4.9) at

$$\frac{d < x >}{dt} = \frac{< p >}{m}, \tag{4.10}$$

og

$$\frac{d < p >}{dt} = - < \frac{dV}{dx} > . \tag{4.11}$$

Hvis den potentielle energi kun varierer lidt over den del af rummet, hvor bølgefunktionen er (væsentligt) forskellig fra nul, er $< dV/dx > \simeq dV(< x >)/d < x >$, og vi har dermed vist, at $< x >$ og $< p >$ adlyder de klassiske bevægelsesligninger under de nævnte forudsætninger.

4.2 Superpositionsprincippet

Schrödingerligningen (4.5) er en lineær differentialligning. Hvis ψ_1 og ψ_2 er løsninger til denne, vil superpositionen $\psi_1 + \psi_2$ ligeledes være en løsning. Et sådant superpositionsprincip er fundamentalt i kvanteteorien og gælder, selv når det fysiske system ikke kan karakteriseres ved en bølgefunktion, der adlyder Schrödingerligningen. Hvis et fysisk system kan befinde

sig i tilstandene $|n_1\rangle$ og $|n_2\rangle$, hvor n_1 og n_2 angiver (en samling af) kvantetal, er også tilstandene $c_1|n_1\rangle + c_2|n_2\rangle$ mulige. Her er c_1 og c_2 vilkårlige koefficienter, der dog skal opfylde normeringsbetingelsen $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

Lad os betragte en superposition af to tilstande ψ_{n_1} og ψ_{n_2}, der hver for sig er egentilstande for energien af en éndimensional harmonisk oscillator med egenværdier E_{n_1} og E_{n_2}. Vi forudsætter, at $n_1 \neq n_2$, således at de to egenværdier er forskellige. Absolutkvadratet på superpositionen $\psi = \psi_{n_1} + \psi_{n_2}$ vil da varierere i tiden, idet

$$|\psi|^2 = |\psi_{n_1}|^2 + |\psi_{n_1}|^2 + 2u_{n_1}u_{n_2}\cos(E_{n_1} - E_{n_2})t/\hbar, \tag{4.12}$$

hvor $\psi_n = u_n \exp(-iE_nt/\hbar)$ og $u_n = u_n(x)$ er valgt reel. Sandsynlighedstætheden er således periodisk i tiden, med en periode, der er bestemt af energiforskellen $(E_{n_1} - E_{n_2})$. Er forskellen mellem de to energier netop $\hbar\omega$, svarende til $n_1 = n_2 \pm 1$, er perioden maksimal, lig med $2\pi/\omega$, hvor $\omega = \sqrt{K/m}$ er den klassiske omløbsfrekvens.

EKSEMPEL 4. DEN KLASSISKE GRÆNSE FOR EN HARMONISK OSCILLATOR.

I det følgende vil vi superponere tilstandene $|n\rangle$ for en harmonisk oscillator på en sådan måde, at absolutkvadratet på ψ bliver en Gaussfunktion, der til ethvert tidspunkt opfylder usikkerhedsrelationen (3.83).

I kapitel 2 indførte vi operatorerne $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$, hvis sum ifølge (2.83-84) er proportional med $\hat{q}$,

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger). \tag{4.13}$$

Det ses heraf, at dersom vi kan finde en tilstand $|\beta\rangle$, der er egentilstand til $\hat{a}$ med egenværdi β, vil middelværdien af partiklens position $\langle\beta|\hat{q}|\beta\rangle$ være givet ved $(\beta + \beta^*)\sqrt{\hbar/2M\omega}$, idet $\langle\beta|\hat{a}^\dagger = \langle\beta|\beta^*$. Egenværdien β kan være kompleks, da $\hat{a}$ ikke er nogen hermitesk operator. Tilstanden $|\beta\rangle$ skrives som en superposition

$$|\beta\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle, \tag{4.14}$$

og vi skal forsøge i det følgende at bestemme udviklingskoefficienterne c_n, således at $|\beta\rangle$ er en egentilstand for $\hat{a}$. For at superpositionen (4.14) kan tilfredsstille Schrödingerligningen, må tidsafhængigheden af koefficienterne c_n være givet ved

$$c_n \propto \exp(-iE_nt/\hbar). \tag{4.15}$$

Endvidere bemærker vi, at $\hat{a}$ ifølge (2.111) dels ændrer kvantetallet fra n til $n-1$, når den virker på $|n\rangle$, og dels multiplicerer tilstanden med $\sqrt{n}$. Vi må derfor forlange, at koefficienterne opfylder rekursionsformlen

$$c_n = c_{n-1}\frac{\beta}{\sqrt{n}}, \tag{4.16}$$

hvorved $c_n\hat{a}|n\rangle = c_{n-1}\beta|n-1\rangle$, for at $|\beta\rangle$ kan tilfredsstille egenværdiligningen

$$\hat{a}|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle. \tag{4.17}$$

For at superpositionen (4.14) kan tilfredsstille Schrödingerligningen (4.5), skal tidsafhængigheden af β være givet ved

$$\beta = |\beta|e^{-i\omega t + i\phi}, \tag{4.18}$$

idet $\hbar\omega$ er den konstante energiforskel mellem naboniveauer. I (4.18) har vi desuden indført en arbitrær fase ϕ, således at β til tiden $t = 0$ er givet ved

$$\beta = |\beta|e^{i\phi}. \tag{4.19}$$

Som vi skal se, kan de to konstanter $|\beta|$ og ϕ knyttes til den klassiske løsning (2.2) på bevægelsesproblemet. Ved at benytte (4.17) og dens hermitesk konjugerede ses det, at middelværdien af $\hat{H}$ er

$$\langle\beta|\hat{H}|\beta\rangle = \hbar\omega(|\beta|^2 + \frac{1}{2}), \tag{4.20}$$

således at $|\beta|^2$ angiver middelantallet af energikvanter i tilstanden $|\beta\rangle$.

Ud fra rekursionsformlen (4.16), der sikrer at $|\beta\rangle$ er en egentilstand for $\hat{a}$, og normaliseringsbetingelsen

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1, \tag{4.21}$$

kan $|c_0|^2$ bestemmes ved at benytte, at $|c_n|^2 = |c_0|^2|\beta|^{2n}/n!$. Ved at indsætte dette udtryk for $|c_n|^2$ i (4.21) fås

$$|c_0|^{-2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\beta|^{2n}}{n!} = e^{|\beta|^2}. \tag{4.22}$$

Absolutvadratet på udviklingskoefficienten c_n kan følgelig skrives som

$$|c_n|^2 = e^{-|\beta|^2}\frac{|\beta|^{2n}}{n!}. \tag{4.23}$$

Fordelingen (4.23) er velkendt fra statistikken og kaldes en Poissonfordeling. Den er illustreret i fig. 4.1 i det tilfælde, hvor middelantallet af energikvanter er 10.

På basis af (4.13) kan vi umiddelbart nedskrive forventningsværdien af partiklens sted i tilstanden $|\beta\rangle$, idet denne er

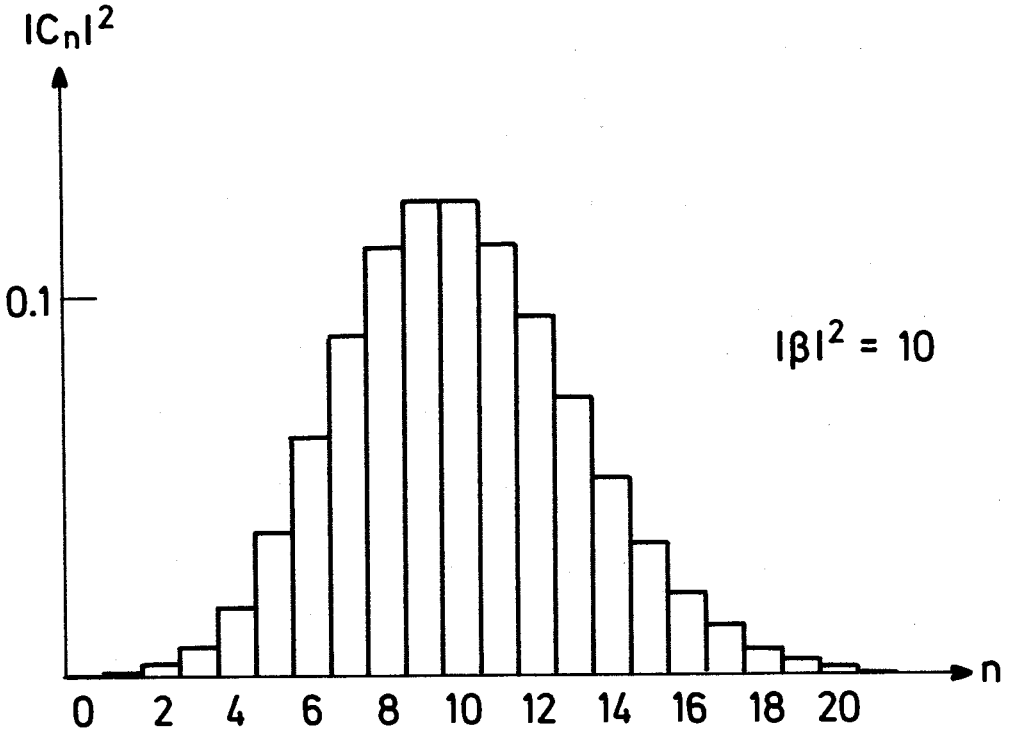
$$< x >= |\beta|\sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega}}\cos(\omega t - \phi), \tag{4.24}$$

der viser, at $|\beta|\sqrt{2}$ i den klassiske grænse, $|\beta| >> 1$, angiver oscillatorens maximale udsving x_0 i enheder af den karakteristiske længde $\sqrt{\hbar/M\omega}$, jvf. (2.2). Ved at danne middelværdien af operatoren $\hat{p}$, der er proportional med $i(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$, fås endvidere at

$$< p >= M\frac{d < x >}{dt} \tag{4.25}$$

svarende til Hamiltons ligning (2.56). Tilsvarende gælder det, at

$$\frac{d < p >}{dt} = -K < x > \tag{4.26}$$



Figur 4.1: Poissonfordeling

der modsvarer (2.57).

Foruden middelværdien af partiklens position eller impuls kan vi også beregne højere momenter af fordelingen (4.23). Fluktuationskvadratet $\Delta^2(H)$ er givet ved definitionen

$$\Delta^2(H) = < H^2 > - < H >^2, \tag{4.27}$$

ifølge den generelle definition (3.88). Vi vil nu bestemme fluktuationskvadratet (4.27) på to forskellige måder. Den første - og mest omstændelige - er baseret direkte på anvendelsen af Poissonfordelingen (4.23). Den anden - og mere elegante - udnytter ombytningsrelationerne mellem $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$.

Lad os først benytte Poissonfordelingen (4.23). Ved at skifte summationsindex fra n til $n-1$ ser vi, at

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 n = |\beta|^2. \tag{4.28}$$

På tilsvarende måde fås

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 n(n-1) = |\beta|^4. \tag{4.29}$$

Ved hjælp af (4.28-29) kan vi nu bestemme middelværdien af kvadratet på Hamiltonoperatoren,

$$< H^2 > = (\hbar\omega)^2 \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 (n + \frac{1}{2})^2 = (\hbar\omega)^2 (|\beta|^4 + 2|\beta|^2 + \frac{1}{4}). \tag{4.30}$$

Kvadratet på middelværdien (4.20) er $< H >^2 = (\hbar\omega)^2(|\beta|^4 + |\beta|^2 + 1/4)$, og deraf følger, at

$$< H^2 > = < H >^2 + (\hbar\omega)^2 |\beta|^2. \tag{4.31}$$

Det ses af (4.31), at den relative energifluktuation bliver givet ved

$$\frac{\Delta(H)}{< H >} = \frac{|\beta|}{|\beta|^2 + \frac{1}{2}}, \tag{4.32}$$

der viser, at fluktuationen i energi bliver af forsvindende betydning, når middelenergien er meget større end $\hbar\omega$.

I stedet for at benytte Poisson-fordelingen kan vi udlede resultatet (4.30) for middelværdien af $\hat{H}^2$ og dermed udtrykket (4.32) for den relative energifluktuation ved blot at benytte ombytningsrelationerne for skabelses- og annihilationsoperatorerne sammen med (4.17). Det følger af ombytningsrelationerne (2.87), at

$$(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})^2 = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{4} = \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{4}. \tag{4.33}$$

Middelværdien af $\hat{H}^2/(\hbar\omega)^2$ er derfor lig middelværdien af $(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/4)$, der ved brug af (4.17) og dens hermitesk konjugerede ses at være $(|\beta|^4 + 2|\beta|^2 + 1/4)$ i overensstemmelse med (4.30).

På ganske tilsvarende måde kan vi udregne fluktuationskvadraterne for sted og impuls, der ses at opfylde

$$\Delta(x)\Delta(p) = \frac{\hbar}{2}. \tag{4.34}$$

En tilstand, for hvilken det gælder, at produktet af $\Delta(x)$ med $\Delta(p)$ er givet ved (4.34), kaldes en minimal bølgepakke. Oscillatorens grundtilstand $|0\rangle$ er også en minimal bølgepakke, idet den svarer til egenværdien $\beta = 0$. Relationen (4.34) er et specialtilfælde af Heisenbergs usikkerhedsrelationer, ifølge hvilke fluktuationsproduktet altid er større end eller lig med $\hbar/2$. Beregnes fluktuationsproduktet i tilstanden $|n\rangle$ får man således $\Delta(x)\Delta(p) = (n + \frac{1}{2})\hbar$, der kun stemmer overens med (4.34) for $n = 0$ (opgave 3.2).

Selv om middelværdien af x i tilstanden $|\beta\rangle$ varierer i tiden ifølge (4.24), er fluktuationsproduktet (4.34) uafhængigt af tiden. Som vist i opgave 4.4 har absolutkvadratet af bølgefunktionen den samme form som absolutkvadratet af grundtilstandsbølgefunktionen (3.42) for den harmoniske oscillator. Den eneste forskel er, at den værdi af x, for hvilken absolutkvadratet antager sit maximum, oscillerer i tiden. Hvis systemet til et eller andet tidspunkt er beskrevet ved en sådan minimal bølgepakke, der er forskudt fra begyndelsespunktet $x = 0$, vil systemets udvikling i tiden svare til, at sandsynlighedstætheden 'skvulper' frem og tilbage med den klassiske svingningsfrekvens uden at ændre form.

At en minimal bølgepakke ikke ændrer sin form i tiden, er specielt for det harmoniske oscillatorpotential. For en fri partikel, der til tiden $t = 0$ er beskrevet ved en minimal bølgepakke, gælder det, at bølgepakkens udstrækning for store tider vokser proportionalt med t, jvf. opgave 4.1.

4.3 Grænsebetingelser

Den tidsuafhængige Schrödingerligning er en anden ordens differentialligning i de rumlige variable. Ved løsningen af denne er det nødvendigt at specificere grænsebetingelserne. Vi

har allerede i forbindelse med diskussionen af den harmoniske oscillator i afsnit 3.1.1 benyttet, at bølgefunktionen var nul i det uendelige, $x \to \pm\infty$. Denne betingelse hidrørte fra, at bølgefunktionen skulle være normerbar, således at løsninger, der vokser eksponentielt i grænsen $x \to \pm\infty$, måtte forkastes (jvf. (3.32)). Det er ikke altid muligt at forlange, at bølgefunktionen skal forsvinde i det uendelige. Impulsegentilstandene (3.49) er et eksempel på, at bølgefunktionen forbliver endelig overalt i rummet. Svarende til dette eksisterer der et kontinuum af mulige impulsværdier, mens energiegenværdierne for en harmonisk oscillator er givet ved det diskrete spektrum (2.103).

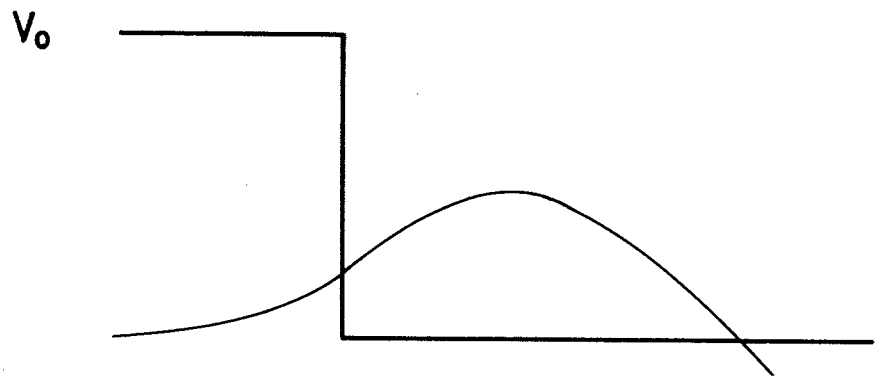
I dette afsnit skal vi uddybe diskussionen af grænsebetingelserne for løsningen af Schrödingerligningen og indføre den for anvendelserne vigtige tilstandstæthed. Lad os først undersøge grænsebetingelserne i det simplest mulige tilfælde, hvor en partikel med masse m bevæger sig i et stykkevis konstant potential $V(x)$ defineret ved

$$V(x) = V_0 \quad \text{for} \quad x < 0; \quad V(x) = 0 \quad \text{for} \quad x > 0, \tag{4.35}$$

hvor V_0 er en positiv konstant. Dette potentialtrin er illustreret i fig. 4.2. Da den tidsuafhængige Schrödingerligning er en anden ordens differentialligning i x, skal dens løsning være kontinuert og have kontinuert differentialkvotient for alle x og derfor også i $x = 0$.

Kommentar. Den tidsuafhængige Schrödingerligning er en differentialligning af anden orden i de rumlige variable. Hvis den potentielle energi er endelig overalt, kan bølgefunktionen fastlægges overalt i rummet ud fra kendskabet til bølgefunktionen og dens gradient på en flade, uanset om den potentielle energi udviser diskontinuiteter eller ej. Herved bliver bølgefunktionen og dens gradient entydige og kontinuerte overalt i rummet. Hvis løsningen til Schrödingerligningen sammensættes af løsninger i delområder, skal integrationskonstanterne altså tilpasses således, at bølgefunktionen og dens første afledede er kontinuerte ved grænsen mellem to delområder. Bølgefunktionens anden afledede vil derimod nødvendigvis udvise diskontinuiteter, hvis den potentielle energi er diskontinuert.

Dersom den potentielle energi $V(\vec{r})$ bliver uendelig stor i et område af rummet, kan vi ikke længere kræve, at den første afledede skal være kontinuert. Hvis $V = \infty$ i et bestemt område, kan en partikel ikke opholde sig i dette, og dens bølgefunktion må derfor være nul i det pågældende område. Kontinuiteten af bølgefunktionen medfører da, at ψ er nul på randen af området, mens den første afledede vil udvise et spring (jvf. eksempel 10).



Figur 4.2: Potentialtrin og bølgefunktion

Idet vi betragter energiegenværdier $E < V_0$, er løsningen i de to områder givet ved

$$\psi = A\cos kx + B\sin kx \quad \text{for} \quad x > 0, \tag{4.36}$$

hvor $k^2 = 2mE/\hbar^2$ og

$$\psi = Ce^{\kappa x} \quad \text{for} \quad x < 0, \tag{4.37}$$

hvor $\kappa = (2m(V_0 - E))^{1/2}/\hbar$. Her har vi benyttet, at bølgefunktionen ikke må divergere for $x \to -\infty$ (se fig. 4.2).

Da bølgefunktionen skal være kontinuert i punktet $x = 0$, må det gælde, at $A = C$. Tilsvarende fås af (4.36-37), at $\kappa C = kB$ er betingelsen for, at den afledede er kontinuert. I grænsen, hvor $V_0 \gg E$, må C derfor være nul og bølgefunktionen i området $x > 0$ proportional med $\sin kx$. Vi bemærker, at bølgefunktionen i området $x > 0$ ikke er en egenfunktion for impulsoperatoren, men derimod en superposition af egentilstande, idet

$$\sin kx = \frac{1}{2i}(e^{ikx} - e^{-ikx}). \tag{4.38}$$

Vi konkluderer altså, at bølgefunktionen er nul i det område, hvor den potentielle energi er uendelig stor.

Det er ofte en fordel at forestille sig, at et kvantemekanisk system er lukket inde i en kasse i stedet for at antage, at hele rummet er tilgængeligt for dets bevægelse. Baggrunden for dette er blandt andet, at det ved anvendelsen af kvantemekanikken på makroskopiske systemer er af betydning at vide, hvorledes fysiske størrelser afhænger af systemets volumen (jvf. kapitel 9). På den anden side er det klart, at man ved at lukke systemet inde i en kasse

principielt komplicerer beskrivelsen. Begrebet fri partikel er ikke umiddelbart foreneligt med, at kun en del af rummet er til rådighed for partiklens bevægelse, og man kan derfor ikke uden videre benytte impulsen, der er en bevægelseskonstant for en fri partikel, til at karakterisere partiklens mulige tilstande i kassen.

Vejen ud af dette dilemma er at benytte periodiske randbetingelser. Hvis kassen er defineret ved, at partiklens potentielle energi er uendelig stor uden for kassens volumen, må bølgefunktionen være nul på kassens overflader. En direkte brug af denne grænsebetingelse forhindrer os imidlertid i at benytte egentilstande for impulsoperatoren, der er givet ved (3.24). I stedet vil vi forlange, at bølgefunktionen tilfredsstiller periodiske grænsebetingelser i den forstand, at bølgefunktionens værdi på et punkt af en overflade er den samme som dens værdi i det tilsvarende punkt på den modstående overflade.

I det følgende vil vi diskutere den kvantemekaniske bevægelse af en fri partikel i én dimension og i dette tilfælde sammenligne de sædvanlige grænsebetingelser med de periodiske. Som vi skal se, fører brugen af de to forskellige grænsebetingelser til samme fysiske resultat, når 'kassen' er valgt tilstrækkelig stor, så at energiniveauerne ligger tæt. Fordelen ved brug af periodiske grænsebetingelser er, at de gør det muligt at benytte egentilstande for impulsoperatoren, hvad der simplificerer kvantemekanikkens anvendelser på makroskopiske systemer.

Vi skal bestemme løsningerne til Schrödingerligningen for en partikel med masse m, der bevæger sig i et potential $V(x)$ givet ved

$$V(x) = 0, \quad 0 < x < L; \qquad V = \infty, \quad x > L \text{ og } x < 0, \tag{4.39}$$

idet vi for nemheds skyld har valgt værdien af den potentielle energi i kassens indre som nulpunkt. Schrödingerligningen i området $0 < x < L$ bliver hermed

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi, \tag{4.40}$$

hvor $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Den fuldstændige løsning til (4.40) er

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{4.41}$$

Først vil vi antage, at partiklens bølgefunktion er nul på overfladen svarende til punkterne $x = 0$ og $x = L$. Herved bliver bølgefunktionen proportional med $\sin kx$, hvor k skal

tilfredsstille betingelsen

$$k = n\frac{\pi}{L},\ n = 1, 2, 3 \cdots . \tag{4.42}$$

De tilhørende energiegenværdier er givet ved

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}. \tag{4.43}$$

For en elektron, der befinder sig i et område af udstrækning $L = 1$ cm, er forskellen mellem det n'te og det $(n-1)$'te energiniveau meget lille. For $n >> 1$ er denne forskel $n\hbar^2\pi^2/mL^2$, der ses at være n gange 10^{-33} Joule, en meget lille værdi, selv når n er stor. Vi kan derfor i praksis opfatte energiegentilstandene som et kontinuum og indføre tilstandstætheden ved følgende betragtning: til intervallet Δk svarer ifølge (4.42) et antal tilstande, der er $\Delta n = L\Delta k/\pi$. Antallet $\Gamma(E)$ af tilstande med energi mindre end E er ifølge (4.43)

$$\Gamma(E) = \frac{L}{\pi}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{4.44}$$

Tilstandstætheden $g(E)$ er defineret ved, at $g(E)dE$ er antallet af tilstande med energi mellem E og $E + dE$, hvoraf det ses, at

$$g(E) = \frac{d\Gamma}{dE}. \tag{4.45}$$

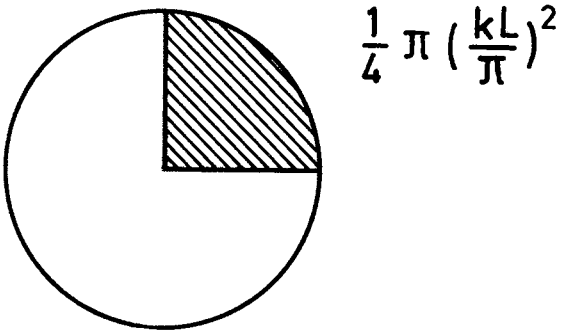
Af (4.44-45) følger da, at

$$g(E) = \frac{L}{\pi}\sqrt{\frac{m}{2E\hbar^2}}. \tag{4.46}$$

I det betragtede tilfælde aftager tilstandstætheden åbenbart for voksende energi. Dette resultat afspejler, at partiklen kun bevæger sig i én dimension. I det følgende skal vi vise, at tilstandstætheden hørende til bevægelse i to eller tre dimensioner er henholdsvis uafhængig af energien og proportional med kvadratroden af denne.

Idet vi fortsat benytter de grænsebetingelser, at bølgefunktionen forsvinder på kassens overflade, kan ovenstående umiddelbart generaliseres til både to og tre dimensioner. I to dimensioner bevæger partiklen sig inden for et område afgrænset af ulighederne $0 < x < L$ og $0 < y < L$. Bølgefunktionen har da formen $\sin(\pi n_x x/L)\sin(\pi n_y y/L)$, hvor n_x og n_y er hele, positive tal. Antallet af tilstande, der har energi mindre end E, er givet ved

$$\Gamma(E) = \frac{1}{4}\pi k^2 \frac{L^2}{\pi^2}, \tag{4.47}$$



Figur 4.3: Illustration af (4.47)

hvor

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{4.48}$$

Grunden til at faktoren 1/4 optræder i (4.47) er, at kvantetallene n_x og n_y kun kan antage positive værdier (figur 4.3). Tilstanden, der fremkommer ved for eksempel at erstatte n_x med $-n_x$, er nemlig ikke lineært uafhængig af den oprindelige tilstand, da den blot adskiller sig ved et fortegn. Tilstandstætheden, der er defineret ved (4.45), fremkommer ved at differentiere (4.47) med hensyn til energien og bliver derfor uafhængig af energien.

Endelig fås for bevægelse i tre dimensioner, at

$$\Gamma(E) = \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}k^3\frac{L^3}{\pi^3}, \tag{4.49}$$

kvor k som før er givet ved (4.48). Det ses af (4.49), at tilstandstætheden i det tredimensionale tilfælde vokser med energien som kvadratroden af E, idet k^3 er proportional med $E^{3/2}$, således at tilstandstætheden bliver $g(E) = (L^3/\pi^2\hbar^3)\sqrt{m^3E/2}$.

Det bemærkes, at vi ved bestemmelsen af tilstandstætheden ikke har taget hensyn til, at elektronen har et spin. Da spinkvantetallet kan antage to værdier (kapitel 7), skal ovenstående resultater multipliceres med 2, hvis de anvendes på elektroners eller andre spin-$\frac{1}{2}$ partiklers bevægelse. Lad os imidlertid her udelade elektronens spin af vore overvejelser og vende os mod at diskutere brugen af de periodiske grænsebetingelser.

Den fuldstændige løsning til Schrödingerligningen for bevægelsen af en fri partikel i én dimension er anført i (4.41). I stedet for at forlange, at bølgefunktionen er nul på overfladen

svarende til punkterne $x = 0$ og $x = L$, vil vi nu pålægge en periodisk grænsebetingelse

$$\psi_{x=0} = \psi_{x=L}. \tag{4.50}$$

Fysisk set kunne en sådan grænsebetingelse realiseres ved, at man føjer endepunkterne af det endimensionale område sammen til en ring. En tilsvarende konstruktion lader sig ikke udføre i tre dimensioner, og det er derfor bedre at betragte brugen af periodiske grænsebetingelser som en approksimation, der er tilstrækkelig nøjagtig, når det drejer sig om volumenegenskaber, men som ikke gør det muligt at udtale sig om bølgefunktionernes udseende ved selve overfladen[1]. Vi skal nu vise, at brugen af de periodiske grænsebetingelser (4.50) fører til nøjagtig det samme udtryk for tilstandstætheden som fundet ovenfor i (4.46).

Den fuldstændige løsning til Schrödingerligningen (4.40) er en superposition af tilstande, der er egenfunktioner for impulsoperatoren med egenværdier givet ved henholdsvis $\hbar k$ og $-\hbar k$. Vi ønsker nu at beskrive partiklens bevægelse ved normerede tilstande, der er egenfunktioner for impulsoperatoren, svarende til bølgefunktionerne

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}. \tag{4.51}$$

En bølgefunktion som (4.51) kan ikke bringes til at være nul i punkterne $x = 0$ og $x = L$. Brugen af de periodiske grænsebetingelser (4.50) giver imidlertid, at

$$k = n\frac{2\pi}{L},\ n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots. \tag{4.52}$$

Bemærk, at de tilladte værdier af k ifølge (4.52) ligger i den dobbelte indbyrdes afstand i forhold til de værdier, der er givet ved (4.42). Antallet af tilstande inden for et energiinterval $\Delta\epsilon$ er imidlertid det samme i de to tilfælde, da k ifølge (4.52) antager både positive og negative værdier. Bestemmes tilstandstætheden ud fra (4.52) fås derfor atter resultatet (4.46).

For at illustrere brugen af periodiske grænsebetingelser vil vi afslutte denne diskussion af en fri partikel i en kasse ved igen at bestemme tilstandstætheden, denne gang ved brug af egentilstande for impulsoperatoren. For at gøre dimensionens betydning klar skal vi formulere problemstillingen i d dimensioner og angive tilstandstætheden i tilfældene $d = 1, 2$ og 3.

[1] For systemer af makroskopisk udstrækning vil overfladens bidrag til eksempelvis den totale energi normalt være af forsvindende betydning i sammenligning med volumenbidraget.

Udgangspunktet for bestemmelsen af tilstandstætheden er egentilstandene for impulsoperatoren

$$|\vec{k}\rangle. \tag{4.53}$$

De tilhørende egenværdier for impulsoperatoren er $\hbar\vec{k}$, hvor $\vec{k}$ er en d-dimensional vektor. Brugen af de periodiske grænsebetingelser svarende til (4.50) medfører, at hver af komponenterne af $\vec{k}$ tilfredsstiller en betingelse som (4.52). Vi vælger kassens sider til at have samme længde L, selv om dette naturligvis ikke er nødvendigt. Som det vil fremgå, er det i alle tilfælde kassens volumen (der i det betragtede tilfælde er L^d), der indgår i resultatet for tilstandstætheden.

De normerede bølgefunktioner, der svarer til tilstandsvektorerne (4.53), er

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{L^d}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{4.54}$$

I anvendelserne af kvantemekanikken er man ofte ude for at skulle summere over tilstande, der er mærket med $\vec{k}$. En sådan sum omdannes til et integral efter forskriften

$$\sum_{\vec{k}} \cdots = \frac{L^d}{(2\pi)^d} \int d\vec{k} \cdots \tag{4.55}$$

Begrundelsen for (4.55) fremgår af (4.52), der skal gælde for hver komponent af vektoren $\vec{k}$. For at omdanne integralet over $\vec{k}$-rummet i (4.55) til et energiintegral og derigennem indføre tilstandstætheden $g(E)$ er det nødvendigt at specificere dimensionen. I tre dimensioner fås

$$\frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \cdots = \frac{L^3}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty dk k^2 \cdots = \int_0^\infty dE g(E) \cdots, \tag{4.56}$$

idet vi for simpelheds skyld forudsætter, at integranden $(\cdots)$ kun afhænger af længden af $\vec{k}$, hvorfor differentialet dk blot skal multipliceres med overfladearealet $4\pi k^2$ ved overgang til polære koordinater, $dk_x dk_y dk_z \to 4\pi k^2 dk$. Ved at benytte sammenhængen (4.48) mellem E og k fås

$$g(E) = \frac{L^3 m k(E)}{2\pi^2\hbar^2} = \sqrt{\frac{m^3 E}{2}} \frac{L^3}{\pi^2\hbar^3}, \; d = 3. \tag{4.57}$$

I to dimensioner er tilstandstætheden konstant, idet $dk_x dk_y \to 2\pi k dk$. Vi får derfor

$$g(E) = \frac{L^2}{(2\pi)^2} 2\pi \frac{m}{\hbar^2}, \; d = 2, \tag{4.58}$$

mens tilstandstætheden i én dimension er

$$g(E) = \frac{L}{2\pi} 2 \frac{m}{\hbar^2 k(E)} = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}, \; d = 1. \tag{4.59}$$

i overensstemmelse med resultatet (4.46). Bemærk, at der i én dimension skal multipliceres med 2 ved overgangen fra differentialet dk til dE, idet den éndimensionale bølgevektor kan antage både positive og negative værdier, jvf. (4.52). Som tidligere nævnt er der ikke taget hensyn til spin i ovenstående resultater, der skal multipliceres med 2, hvis de f. eks. anvendes på elektroner i metaller (kapitel 9).

4.4 Sammenfatning

I dette afsnit opsummerer vi kvanteteoriens grundlæggende elementer som de er indført i dette og de to forudgående kapitler.

Observable

Fysiske observable som energi, impuls eller impulsmoment er repræsenteret ved hermiteske operatorer eller matricer, hvis egenværdier angiver de mulige resultater af en måling af den pågældende fysiske størrelse.

Tilstande

Et fysisk system karakteriseres ved en tilstandsvektor (ket), der er fælles egenvektor for en eller flere observable repræsenteret ved indbyrdes ombyttelige matricer. En fuldstændig angivelse af systemets tilstand udgøres af den samling af kvantetal, der specificerer egenværdierne for de indbyrdes ombyttelige matricer. Alternativt kan systemet karakteriseres ved en bølgefunktion ψ, der er fælles egenfunktion for indbyrdes ombyttelige operatorer.

Superposition

Hvis tilstandene $|\nu_1\rangle$ og $|\nu_2\rangle$ begge er mulige tilstande, er også linearkombinationen $c_1|\nu_1\rangle + c_2|\nu_2\rangle$ en mulig fysisk tilstand. Her er c_1 og c_2 vilkårlige koefficenter, der blot skal opfylde normeringsbetingelsen $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, mens ν_1 og ν_2 angiver (en samling af) kvantetal.

Sandsynlighedsamplituder

Hvis en fysisk tilstand $|\nu\rangle$ udvikles på et fuldstændigt sæt af egentilstande for en matrix (eller operator) hørende til en bestemt fysisk størrelse, vil absolutkvadratet på udviklingskoefficienterne (de såkaldte sandsynlighedsamplituder) angive sandsynligheden $P(a)$ (eller sandsynlighedstætheden) for at måle den tilhørende egenværdi a for den pågældende fysiske størrelse, givet at systemet befinder sig i tilstanden $|\nu\rangle$, $P(a) = |\langle a|\nu\rangle|^2$.

Middelværdi

Middelværdien (eller forventningsværdien) af en fysisk størrelse A i tilstanden $|\nu\rangle$ er givet ved matrixelementet $\langle\nu|A|\nu\rangle$. Hvis systemets tilstand er angivet ved bølgefunktionen ψ, er middelværdien tilsvarende givet ved det indre produkt af ψ og $A\psi$.

Impuls og sted

Hvis en partikels tilstand er angivet ved en bølgefunktion $\psi(\vec{r}, t)$, hvor $\vec{r}$ angiver partiklens cartesiske koordinater, vil partiklens impuls være repræsenteret ved differentialoperatoren $(\hbar/i)\nabla$.

Schrödingerligningen

Bølgefunktionen udvikler sig i tiden ifølge Schrödingerligningen $H\psi = i\hbar\partial\psi/\partial t$, hvor H i den ikke-relativistiske grænse er Hamiltonoperatoren svarende til den klassiske Hamiltonfunktion.

4.5 Opgaver

OPGAVE 4.1

Vis for en fri partikel med masse M, at

$$\frac{d\Delta^2(x)}{dt} = \frac{< xp + px >}{M} - 2\frac{< x >< p >}{M}, \tag{4.60}$$

og

$$\frac{d^2\Delta^2(x)}{dt^2} = 2\frac{\Delta^2(p)}{M^2}. \tag{4.61}$$

Benyt disse resultater til at vise, at fluktuationskvadratet $\Delta^2(x)$ for en fri partikel, der til tiden $t = 0$ befinder i en tilstand med en given værdi af $\Delta^2(p)$, er proportionalt med t^2 for store værdier af t.

OPGAVE 4.2

En partikel med massen 10 g udfører harmoniske svingninger med en amplitude på 1 cm og en svingningstid på 1 s. Angiv middelantallet af energikvanter.

OPGAVE 4.3

I denne opgave betragter vi en partikel med masse M, der bevæger sig i et harmonisk oscillatorpotential $V(x) = Kx^2/2$. Som sædvanlig betegner ω den klassiske angulære frekvens.

a) Vis, at bølgefunktionen

$$\psi(x,t) = c_0 e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-M\omega x^2/2\hbar} + c_1 e^{-iE_1 t/\hbar} x e^{-M\omega x^2/2\hbar}, \tag{4.62}$$

hvor E_n er givet ved (2.103), tilfredsstiller den tidsafhængige Schrödingerligning. Her er c_0 og c_1 konstanter, der er valgt således at ψ er normeret (eftervis, at integralet over x af $|\psi|^2$ fra $-\infty$ til ∞ er uafhængigt af tiden!).

b) Idet det forudsættes, at $c_1 = \sqrt{M\omega/\hbar}c_0$, skal sandsynlighedstætheden til tidspunkterne $t = 0$ og $t = \pi/\omega$ skitseres. Vis, at sandsynlighedstætheden varierer periodisk i tiden og bestem perioden.

OPGAVE 4.4

I denne opgave skal vi først se, hvorledes vi kan finde bølgefunktionen for grundtilstanden af den harmoniske oscillator ved hjælp af operatorligningen svarende til (2.102). Derefter bestemmes bølgefunktionen svarende til superpositionen (4.14) (det bemærkes, at sammenhængen mellem tilstandsvektoren $|\beta\rangle$ og bølgefunktionen $\psi(x,t)$ er $\psi(x,t) = \langle x|\beta\rangle$ i overensstemmelse med (3.52-54)).

Differentialoperatoren $\hat{a}$ er ifølge (2.83) givet ved

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}(x + \frac{\hbar}{M\omega}\frac{d}{dx}). \tag{4.63}$$

a) Vis, at grundtilstandsbølgefunktionen (3.42) tilfredsstiller førsteordens differentialligningen

$$\hat{a}u_0(x) = 0 \tag{4.64}$$

hvor $\hat{a}$ er givet ved (4.63).

b) Find løsningen $\psi(x,t)$ til førsteordens differentialligningen svarende til (4.17)

$$(\hat{a} - \beta)\psi = 0, \tag{4.65}$$

hvor tidsafhængigheden hidrører fra β givet ved (4.18).

c) Vis, at absolutkvadratet på den under (b) bestemte løsning efter normering er givet ved

$$|\psi(x,t)|^2 = (a\sqrt{\pi})^{-1}e^{-(x-<x>)^2/a^2}, \tag{4.66}$$

hvor $< x >$ er middelværdien (4.24).

5 Tunneleffekt

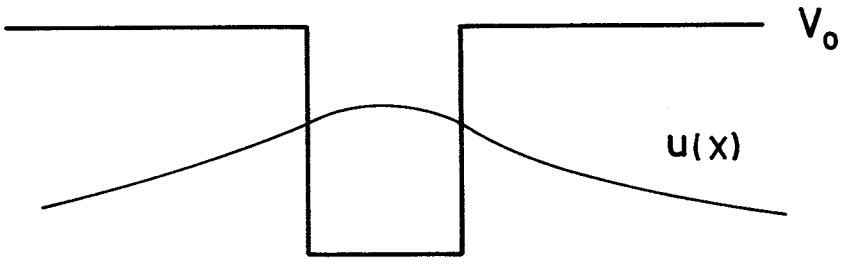
Mange af kvanteteoriens mest overraskende konsekvenser optræder som tunneleffekter, det vil sige gennemtrængning af barrierer, der adskiller et område fra et andet, der klassisk set ikke er tilgængeligt. I dette kapitel skal vi først introducere begrebet bundne tilstande og derefter indføre sandsynlighedsstrømmen. Dette vil gøre det muligt at diskutere gennemtrængningen af simple éndimensionale barrierer.

5.1 Bundne tilstande

Når en partikel bevæger sig i et potential, der er uafhængigt af tiden, er det som vist i forrige kapitel muligt at finde løsninger ψ til Schrödingerligningen - de såkaldte stationære tilstande - for hvilke absolutkvadratet $|\psi|^2$ er uafhængigt af tiden. I det følgende skal vi se på en særlig simpel bevægelse i én dimension, idet potentialet er givet ved

$$V(x) = V_0 \quad \text{for} \quad |x| > \frac{a}{2}, \quad V(x) = 0 \quad \text{for} \quad |x| < \frac{a}{2}, \tag{5.1}$$

hvor V_0 er en positiv konstant (fig. 5.1). Man kalder potentialet (5.1) for en potentialbrønd.



Figur 5.1: Potentialbrønd og bølgefunktion

Vi søger løsninger til Schrödingerligningen af formen

$$\psi(x,t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}. \tag{5.2}$$

Det er bekvemt at indføre de dimensionsløse størrelser

$$x' = \frac{x}{a}, \quad E' = \frac{2mEa^2}{\hbar^2}, \quad V_0' = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}. \tag{5.3}$$

Udtrykt i disse variable bliver den tidsuafhængige Schrödingerligning givet ved

$$-\frac{d^2u}{dx^2} + V_0 u = Eu \quad \text{for} \quad |x| > \frac{1}{2}, \tag{5.4}$$

og

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = Eu \quad \text{for} \quad |x| < \frac{1}{2}, \tag{5.5}$$

hvor vi for nemheds skyld har fjernet mærkerne på de dimensionsløse størrelser. Ifølge Schrödingerligningen udviser den anden afledede af u et spring i $x = \pm 1/2$. Funktionen selv og dens afledede må derfor være kontinuerte. Vi indfører betegnelserne

$$k = \sqrt{E}, \quad \kappa = \sqrt{V_0 - E}. \tag{5.6}$$

I stedet for at finde den almindelige løsning til Schrödingerligningen skal vi nøjes med at undersøge, om der findes bundne tilstande. Hermed menes løsninger til Schrödingerligningen, der aftager eksponentielt i det fjerne, $x \to \pm\infty$. En sådan løsning er kvadratisk integrabel, det vil sige, at integralet $\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi|^2$ eksisterer. Dette betyder, at $0 \leq E \leq V_0$, da løsningerne ellers ikke er kvadratisk integrable. Løsningerne til Schrödingerligningen i de to områder $x > \frac{1}{2}$ og $x < -\frac{1}{2}$ er derfor

$$u = Ae^{-\kappa x} \quad \text{for} \quad x > \frac{1}{2} \tag{5.7}$$

og

$$u = Be^{\kappa x} \quad \text{for} \quad x < -\frac{1}{2}, \tag{5.8}$$

hvor A og B er arbitrære konstanter.

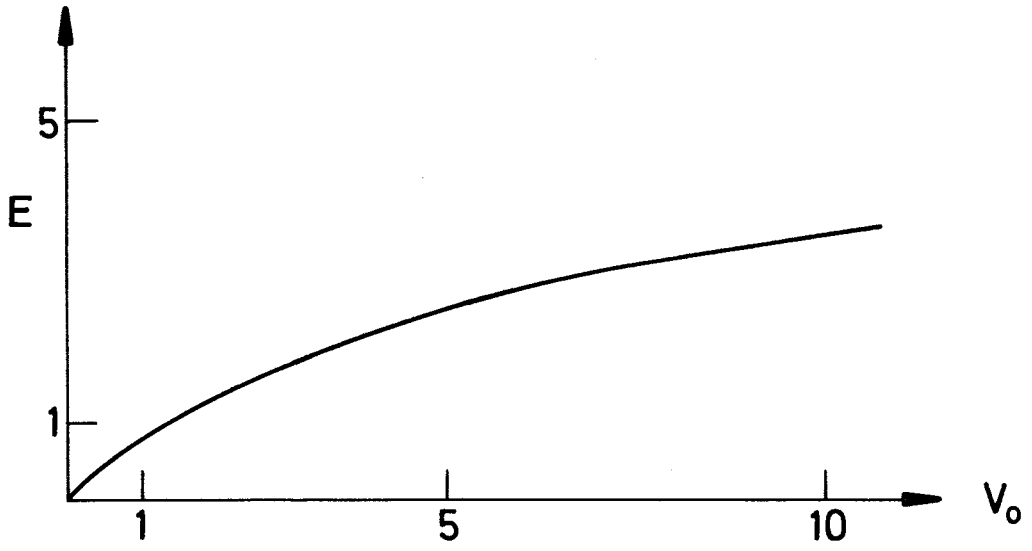
I området $-\frac{1}{2} < x < \frac{1}{2}$ kan den almindelige løsning skrives som en linearkombination af $\sin kx$ og $\cos kx$. Lad os først undersøge, om der findes lige løsninger, der udgør bundne tilstande. Vi vælger følgelig

$$u = C \cos kx \tag{5.9}$$

som løsning i dette område. Ved at benytte, at $(du/dx)/u$ er kontinuert i de to punkter $x = 1/2$ og $x = -1/2$, fås

$$-k\frac{\sin k/2}{\cos k/2} = -\kappa. \tag{5.10}$$

Antallet af løsninger til denne ligning afhænger af størrelsen af den dimensionsløse parameter V_0. De tilhørende energier kan f. eks. bestemmes grafisk ved skæring mellem kurvefamilien $\tan k/2$ og $(V_0 k^{-2} - 1)^{1/2}$ (opgave 5.2).



Figur 5.2: Grundtilstandsenergien for en potentialbrønd

Energien af den laveste bundne tilstand kan findes ved at kvadrere (5.10) med resultatet

$$E = V_0 - E\frac{\sin^2\sqrt{E}/2}{\cos^2\sqrt{E}/2}, \tag{5.11}$$

der altid har en løsning, uanset hvor lille V_0 er. For $V_0 \ll 1$ kan (5.11) løses ved iteration. Til første orden i V_0 er løsningen til (5.11) givet ved $E = V_0$. Indsættes denne værdi på højre side af (5.11), fås resultatet

$$E = V_0 - \frac{V_0^2}{4} \tag{5.12}$$

på nær led af højere orden i V_0. Den numeriske løsning af (5.11) ved brug af lommeregner er vist på figur 5.2. Der forekommer altså altid en bunden tilstand, uanset hvor lille V_0 er. På fig. 5.1 har vi tegnet en bølgefunktion svarende til værdien $E/V_0 = 0.770$ i tilfældet $V_0 ma^2/\hbar^2 = 0.649$.

En tilsvarende undersøgelse for de ulige løsninger viser, at der kun eksisterer ulige bundne tilstande, hvis parameteren V_0 overstiger en bestemt værdi (opgave 5.2).

Hvis energien E er større end V_0, er tilstandene ikke længere kvadratisk integrable. De tilhørende bølgefunktioner aftager ikke eksponentielt, men oscillerer som funktioner af x. De mulige energiværdier udgør et kontinuum, strækkende sig fra V_0 til uendelig.

5.2 Sandsynlighedsstrøm

Ud fra Schrödingerligningen for en enkelt partikel kan det vises, at der gælder en kontinuitetsligning, der knytter den tidslige ændring af sandsynlighedstætheden til divergensen af en

sandsynlighedsstrømtæthed. I dette kapitel er vi interesseret i bevægelse i én dimension og indfører derfor sandsynlighedsstrømmen $j(x,t)$ ved definitionen

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}). \tag{5.13}$$

Sandsynlighedsstrømmen opfylder kontinuitetsligningen

$$\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \tag{5.14}$$

der er en direkte konsekvens af Schrödingerligningen for bevægelse af en partikel med masse m i potentialet $V(x)$. Kontinuitetsligningen (5.14) eftervises ved at indsætte udtrykket (5.13) for sandsynlighedsstrømmen i (5.14). Herved bliver venstresiden

$$\psi^*(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}) + \psi(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} - \frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}),$$

der er nul i kraft af Schrödingerligningen (4.6) og dens kompleks konjugerede (4.7), idet Hamiltonoperatoren er $H = p^2/2m + V(x)$. Det følger af (5.14), at integralet over x af absolutkvadratet på ψ er bevaret i tiden (dette ses ved at integrere (5.14) fra $-\infty$ til ∞, idet det forudsættes, at bølgefunktionen ψ går mod nul i det uendelige, således at j er forsvindende, når $x \to \pm\infty$). For at kontinuitetsligningen kan være opfyldt, er det imidlertid ikke en nødvendig betingelse, at bølgefunktionen forsvinder i det uendelige, En plan bølge $\exp(ikx)$ vil således beskrive en konstant strøm i x-aksens retning. Den tilhørende sandsynlighedsstrøm j tilfredsstiller kontinuitetsligningen, idet j er konstant overalt i rummet.

I det følgende vil vi arbejde med stationære tilstande af formen

$$\psi = Ae^{ikx}, \tag{5.15}$$

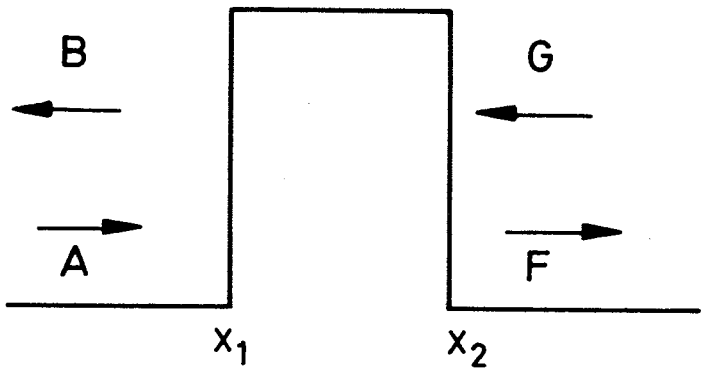
hvor A er en konstant. Strømmen hørende til bølgefunktionen (5.15) ses at være

$$j = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}. \tag{5.16}$$

Bemærk, at strømmen hørende til en reel bølgefunktion er nul.

5.3 Barrieretransmission

Vi vil benytte en tilstand af formen (5.15) svarende til et positivt k til at beskrive en partikel, der bevæger sig i den positive x-akses retning mod en barriere.



Figur 5.3: Potentialbarriere

Som vi skal se i det følgende, kan en partikel ifølge kvantemekanikken gennemtrænge en barriere, der klassisk set forhindrer partiklen i at passere. For at simplificere den matematiske behandling af dette tunnelfænomen skal vi antage, at potentialet V er givet ved

$$V(x) = V_0, \quad \text{for} \quad x_1 \leq x \leq x_2; \quad V(x) = 0, \text{ ellers}, \tag{5.17}$$

hvor V_0 er en positiv konstant (figur 5.3). For lettere at kunne generalisere resultatet for transmissionskoefficienten til at gælde for flere barrierer, har vi her indført koordinaterne x_1 og x_2, selvom transmissionskoefficienten for den enkelte barriere kun afhænger af forskellen $x_2 - x_1$.

For at finde gennemtrængeligheden af barrieren vil vi først bestemme den generelle løsning til den tidsuafhængige Schrödingerligning $H\psi = E\psi$. Denne løsning er

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{for} \quad x < x_1 \tag{5.18}$$

i området til venstre for barrieren (se fig. 5.3). Her er energiegenværdien E knyttet til bølgetallet k igennem $E = \hbar^2 k^2/2m$. Til højre for barrieren er bølgefunktionen tilsvarende

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad \text{for} \quad x > x_2. \tag{5.19}$$

Endelig er løsningen til Schrödingerligningen i selve barrieren (for $x_1 < x < x_2$) givet ved

$$\psi = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \tag{5.20}$$

hvor $\kappa^2 = (2m/\hbar^2)(V_0 - E)$.

I det følgende betragter vi udelukkende det tilfælde, hvor κ er reel, svarende til energier E, der er mindre end barrierehøjden V_0. De følgende beregninger kan uden vanskelighed generaliseres til det tilfælde, hvor E er større end V_0, idet κ i så fald bliver rent imaginær (jvf. opgave 5.3).

Som det fremgår, tilfredsstiller hver af bølgefunktionerne (5.18-20) Schrödingerligningen i det pågældende område, men vi må desuden sikre os, at grænsebetingelserne er opfyldt, idet bølgefunktionerne og deres afledede skal være kontinuerte i punkterne $x = x_1$ og $x = x_2$. Dette giver

$$Ae^{ikx_1} + Be^{-ikx_1} = Ce^{-\kappa x_1} + De^{\kappa x_1}, \tag{5.21}$$

samt

$$ikAe^{ikx_1} - ikBe^{-ikx_1} = -\kappa Ce^{-\kappa x_1} + \kappa De^{\kappa x_1} \tag{5.22}$$

svarende til punktet $x = x_1$. I punktet $x = x_2$ giver kontinuitetsbetingelserne

$$Ce^{-\kappa x_2} + De^{\kappa x_2} = Fe^{ikx_2} + Ge^{-ikx_2} \tag{5.23}$$

og

$$-\kappa Ce^{-\kappa x_2} + \kappa De^{\kappa x_2} = ikFe^{ikx_2} - ikGe^{-ikx_2}. \tag{5.24}$$

Vi eliminerer nu C og D af ligningssystemet (5.21-24) og får

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = t(x_1, x_2) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \tag{5.25}$$

hvor

$$t = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}. \tag{5.26}$$

Her er

$$c_{11} = c_{22}^* = \frac{1}{4}e^{ik(x_2-x_1)}[(1+i\frac{\kappa}{k})(1-i\frac{k}{\kappa})e^{\kappa(x_2-x_1)} + (1-i\frac{\kappa}{k})(1+i\frac{k}{\kappa})e^{-\kappa(x_2-x_1)}] \tag{5.27}$$

og

$$c_{12} = c_{21}^* = \frac{1}{4}e^{-ik(x_2+x_1)}[(1+i\frac{\kappa}{k})(1+i\frac{k}{\kappa})e^{\kappa(x_2-x_1)} + (1-i\frac{\kappa}{k})(1-i\frac{k}{\kappa})e^{-\kappa(x_2-x_1)}] \tag{5.28}$$

Åbenbart knytter ligningerne (5.25-26) bølgefunktionen til højre for barrieren sammen med bølgefunktionen til venstre for barrieren. Vi skal nu undersøge det særlige tilfælde, hvor

bølgefunktionen i området til højre for barrieren beskriver en partikel der bevæger sig mod højre, svarende til betingelsen $G = 0$. Dette svarer til den eksperimentelle situation, hvori en partikelstrøm sendes mod barrieren fra venstre, således at partikelstrømmen delvist reflekteres og delvist transmitteres. Det følger af Schrödingerligningen, i overensstemmelse med kontinuitetsligningen (5.14), at den fra venstre indfaldende strøm (der er proportional med $|A|^2$) er lig summen af den transmitterede (der er proportional med $|F|^2$) og den reflekterede (der er proportional med $|B|^2$).

Da vi er interesserede i at bestemme transmissionskoefficienten T, defineret ved

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \tag{5.29}$$

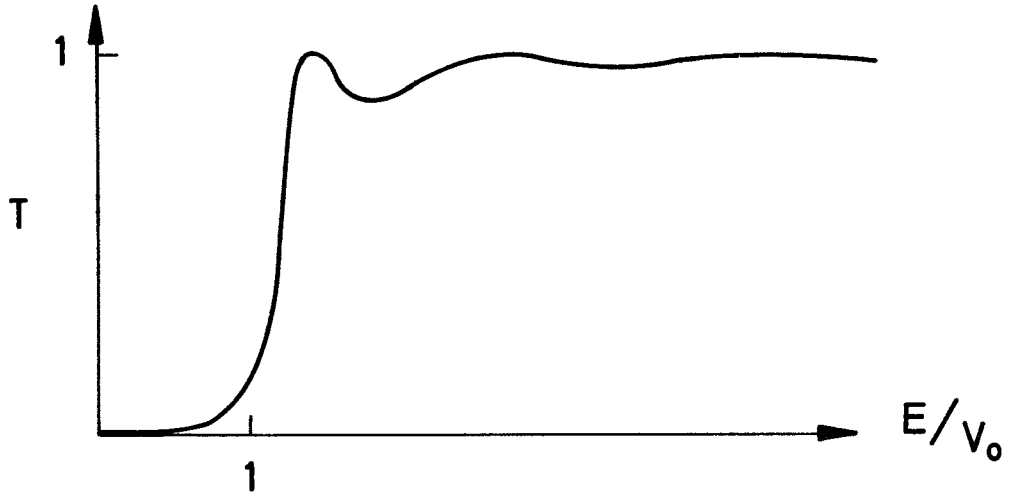
samt reflektionskoefficienten

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \tag{5.30}$$

skal vi søge at bestemme forholdene F/A og B/A af ligningerne (5.25-26). Det vil vise sig, som ventet, at $T = 1 - R$ i overensstemmelse med kontinuitetsligningen (5.14).

Når G sættes til at være nul, kan forholdet F/A umiddelbart bestemmes af (5.25) til at være

$$\frac{F}{A} = \frac{1}{c_{11}}. \tag{5.31}$$



Figur 5.4: Transmissionskoefficienten for en barriere med $V_0 a^2 m/\hbar^2 = 12,5$

Ved hjælp af (5.27) kan vi nu finde transmissionskoefficienten for en barriere, hvis tykkelse er $a = x_2 - x_1$, således at

$$c_{11} = e^{ika}(\cosh \kappa a + i\frac{1}{2}(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}) \sinh \kappa a), \tag{5.32}$$

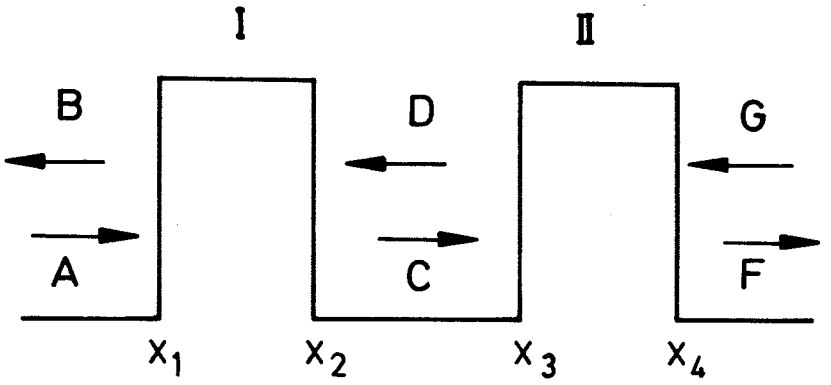
hvorved transmissionskoefficienten bliver

$$T = |c_{11}|^{-2} = \frac{1}{1 + (\kappa^2 + k^2)^2 (\sinh \kappa a)^2 / 4\kappa^2 k^2}. \tag{5.33}$$

Energiafhængigheden af transmissionskoefficienten er afbildet på fig. 5.4 (se også opg. 5.3).

EKSEMPEL 5. KVANTEBRØNDE

Som en anvendelse af resultatet (5.27-28) skal vi nu se, hvorledes vi kan finde transmissionskoefficienten for en partikelstrøm, der bevæger sig gennem to barrierer (fig. 5.5). Man kalder i almindelighed sådanne barriere-



Figur 5.5: Kvantebrønd

konfigurationer for kvantebrønde. I praksis lader de sig realisere ved at opbygge et halvledende materiale af grundstoffer fra tredje og femte hovedgruppe i det periodiske system ved at benytte den eksperimentelle metode, der går under navnet molekylstråleepitaksi. Med denne metode er det muligt på kontrolleret vis at opbygge det halvledende materiale ved at anbringe det ene atomlag oven på det andet. Ved f. eks. for hvert tiende lag at ændre atomlagenes sammensætning fra GaAs til GaAlAs fremkommer brønde med karakteristiske bredder a på typisk 5 nm. Højden af energibarrieren V_0 kan i praksis være nogle få tiendedele af en elektronvolt, i det nævnte eksempel 0,3 eV. Da den masse m, der effektivt indgår i tunnelprocessen, er væsentligt mindre end elektronmassen m_e (for GaAs 0,07 m_e), bliver parameteren $V_0 m a^2/\hbar^2$ med de anførte værdier lig med 7 (en nærmere forklaring af årsagen til forskellen mellem m og m_e kræver, at der tages hensyn til det periodiske potential hidrørende fra gitteratomerne). Herved er det muligt eksperimentelt at studere resonanser i tunneleffekten hidrørende fra, at elektronen mellem de to barrierer bevæger sig som en fri partikel (se f. eks. V.J. Goldman, D.C. Tsui og J.E. Cunningham, Phys. Rev. Lett. **58**, 1256 (1987)).

Vi antager, at to identiske barrierer befinder sig i den indbyrdes afstand l, således at afstanden mellem de to barrierers midtpunkt er $(l + a)$. Kaldes koordinaterne for den anden barriere for x_3, x_4 er altså $x_4 - x_3 = a$ og $x_3 - x_2 = l$ (se fig. 5.5). Matrixelementerne c_{ij} for den anden barriere svarende til (5.27-28) er da givet

ved de samme udtryk, bortset fra at x_1 erstattes med x_3 og x_2 med x_4 i (5.27-28). Bemærk, at faktoren

$$e^{ik(x_3-x_2)} = e^{ikl} \tag{5.34}$$

får betydning for resonansfænomenerne i tunneleffekten.

Transmissionskoefficienten for de to barrierer - opfattet som en helhed - fås ved simpel multiplikation af t-matricen t^{II} hørende til barriere II med t-matricen t^I hørende til barriere I, idet

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = t^I(x_1,x_2)\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = t^I(x_1,x_2)t^{II}(x_3,x_4)\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

Herved bliver transmissionskoefficienten

$$T = \frac{1}{|c_{11}^{\text{tot}}|^2} \tag{5.35}$$

hvor

$$c_{11}^{\text{tot}} = c_{11}^I c_{11}^{II} + c_{12}^I c_{21}^{II}, \tag{5.36}$$

som resultat af sædvanlig række-søjle multiplikation af de to t-matricer.

For at gøre regningerne så overskuelige som muligt vil vi først se på det tilfælde hvor $k = \kappa$, svarende til at energien E netop er det halve af barrierens højde. Herved fås

$$c_{11}^I c_{11}^{II} = (e^{ika}\cosh \kappa a)^2 \tag{5.37}$$

og

$$c_{12}^I c_{21}^{II} = e^{ik(2l+2a)}(\sinh \kappa a)^2. \tag{5.38}$$

Vi kan nu kombinere (5.35-38) til resultatet

$$T = \frac{1}{|\cosh^2 \kappa a + e^{i2kl}\sinh^2 \kappa a|^2}. \tag{5.39}$$

For $l = 0$ bliver (5.39) lig med

$$T = \frac{1}{\cosh^2 2\kappa a} \tag{5.40}$$

i overensstemmelse med (5.33) for $k = \kappa$, når a i dette udtryk erstattes med $2a$ (barrieren er jo gjort dobbelt så bred). For en endelig afstand l vil værdien af transmissionskoefficienten afhænge af størrelsen af kl. Specielt ses det, at T er 1, hvis $kl = (n + 1/2)\pi$, hvor n er heltallig, svarende til perfekt transmission.

I det generelle tilfælde, hvor κ ikke nødvendigvis er lig med k, fås

$$T = \frac{1}{|(\cosh \kappa a + i(\kappa^2 - k^2)\sinh \kappa a/2\kappa k)^2 + (\kappa^2 + k^2)^2 e^{i2kl}\sinh^2 \kappa a/4\kappa^2 k^2|^2}. \tag{5.41}$$

En undersøgelse af (5.41) viser (opgave 5.4), at det for dobbeltbarrieren (i modsætning til enkeltbarrieren) er muligt at få perfekt transmission for bestemte energiværdier $E < V_0$.

Eksemplet ovenfor viser, at det kan være lettere at trænge igennem to barrierer end én. I kapitel 9 skal vi se, hvad der sker, når mange ens barrierer anbringes ved siden af hinanden,

så de udgør et periodisk potential. Det viser sig, at det i dette tilfælde er muligt at finde stationære tilstande, der har form af en plan bølge e^{ikx} multipliceret med en periodisk funktion $u(x)$, hvis periode er den samme som potentialets. De mulige energiværdier udgør et bånd, der kan opfattes som, at de diskrete energiniveauer for en enkelt brønd er bredt ud til et endeligt interval. Energibåndene er adskilt af intervaller, de såkaldte energigab, hvori det ikke er muligt at finde stationære tilstande. Denne båndstruktur er af grundlæggende betydning for metallers, halvlederes og isolatorers karakteristiske egenskaber.

5.4 Den gyldne regel

I de forudgående afsnit i dette kapitel har vi set, hvorledes en partikel med en energi E, der er mindre end højden V_0 af en potentialbarriere, kan trænge igennem barrieren. Denne tunneleffekt er et rent kvantemekanisk fænomen, der er uforeneligt med den klassiske fysiks begrebsverden. Samtidig er der ifølge kvantemekanikken en fra nul forskellig sandsynlighed for, at partiklen reflekteres, selv om energien er større end potentialbarrierens højde. I dette afsnit skal vi benytte tunneleffekten som udgangspunkt for at behandle **overgange** mellem tilstande, der i første tilnærmelse kan betragtes som stationære. Hermed får vi mulighed for at beskrive en lang række fysiske fænomener som kerners γ-henfald, atomers lysudsendelse eller metallers elektriske modstand.

Hvis energien er stor i forhold til barrierehøjden, $E \gg V_0$, kan vi opfatte barrieren som en perturbation, d.v.s. en lille forstyrrelse[1], på partiklens fri bevægelse. Perturbationen giver anledning til overgange mellem fri-partikel tilstandene $|p\rangle$ og $|-p\rangle$. Her betegner $|p\rangle$ en tilstand af formen (5.15), hvor $p = \hbar k$. Hvis k er positiv, svarer denne tilstand til bevægelse i den positive x-akses retning, jvf. (5.16).

I det følgende skal vi se, hvorledes reflektionskoefficienten i grænsen $E \gg V_0$ er proportional med absolutkvadratet på matrixelementet $\langle -p|V|p\rangle$, hvor $V(x)$ er den potentielle energi, der er givet ved (5.1) for en rektangulær barriere. Ved at sammenligne den tilnærmede bestemmelse af reflektionskoefficienten med den eksakte vil vi desuden kunne belyse ap-

[1] Ordet perturbation anvendes også i den klassiske fysik, f. eks. i forbindelse med beregning af planeternes baner omkring solen, når der ud over solens tiltrækning også tages hensyn til de små gravitationseffekter hidrørende fra de andre planeter.

proksimationens gyldighed. Hovedformålet med at gennemføre en tilnærmet bestemmelse af sandsynligheden for overgang fra $|p\rangle$ til $|-p\rangle$ er at illustrere anvendelsen af tidsafhængig perturbationsteori (afsnit 5.4.2). Ved hjælp af denne perturbationsteori vil vi vise den såkaldte 'gyldne regel' for overgangssandsynligheden[2]. Når den gyldne regel anvendes på spredningsproblemer (jvf. opgave 5.6), kaldes den i reglen Born-approksimationen.

5.4.1 Reflektion fra en barriere

Vi tager udgangspunkt i resultatet (5.33) for transmissionskoefficienten, der umiddelbart kan generaliseres til også at gælde for $E \geq V_0$, idet vi blot erstatter κ med $i\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$ (jvf. opgave 5.3). Da $\sinh(ix) = i\sin x$, bliver transmissionskoefficienten for $E \gg V_0$ altså givet ved

$$T = [1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(a\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar)]^{-1} \simeq 1 - \frac{V_0^2}{4E^2} \sin^2(a\sqrt{2mE}/\hbar). \tag{5.42}$$

Vi har her udnyttet, at $(1+\epsilon)^{-1} \simeq 1-\epsilon$, når $\epsilon \ll 1$ ($E \gg V_0$). I det følgende vil vi omforme dette approksimative resultat for reflektionskoefficienten $R = 1 - T$ og udtrykke R ved absolutkvadratet på matrixelementet $\langle -k|V|k\rangle$, der er givet ved

$$\langle -k|V|k\rangle = \frac{1}{(\sqrt{L})^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx (e^{i(-k)x})^* V(x) e^{ikx}. \tag{5.43}$$

Her er $V(x)$ den potentielle energi (5.1), og vi har benyttet fri-partikel tilstande af formen (5.15), med normeringskonstanten $A = 1/\sqrt{L}$. Ved at indsætte den potentielle energi (5.1) i (5.43) fås

$$\langle -k|V|k\rangle = \frac{V_0}{i2kL}(e^{ika} - e^{-ika}) = \frac{V_0}{kL} \sin ka. \tag{5.44}$$

Reflektionskoefficienten R, der ifølge (5.42) er givet ved

$$R = \frac{V_0^2}{4E^2} \sin^2(a\sqrt{2mE}/\hbar) \tag{5.45}$$

for $E \gg V_0$, kan da omformes til

$$R = \frac{1}{\hbar k/mL} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{mL}{2\pi\hbar^2 k} |\langle -k|V|k\rangle|^2, \tag{5.46}$$

[2]Betegnelsen 'den gyldne regel' blev anvendt af Enrico Fermi, og (5.63) kaldes derfor ofte Fermis gyldne regel, selvom den skyldes Dirac, Proc. Roy. Soc. **A112**, 661, 1926 og Proc. Roy. Soc. **A114**, 243, 1927.

idet $E = \hbar^2 k^2/2m$. Motiveringen for at skrive R på formen (5.46) er følgende: Vi ønsker at udtrykke reflektionskoefficienten R ved hjælp af en overgangssandsynlighed per tidsenhed, w, der er defineret ved at $w = JR$, hvor J er fluxen. I det éndimensionale tilfælde, som vi betragter, er fluxen identisk med strømmen j, der er givet ved udtrykket (4.15), d.v.s. $J = \hbar k/mL$. Af (5.46) ser vi da, at w er givet ved

$$w = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{mL}{2\pi\hbar^2 k}|\langle -k|V|k\rangle|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} g_{\text{slut}}|\langle -k|V|k\rangle|^2. \tag{5.47}$$

Ved den sidste omformning har vi indført tilstandstætheden hørende til sluttilstanden, g_{slut}, der i én dimension er halvt så stor som (4.59), svarende til at partiklen i sluttilstanden ($|-k\rangle$) bevæger sig i den ene retning på x-aksen, altså $g_{\text{slut}} = g/2$.

Lad os rekapitulere: Vi har i (5.42) omformet et eksakt resultat til et approksimativt udtryk, der kun gælder, når $E \gg V_0$. Derefter har vi indført overgangssandsynligheden per tidsenhed w (hvis dimension er invers tid eller T^{-1}) ved at udtrykke reflektionskoefficienten ved w og fluxen $J = \hbar k/mL$ ifølge $R = w/J$. Resultatet for w kan da skrives som $2\pi/\hbar$ gange tilstandstætheden g_{slut} gange absolutkvadratet på det matrixelement $\langle -k|V|k\rangle$, der forbinder begyndelsestilstanden $|k\rangle$ med sluttilstanden $|-k\rangle$. Bemærk, at matrixelementet på nær en konstant er den Fourier-transformerede af potentialet $V(x)$ med hensyn til ændringen $2k$ af partiklens bølgevektor. På denne form er resultatet generelt, så længe vi kan behandle perturbationen som en lille størrelse. Det gælder således både for tidsuafhængige og for tidsafhængige perturbationer, **forudsat** at det har mening at tale om tilstandstætheden g_{slut}. Eksistensen af et kontinuum af sluttilstande er altså en forudsætning for at anvende den gyldne regel.

5.4.2 Tidsafhængig perturbationsteori

Lad os antage, at et system er beskrevet ved Hamiltonoperatoren

$$H = H_0 + \lambda H'(t), \tag{5.48}$$

hvor H_0 er en tidsuafhængig Hamiltonoperator, hvis egentilstande ψ_k og egenværdier E_k antages at være kendte,

$$H_0\psi_k = E_k\psi_k. \tag{5.49}$$

Her betegner k et sæt af kvantetal[3], der karakteriserer egenværdierne og egentilstandene for H_0. Sættet af tilstande ψ_k antages at være fuldstændigt, således at en vilkårlig tilstandsvektor kan udvikles på dette. Med H' betegnes den del af Hamiltonoperatoren, der i det følgende vil blive behandlet som en perturbation. For at holde rede på ordenen i perturbationsudviklingen har vi multipliceret H' med den dimensionsløse parameter λ, der kan sættes til at være 1 i slutresultaterne eller bortdivideres som nedenfor.

Schrödingerligningen for systemet er

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (H_0 + \lambda H')\Psi. \tag{5.50}$$

Vi udvikler nu løsningen Ψ på det fuldstændige sæt ψ_k,

$$\Psi = \sum_l c_l(t)\psi_l e^{-iE_l t/\hbar}. \tag{5.51}$$

Koefficienterne c_l er i almindelighed funktioner af tiden. Kun hvis λ er nul, vil koefficienterne være tidsuafhængige.

Ved at indsætte tilstanden (5.51) i Schrödingerligningen (5.50) og tage det indre produkt af hver side med tilstanden ψ_k fås et (sædvanligvis uendeligt) system af koblede differentialligninger for $c_k(t)$

$$i\hbar\frac{dc_k(t)}{dt} = \sum_l \langle k|\lambda H'|l\rangle e^{-i(E_l-E_k)t/\hbar}c_l(t). \tag{5.52}$$

Vi har her udnyttet (5.49) samt ortonormeringen $\langle\psi_k|\psi_l\rangle = \delta_{kl}$ og ganget hver side af ligningen med $\exp(iE_kt/\hbar)$. Som sædvanlig angiver matrixelementet $\langle k|H'|l\rangle$ det indre produkt $\langle\psi_k|H'\psi_l\rangle$.

Det koblede system af ligninger (5.52) er eksakt og derfor lige så vanskeligt at løse som den oprindelige Schrödingerligning. Vi ser imidlertid, at omformuleringen af Schrödingerligningen giver et egnet udgangspunkt for perturbationsteorien, idet højre side af (5.52) er proportional med λ.

Vi rækkeudvikler nu koefficienterne c_k i potenser af λ,

$$c_k = c_k^{(0)} + \lambda c_k^{(1)} + \cdots. \tag{5.53}$$

[3]For en tredimensional harmonisk ocillator vil k således angive alle de mulige værdier af talsættet (n_x, n_y, n_z), hvor n_x, n_y, n_z gennemløber alle ikke-negative heltal.

Her er $c_k^{(0)}$ er uafhængig af tiden, svarende til at

$$\Psi^{(0)} = \sum_k c_k^{(0)} \psi_k e^{-iE_k t/\hbar} \tag{5.54}$$

er løsningen til Schrödingerligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_0 \Psi. \tag{5.55}$$

Lad os nu antage, at perturbationen H' er nul for $t < 0$ og konstant i tiden for $t > 0$. Inden perturbationen tilkobles, vides systemet at befinde sig i en bestemt tilstand ψ_m, svarende til at

$$c_k^{(0)} = \delta_{km}. \tag{5.56}$$

Ved kun at beholde led proportionale med λ og se bort fra alle højere-ordens led fås af (5.52) at

$$i\hbar \frac{dc_k^{(1)}(t)}{dt} = \sum_l \langle k|H'|l\rangle e^{-i(E_l - E_k)t/\hbar} \delta_{lm}. \tag{5.57}$$

På grund af tilstedeværelsen af δ_{lm} giver summen over l kun et enkelt led, svarende til $l = m$. Ved at integrere over tiden med den angivne begyndelsesbetingelse på H' fås da

$$c_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle k|H'(t')|m\rangle e^{-i(E_m - E_k)t'/\hbar} = -\frac{1}{\hbar\omega_{km}} (e^{i\omega_{km}t} - 1)\langle k|H'|m\rangle \tag{5.58}$$

idet vi har indført forkortelsen $\omega_{km} = (E_k - E_m)/\hbar$. Ved integrationen over t' har vi udnyttet vores antagelse, at matrixelementet $\langle k|H'|m\rangle$ er tidsuafhængigt. Hvis H' varierer harmonisk eller aftager eksponentielt med tiden, kan tidsintegrationen udføres uden væsentligt mere besvær.

For at finde overgangssandsynligheden P skal vi danne absolutkvadratet på $c_k^{(1)}(t)$ og summere over k, altså

$$P = \sum_k |c_k^{(1)}(t)|^2 = \sum_k \frac{4}{\hbar^2 \omega_{km}^2} \sin^2(\omega_{km} t/2) |\langle k|H'|m\rangle|^2. \tag{5.59}$$

Det er nu bekvemt at omdanne k-summen til en integration ved at indføre tilstandstætheden $g_{\text{slut}}(E_k)$, idet energiniveauerne antages at ligge så tæt, at de kan betragtes som et kontinuum. Herved fås

$$P = \int dE_k g_{\text{slut}}(E_k) \frac{4}{\hbar^2 \omega_{km}^2} \sin^2(\omega_{km} t/2) |\langle k|H'|m\rangle|^2. \tag{5.60}$$

For at få en idé til at udføre dette integral undersøger vi først funktionen

$$F(t,\omega) = \omega^{-2}\sin^2(\omega t/2), \tag{5.61}$$

hvor ω betegner integrationsvariablen ω_{km} (bemærk, at $dE_k = \hbar d\omega_{km}$). For $\omega \to 0$ er $F = t^2/4$, mens den symmetriske funktion F har sit første nulpunkt for $\omega = 2\pi/t$. Arealet under funktionen er givet ved

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\omega^{-2}\sin^2(\omega t/2) = \frac{\pi}{2}t. \tag{5.62}$$

Funktionen ligner altså deltafunktionen $\pi t\delta(\omega)/2$, og for tilstrækkeligt store t må vi kunne approksimere $F(t,\omega)$ ved denne. Fysisk set svarer dette til at opfatte matrixelementet og tilstandstætheden som funktioner, der varierer så langsomt[4] med ω_{km}, at vi kan betragte dem som konstanter. Disse størrelser kan derfor rykkes uden for integraltegnet med en værdi bestemt ved, at ω_{km} skal være nul, der er ensbetydende med betingelsen $E_k = E_m$.

Resultatet for overgangssandsynligheden per tidsenhed, w, bliver herefter

$$w = \frac{P}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} g_{\text{slut}}(E_m)|\langle k|H'|m\rangle|^2_{E_k=E_m}, \tag{5.63}$$

hvor vi eksplicit har angivet, at energien i sluttilstanden, E_k, skal sættes lig med begyndelsesenergien E_m ved bestemmelsen af matrixelementet.

Vi har hermed udledt den gyldne regel for det tilfælde, at perturbationen ikke afhænger eksplicit af tiden. Som det ses ved at sammenligne (5.47) med (5.63), er resultatet nøjagtig det samme som det approksimative udtryk, vi fandt ved at rækkeudvikle reflektionskoefficienten for store energier.

[4]At denne approksimation bryder sammen for tilstrækkeligt små t behøver ikke bekymre os, da vi er interesserede i at bestemme den (tidsuafhængige) overgangssandsynlighed per tidsenhed, $w = P/t$. Den beslægtede bekymring, at P er proportional med t og derfor i princippet kan blive større end 1 (et meningsløst resultat), bortvejres af samme grund.

5.5 Opgaver

OPGAVE 5.1

En partikel med masse M bevæger sig i potentialet V givet ved

$$V = \infty \text{ for } x < 0; \quad V = 0 \text{ for } 0 < x < a; \quad V = V_0 \text{ for } x > a, \tag{5.64}$$

hvor såvel V_0 som a er positive størrelser. Opgaven går ud på at finde en betingelse, som V_0 skal opfylde, for at der kan forekomme en bunden tilstand.

a) Find den mindst mulige værdi, V_{0c}, af konstanten V_0, for hvilken der kan forekomme netop én bunden tilstand, i tilfældet $a = 2 \cdot 10^{-15}$ m og $M = 8{,}4 \cdot 10^{-28}$ kg (det oplyses, at man kan vise, at bølgefunktionen for partiklens grundtilstand ikke har nulpunkter i det åbne interval $0 < x < \infty$).

b) Skitser udseendet af grundtilstandsbølgefunktionen og potentialet i hvert af de to tilfælde a) $V_0 = 1{,}2V_{0c}$ og b) $V_0 = 10V_{0c}$.

c) Hvilke af følgende tre fysiske systemer kan tænkes beskrevet ved dette potential med de i a) angivne parameterværdier: 1) en deuteriumkerne, 2) et brintatom, 3) et kvælstofmolekyle?

OPGAVE 5.2

Benyt (5.10) og den tilsvarende ligning for de ulige løsninger til at finde energierne af samtlige bundne tilstande i tilfældet $V_0 = 10$ ved grafiske eller numeriske metoder.

OPGAVE 5.3

Skitser hvorledes T afhænger af partikelenergien $E = \hbar^2 k^2/2m$ for en barriere svarende til $V_0 m a^2/\hbar^2 = 4$. Angiv hvorledes (5.33) modificeres, hvis E er større end V_0, og vis, at transmissionskoefficienten i dette tilfælde kan blive lig med 1 for bestemte værdier af E.

OPGAVE 5.4

Eftervis (5.41) og undersøg, hvorledes transmissionskoefficienten varierer som funktion af parameteren kl.

OPGAVE 5.5

Benyt den gyldne regel til at finde transmissionskoefficienten for barrieren

$$V(x) = V_0 e^{-x^2/a^2}, \tag{5.65}$$

hvor V_0 er en positiv konstant. Er der mulighed for selektiv transmission ($T = 1$)? Angiv en betingelse for selektiv transmission for en vilkårlig barriere på basis af den gyldne regel. Ændres resultatet ved et fortegnsskift for $V(x)$?

OPGAVE 5.6

I denne opgave vil vi behandle det egentlige spredningsproblem i tre dimensioner. Vi lader en plan bølge løbe ind mod et spredningscentrum, der beskrives ved et potential $V(\vec{r})$. Systemet tænkes indeholdt i en kasse med kantlængder L (volumen L^3). Vi vil studere overgangen $\vec{k} \to \vec{k}'$, hvor $\vec{k}$ er bølgetalsvektoren for den plane bølge (4.54), og søge at bestemme overgangssandsynligheden (per tidsenhed) fra $\vec{k}$ til et rumvinkelelement $d\Omega$ omkring $\vec{k}'$,

a) Vis ved brug af periodiske randbetingelser, at tætheden af tilstande inden for rumvinkelelementet $d\Omega$ er

$$g(E) = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{\sqrt{2m^3 E}}{\hbar^3} d\Omega, \tag{5.66}$$

hvor $E = \hbar^2 k^2/2m = \hbar^2 k'^2/2m$.

Vi kan nu finde overgangssandsynligheden per tidsenhed udtrykt ved blandt andet $V(\vec{r})$. Af mere umiddelbar fysisk interesse er imidlertid det såkaldte differentielle spredningstværsnit $d\sigma$, der er defineret som det areal, der fremkommer, når vi dividerer overgangssandsynligheden per tidsenhed med fluxen, d. v. s. det antal partikler, der per tidsenhed rammer en fladeenhed.

b) Vis, at fluxen hørende til bølgefunktionen for den indkommende partikel er $\hbar k/mL^3$. Vis endvidere, at det differentielle tværsnit for spredning fra $\vec{k}$ til et rumvinkelelement $d\Omega$ omkring $\vec{k}'$ er

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |\tilde{V}(\vec{k} - \vec{k}')|^2 d\Omega \tag{5.67}$$

hvor $\tilde{V}(\vec{q})$ er Fourier-komponenten

$$\tilde{V}(\vec{q}) = \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}. \tag{5.68}$$

Integrationen i (5.68) kan udstrækkes over hele rummet, idet vi lader kassens kantlængde gå mod uendelig.

c) Vis, at tværsnittet (5.67) kun afhænger af $q = |\vec{k} - \vec{k}'|$, forudsat at potentialet er sfærisk symmetrisk. Lad θ betegne vinklen mellem $\vec{k}$ og $\vec{k}'$, idet $k = k'$. Vis, at

$$q = 2k \sin(\theta/2). \tag{5.69}$$

Det totale spredningstværsnit σ er defineret ved rumvinkel-integration af det differentielle spredningstværsnit,

$$\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \int d\Omega |\tilde{V}(\vec{k} - \vec{k}')|^2. \tag{5.70}$$

Ved integrationen lægges polaraksen bekvemt i retning af $\vec{k}$, således at $d\Omega = d(\cos\theta)d\phi$.

d) Find $d\sigma$ og σ for potentialet

$$V(r) = \frac{Ze_0^2}{r} e^{-r/a}, \tag{5.71}$$

der betegnes som det afskærmede Coulomb-potential (i kernefysikken Yukawa-potentialet). Undersøg $d\sigma$ for $a \to \infty$ og sammenlign med Rutherford-formlen fra den klassiske fysik. Vis, at det totale tværsnit divergerer for $a \to \infty$. Hvordan afhænger σ af energien $E = \hbar^2 k^2/2m$ for store værdier af denne? Under hvilke betingelser kan man forvente, at vores approksimative behandling af spredningsproblemet (brug af den gyldne regel) giver et rimeligt resultat?

e) Find sluttelig $d\sigma$ og σ for potentialet

$$V(\vec{r}) = A\delta(\vec{r}), \tag{5.72}$$

hvor A er en konstant, og sammenlign med resultatet for det afskærmede Coulombpotential.

6 Elektron i magnetfelt

I dette kapitel skal vi indføre magnetfeltet i den klassiske Hamiltonfunktion for en ladet partikel som udgangspunkt for kvantiseringen af partiklens bevægelse. Den resulterende Hamiltonoperator for en ladet partikel i et homogent magnetfelt indeholder et led, der har samme form som Hamiltonoperatoren for et harmonisk oscillatorpotential. Dermed kan vi bestemme energiegenværdierne for partiklen ved at udnytte resultaterne fra kapitel 2. Det viser sig, at energikvantet for denne bevægelse er givet ved den klassiske cyklotronfrekvens gange med Plancks konstant. Vi skal omtale betydningen af denne kvantisering for Hall-effekten i en elektrongas, der kun kan bevæge sig i to dimensioner, vinkelret på magnetfeltets retning.

6.1 Den klassiske Hamiltonfunktion

Når en elektron med ladning $-e$ bevæger sig med hastigheden $\vec{v}$ i et magnetfelt $\vec{B}$, vil den påvirkes af en kraft vinkelret på såvel hastigheden som magnetfeltet. Denne kraft $\vec{F}$ er proportional med elektronens ladning samt med størrelsen af hastigheden vinkelret på magnetfeltet og er givet ved

$$\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B}. \tag{6.1}$$

Da kraften er vinkelret på magnetfeltet, kan den ikke ændre komposanten af partiklens hastighed i magnetfeltets retning. Ydermere kan vi indse, at partiklens fart må være konstant, da magnetfeltet intet arbejde udfører, når kraften er vinkelret på hastigheden. Vælges magnetfeltets retning som z-akse, kan vi altså slutte, at hastighedskomposanten v_z er en bevægelseskonstant, samt at $v_x^2 + v_y^2$ ligeledes er konstant under bevægelsen. I det følgende skal vi se, at bevægelsen af partiklen udgør en cirkelbane i planen vinkelret på magnetfeltets retning.

Når kraften på elektronen er givet ved (6.1), antager Newtons 2. lov følgende udseende

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{v} \times \vec{B}, \tag{6.2}$$

idet elektronens masse betegnes med m. Hvis magnetfeltets retning vælges som z-akse, bliver

bevægelsesligningen (6.2) for hver af hastighedskomposanterne

$$m\dot{v}_x = -eBv_y, \quad m\dot{v}_y = eBv_x, \quad m\dot{v}_z = 0. \tag{6.3}$$

Af (6.3) ser vi straks, at hastigheden v_z langs magnetfeltets retning ikke ændrer sig med tiden, samt at $v_x^2 + v_y^2$ ligeledes er konstant i tiden, idet $v_x\dot{v}_x + v_y\dot{v}_y = 0$. Ved at eliminere v_y af de to første ligninger i (6.3) fås

$$\ddot{v}_x + \omega_c^2 v_x = 0, \tag{6.4}$$

hvor

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \tag{6.5}$$

er den såkaldte cyklotronfrekvens, der er omtalt i kapitel 1. Det følger af (6.4), at

$$v_x = v_0 \cos \omega_c t \tag{6.6}$$

er en løsning, idet vi har antaget, at $v_x = v_0$ til tiden $t = 0$. Endvidere ses det, at $v_y = v_0 \sin \omega_c t$ er løsning for y-komponenten af hastigheden, svarende til at $v_y = 0$ til samme tidspunkt, $t = 0$.

Vi går i det følgende ud fra kraften (6.1) og skal nu vise, at Lagrangefunktionen for en ladet partikel med masse m og ladning $-e$ i et statisk magnetfelt $\vec{B} = \vec{B}(\vec{r})$ er givet ved

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2 - e\vec{A} \cdot \dot{\vec{r}}. \tag{6.7}$$

hvor $\vec{A}$ betegner vektorpotentialet, der bestemmer magnetfeltet $\vec{B}$ ifølge

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}. \tag{6.8}$$

Opgaven består nu i at vise, at de Hamiltonske ligninger baseret på (6.7-8) resulterer i udtrykket (6.1) for kraften på en ladet partikel.

Betingelsen (6.8) er ikke tilstrækkelig til at fastlægge vektorpotentialet entydigt. For eksempel kan vi se, at

$$\vec{A} : B(0, x, 0) \tag{6.9}$$

og

$$\vec{A}' : \frac{B}{2}(-y, x, 0) \tag{6.10}$$

begge svarer til et magnetfelt langs z-aksen givet ved

$$\vec{B} : (0, 0, B). \tag{6.11}$$

En ændring af vektorpotentialet $\vec{A}$, der ikke afstedkommer nogen ændring af magnetfeltet $\vec{B}$, svarende til overgangen fra (6.9) til (6.10), kaldes en gauge-transformation. Transformationen tilvejebringes ved at addere gradienten af en skalar funktion af $\vec{r}$ til $\vec{A}$, i dette tilfælde gradienten af funktionen $-Bxy/2$.

Den generaliserede impuls $\vec{p}$ indføres ved brug af definitionen (2.31),

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}}. \tag{6.12}$$

Det ses, at den generaliserede impuls ikke simpelthen er $m\dot{\vec{r}}$, men er givet ved

$$\vec{p} = m\dot{\vec{r}} - e\vec{A}. \tag{6.13}$$

Vi vil nu beregne den tidsafledede $\dot{\vec{p}}$. Ifølge (2.34) er

$$\dot{\vec{p}} = \frac{\partial L}{\partial \vec{r}}. \tag{6.14}$$

Idet $\dot{\vec{r}}$ betegnes med $\vec{v}$, får man ved brug af reglerne fra vektoranalysen[1]

$$\dot{\vec{p}} = -e\nabla(\vec{A} \cdot \vec{v}) = -e\vec{v} \times (\nabla \times \vec{A}) - e(\vec{v} \cdot \nabla)\vec{A}. \tag{6.15}$$

Bemærk, at $\vec{r}$ og $\vec{v}$ er uafhængige variable, hvorfor højresiden af (6.15) kun indeholder afledede af $\vec{A}$.

Da vi har forudsat, at $\vec{B}$ er uafhængig af tiden, kan $\vec{A}$ ikke afhænge eksplicit af tiden. Derfor er den tidsafledede af $\vec{A}$ givet ved

$$\dot{\vec{A}} = (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{A}. \tag{6.16}$$

Ud fra (6.7) og (6.13-16) fås nu

$$m\dot{\vec{v}} = \dot{\vec{p}} + e\dot{\vec{A}} = -e\vec{v} \times \vec{B} \tag{6.17}$$

[1]Det gælder i almindelighed, at

$$\nabla(\vec{A} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \times (\nabla \times \vec{B}) + \vec{B} \times (\nabla \times \vec{A}) + (\vec{A} \cdot \nabla)\vec{B}. + (\vec{B} \cdot \nabla)\vec{A}.$$

i overensstemmelse med (6.1).

Hamiltonfunktionen for en ladet partikel i et magnetfelt er således

$$H = \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} - L = \frac{1}{2m}(\vec{p} + e\vec{A})^2. \tag{6.18}$$

Bemærk at ladningen er $-e$, hvor e er positiv.

Resultatet (6.18) er udgangspunktet for den kvantemekaniske behandling af en elektrons bevægelse i et magnetfelt. Vi skal i det følgende afsnit benytte denne Hamiltonoperator med $\vec{p} = \hbar\nabla/i$ til at bestemme de mulige energiniveauer i et magnetfelt.

6.2 Kvantisering

Den kvantemekaniske behandling af en elektrons bevægelse i et homogent magnetfelt tager udgangspunkt i den klassiske Hamiltonfunktion, idet den generaliserede impuls $\vec{p}$ erstattes med operatoren $\hbar\nabla/i$. Dette resulterer i en Hamiltonoperator, der minder om den, der bestemmer egenværdierne for en partikel i et harmonisk oscillatorpotential. Svarende til de skabelses- og annihilationsoperatorer, der blev indført i kapitel 2, kan vi definere operatorer, der tilfredsstiller analoge ombytningsrelationer, og dermed direkte udnytte resultaterne fra kapitel 2. Alternativt kan energiegenværdierne bestemmes ved at løse Schrödingerligningen. Herved er det muligt samtidig at finde udartningsgraden for de enkelte energiniveauer. Som vi skal se, er denne givet ved den magnetiske flux divideret med det magnetiske fluxkvantum h/e, når der ses bort fra elektronens spin.

6.2.1 Hamiltonoperator og energispektrum

Hamiltonoperatoren for en elektron, der bevæger sig i et magnetfelt er ifølge (6.18) givet ved

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\hat{\vec{v}}^2 = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}} + e\vec{A})^2. \tag{6.19}$$

Det er nemmest at benytte vektorpotentialet (6.9), der betegnes som Landau-gauge. Herved bliver komposanterne af hastighedsoperatoren $\hat{\vec{v}}$ givet ved

$$\hat{v}_x = \frac{\hbar}{im}\frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{v}_y = \frac{\hbar}{im}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{eB}{m}x; \quad \hat{v}_z = \frac{\hbar}{im}\frac{\partial}{\partial z}. \tag{6.20}$$

Af (6.20) ser vi, at hastighedskomposanterne ikke længere er indbyrdes ombyttelige på grund af magnetfeltets tilstedeværelse, idet

$$[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \frac{\hbar\omega_c}{im}, \tag{6.21}$$

hvor

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \tag{6.22}$$

er elektronens klassiske omløbsfrekvens.

Som for den harmoniske oscillator er det bekvemt at indføre operatorer ved definitionen

$$\hat{v}^\dagger = \hat{v}_x + i\hat{v}_y \tag{6.23}$$

og

$$\hat{v} = \hat{v}_x - i\hat{v}_y. \tag{6.24}$$

Disse operatorer tilfredsstiller lignende ombytningsrelationer som skabelses- og annihilationsoperatorerne for den harmoniske oscillator, idet (6.21) medfører at

$$[\hat{v}, \hat{v}^\dagger] = 2\frac{\hbar\omega_c}{m}. \tag{6.25}$$

Svarende til (2.91) kan Hamiltonoperatoren da udtrykkes som

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\hat{\vec{v}}^2 = \frac{1}{2}m\hat{v}_z^2 + \frac{1}{2}m\hat{v}^\dagger\hat{v} + \frac{1}{2}im[\hat{v}_x, \hat{v}_y]. \tag{6.26}$$

Idet antalsoperatoren $\hat{N}$ defineres ved

$$\hat{N} = \frac{m}{2\hbar\omega_c}\hat{v}^\dagger\hat{v}, \tag{6.27}$$

kan Hamiltonoperatoren (6.26) skrives på formen

$$\hat{H} = \hbar\omega_c(\hat{N} + \frac{1}{2}) + \frac{1}{2}m\hat{v}_z^2. \tag{6.28}$$

Bortset fra det sidste led i (6.28), der vedrører partiklens bevægelse i magnetfeltets retning, har Hamiltonoperatoren altså det samme udseende som Hamiltonoperatoren for den harmoniske oscillator, idet ombytningsrelationerne for $\hat{N}$ og operatorerne $\hat{v}$, $\hat{v}^\dagger$ på nær konstanter er de samme som (2.92-93). Vi skal blot erstatte oscillatorens klassiske angulære frekvens ω med cyklotronfrekvensen ω_c.

6.2.2 Udartning

Ved brug af periodiske randbetingelser i magnetfeltets retning kan egentilstandene for Hamiltonoperatoren (6.28) angives på formen

$$|\nu, k_z\rangle, \tag{6.29}$$

med de tilhørende energiegenværdier

$$E_{\nu,k_z} = (\nu + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \tag{6.30}$$

Her kan kvantetallet ν som for den harmoniske oscillator antage værdierne $0, 1, 2, \cdots$, mens k_z på grund af de periodiske randbetingelser ligeledes antager diskrete værdier, der er givet ved $k_z L = 2\pi p$, hvor p er et helt tal, der kan være positivt, negativt eller nul.

Til forskel fra den éndimensionale harmoniske oscillator er spektret (6.30) imidlertid stærkt udartet, i den forstand at der er mange, af hinanden lineært uafhængige, egentilstande hørende til en bestemt værdi af ν. Årsagen til denne udartning er, at der ud over Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ og impulskomposanten $\hat{p}_z$ eksisterer endnu en operator, der er ombyttelig med disse to og derfor modsvarer en klassisk bevægelseskonstant. Når vektorpotentialet er valgt til at være (6.9), er denne operator $\hat{p}_y$. Som vist i kapitel 3 er det muligt at finde fælles egentilstande for sådanne indbyrdes ombyttelige operatorer. Vi kan derfor yderligere mærke egentilstandene ved egenværdien k_y for $\hat{p}_y/\hbar$

$$|\nu, k_y, k_z\rangle, \tag{6.31}$$

men det bør bemærkes, at egenværdierne k_y ikke har nogen indflydelse på energiegenværdierne. Derimod bestemmer de udartningsgraden, som vi nu skal finde ved brug af periodiske grænsebetingelser.

Ved at løse Schrödingerligningen for bølgefunktionen ψ_{ν,k_y,k_z}, der afhænger af x, y og z, skal vi nu give en alternativ udledelse af energispektret (6.30) og samtidig bestemme niveauernes udartningsgrad. Vi kan umiddelbart angive bølgefunktionens afhængighed af z og y på basis af eksistensen af de to bevægelseskonstanter knyttet til operatorerne $\hat{p}_z$ og $\hat{p}_y$,

$$\psi_{\nu,k_y,k_z}(x, y, z) = e^{ik_y y} e^{ik_z z} f(x). \tag{6.32}$$

Her er f en funktion af x, der opfylder

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2f}{dx^2}+\frac{1}{2m}(\hbar k_y+eBx)^2f+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}f=Ef. \tag{6.33}$$

Ligningen (6.33) er Schrödingerligningen, hvor vi blot har bortdivideret eksponentialfunktionerne, der indgår i (6.32). Det ses, at ligningen (bortset fra tilstedeværelsen af konstanten $\hbar^2k_z^2/2m$) har samme form som Schrödingerligningen for en harmonisk oscillator, hvis nulpunkt er forskudt med stykket x_0 langs x-aksen, hvor

$$x_0=-\frac{\hbar k_y}{eB}. \tag{6.34}$$

Ved sammenligning med egenværdierne (2.103) for den éndimensionale harmoniske oscillator ses det umiddelbart af (6.33), at egenværdierne er givet ved (6.30).

Udartningsgraden af et niveau med et givet ν, k_z bestemmes ved at forlange, at oscillatorens minimum (6.34) befinder sig inden for det forelagte volumen[2]. Da antallet af tilstande hørende til intervallet Δk_y er givet ved $L\Delta k_y/2\pi$, og da betingelsen $0<x_0<L$ medfører at

$$\Delta k_y=\frac{eBL}{\hbar}, \tag{6.35}$$

bliver antallet N_u af lineært uafhængige tilstandsvektorer hørende til et givet ν, k_z lig med[3]

$$N_u=\frac{eBL^2}{2\pi\hbar}. \tag{6.36}$$

Resultatet (6.36) for udartningsgraden N_u kan gives en anskuelig fortolkning ved at opfatte h/e som et fluxkvantum. Herved bliver udartningsgraden lig med det antal fluxkvanter, som svarer til den magnetiske flux BL^2.

EKSEMPEL 6. DEN SYMMETRISKE GAUGE.

Vi skal i dette eksempel opstille Schrödingerligningen for en elektron i et magnetfelt ved brug af den symmetriske gauge (6.10) og se, hvorledes udartningsgraden af energiniveauerne kan bestemmes. Formålet med dette er at vise, hvorledes overgangen til cylinderkoordinater indfører et effektivt potential i ligningen for

[2]Denne betingelse kan strengt taget ikke anvendes på de tilstande, for hvilke oscillatorens minimum ligger nær ved (eller på) overfladen, men sålænge udartningsgraden er stor, vil minimet for praktisk taget alle tilstande befinde sig langt fra overfladen, i det indre af det forelagte volumen.

[3]Der ses her bort fra spin.

den radiale del af bølgefunktionen. Vi skal senere se (afsnit 7.4), hvorledes et tilsvarende effektivt potential indgår i beskrivelsen af bevægelse i et centralfelt.

a) Vi opstiller først Schrödingerligningen i cylinderkoordinater givet ved

$$x = \rho\cos\phi, \qquad y = \rho\sin\phi. \tag{6.37}$$

De omvendte relationer er

$$\tan\phi = \frac{y}{x}, \quad \rho = \sqrt{x^2+y^2}. \tag{6.38}$$

Opgaven består nu i at udtrykke Laplace-operatoren i cylinderkoordinater ved brug af

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial\rho}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{6.39}$$

og det tilsvarende udtryk for $\partial/\partial y$. Ved brug af (6.37) fås

$$\frac{\partial}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\rho}, \tag{6.40}$$

og

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\cos\phi}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin\phi\frac{\partial}{\partial\rho}. \tag{6.41}$$

Det følger af disse relationer, at Laplace-operatoren i cylinderkoordinater er

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{6.42}$$

Løsningen til Schrödingerligningen kan nu separeres ifølge

$$\psi = e^{ik_z z}e^{im\phi}f(\rho). \tag{6.43}$$

Funktionen $f(\rho)$ bestemmes ved at indsætte (6.43) i Schrödingerligningen med Hamiltonoperatoren givet ved (6.19). Ligningen for f bliver da

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{\rho}\frac{df}{d\rho} + \frac{d^2f}{d\rho^2} - \frac{m^2}{\rho^2}f\right) + \frac{em\hbar}{2m_e}Bf + \frac{e^2B^2}{8m_e}\rho^2 f = \left(E - \frac{\hbar^2k_z^2}{2m_e}\right)f. \tag{6.44}$$

Vi har her angivet elektronens masse ved m_e for at undgå forveksling med kvantetallet m. Det er bekvemt at indføre de dimensionsløse variable $x = \rho\sqrt{eB/\hbar}$ og $\epsilon = (E - \hbar^2k_z^2/2m_e)/\hbar\omega_c$. Samtidig indfører vi en ny funktion $g(x)$ ved $f = g(x)/\sqrt{x}$ for at eliminere den første afledede. Herved bliver ligningen

$$-\frac{1}{2}g'' + \frac{1}{2}\left(m + \frac{x^2}{4} + \left[m^2 - \frac{1}{4}\right]\frac{1}{x^2}\right)g = \epsilon g, \tag{6.45}$$

hvor mærkerne angiver differentiation med hensyn til x. Problemet er nu blevet analogt med bevægelse i én dimension, idet x dog varierer mellem 0 og ∞. For $|m| \gg 1$ har det effektive potential for $m < 0$ minimum i $x = x_0 = \sqrt{2|m|}$ med minimumsværdien 0. Omkring dette minimum kan det effektive potential (koefficienten til g på venstre side af ligningen) approksimeres ved $(x - x_0)^2/2$ (dette indses ved at differentiere det effektive potential to gange med hensyn til x og indsætte $x = x_0$). Den tilsvarende harmoniske oscillator ses at have

grundtilstandsenergien 1/2, i overensstemmelse med (6.30). Udartningsgraden findes af betingelsen $x_0 < R$, hvor R er radius af den cylinder, hvori elektronen tænkes at være indesluttet, i enheder af $\sqrt{\hbar/eB}$. Idet den maksimale værdi af $|m|$ hørende til energien 1/2 er udartningsgraden N_u, fås $N_u = \max|m| = \max x_0^2/2$, eller $N_u = eBR^2/2\hbar$. Vi ser således, at $N_u = eB\pi R^2/h$ i overensstemmelse med (6.36).

Udartningsgraden (6.36) har betydning for kvante-Hall-effekten, som blev opdaget eksperimentelt i todimensionale elektronsystemer af K. v. Klitzing i 1980. Inden vi omtaler denne, skal vi kort erindre om den klassiske Hall-effekt, der første gang blev observeret af Hall i 1880. Når en strømbærende elektrisk leder er anbragt i et magnetfelt vinkelret på strømmens retning, kan man observere en spændingsforskel på tværs af både strømmens og magnetfeltets retning. Strømmens retning er altså ikke den samme som det elektriske felts retning, når lederen er anbragt i et magnetfelt. Hvis magnetfeltet er tilstrækkeligt stærkt, kan det elektriske felt stå næsten vinkelret på strømmens retning.

Hvis vi sender en strøm igennem en leder, der befinder sig i et magnetfelt vinkelret på strømmens retning, vil magnetfeltet forsøge at afbøje elektronerne i deres bane. Da vi ved, at elektronernes drifthastighed $\vec{v}_d$ har en bestemt retning, nemlig lederens længderetning, må der derfor opbygges et elektrisk felt på tværs af strømmens retning, hidrørende fra ladningsforskydninger ved lederens overflade. Dette tværfelt har en størrelse, der netop sikrer at elektronerne bevæger sig i lederens længderetning. Tværfeltet kaldes for Hall-feltet og betegnes med E_{H}. Dets størrelse er bestemt af, at de to kræfter vinkelret på strømretningen, hidrørende fra henholdsvis tværfelt og magnetfelt, ophæver hinanden,

$$0 = -eE_{\mathrm{H}} + ev_dB. \tag{6.46}$$

Heraf ses, at $E_{\mathrm{H}} = v_dB$, der viser, at tværspændingen vokser proportionalt med strømmen. Ved at benytte sammenhængen $j = -nev_d$ mellem strømtætheden j og størrelsen af drifthastigheden v_d, hvor n er elektrontætheden, kan Hall-feltet udtrykkes som

$$E_{\mathrm{H}} = R_{\mathrm{H}}jB, \tag{6.47}$$

hvor

$$R_{\mathrm{H}} = -\frac{1}{ne} \tag{6.48}$$

kaldes for Hall-konstanten. Denne konstant afhænger altså alene af elektronernes ladning $-e$ og deres tæthed n.

I de nævnte todimensionale elektronsystemer er energispektret givet ved (6.30) på nær det sidste led, idet værdien af k_z med god tilnærmelse kan sættes til at være nul. Da hvert niveau hørende til kvantetallet ν kan rumme lige så mange elektroner som udartningsgraden (6.36) angiver, vil antallet af elektroner per fladeenhed n være givet ved

$$n = \nu_0 \frac{N_u}{L^2} = \nu_0 \frac{Be}{h}, \tag{6.49}$$

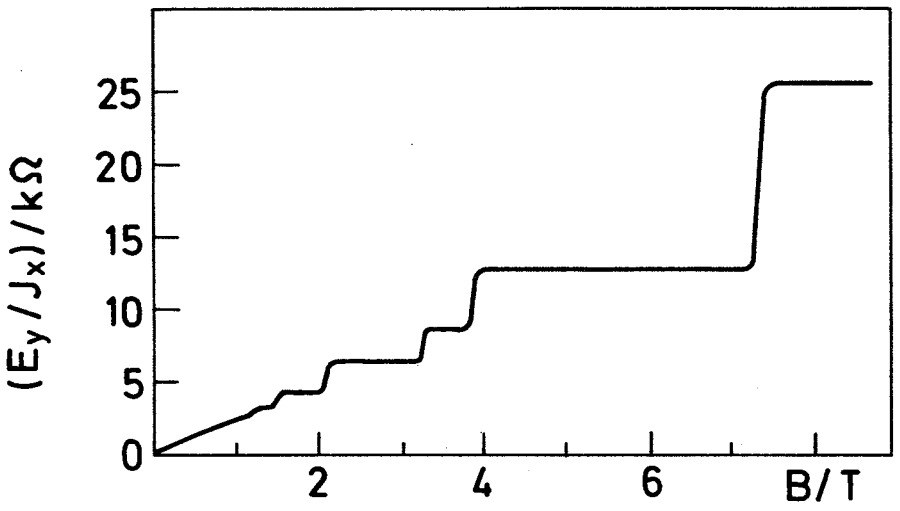
hvis netop ν_0 niveauer er fyldt helt op med elektroner. Størrelsen af N_u kan i praksis være omkring 10^8.

Sammenhængen mellem fladestrømtætheden j_x (defineret som strømmen per længdeenhed med dimension amp/m) og det elektriske felt E_y (hvis dimension er volt/m) er da

$$j_x = -\frac{ne}{B} E_y = -\nu_0 \frac{e^2}{h} E_y. \tag{6.50}$$

Ifølge (6.50) kan man vente, at det observerede forhold mellem j_x og E_y er et helt multiplum af det fundamentale kvantum e^2/h, der er lig med $3,8740 \cdot 10^{-5}$ ohm^{-1}. Målinger af denne kvante-Hall-effekt kan udnyttes til en præcisionsbestemmelse af h/e^2 med en relativ nøjagtighed, der er omkring 10^{-7}. I fig. 6.1 har vi vist resultatet af målinger[4] af E_y/j_x i en GaAs-AlGaAs heterostruktur ved $T = 8$ mK. Den simple beskrivelse af kvante-Hall-effekten, vi her har givet, knytter udartningsgraden (6.36) til eksistensen af de observerede plateauer i E_y/j_x, men den forklarer ikke, hvorfor man iagttager plateauer med en endelig bredde. Tager man nemlig denne fri-elektron model alvorligt, bliver sammenhængen mellem E_y/j_x og B i fig. 6.1 en ret linje med hældning $-1/ne$, ganske som for den klassiske Hall-effekt. Plateauernes endelige bredde skyldes formodentlig tilstedeværelsen af urenheder, men en nærmere diskussion af dette spørgsmål, der endnu ikke er fuldt afklaret, falder uden for denne fremstillings rammer.

[4] K. v. Klitzing og G. Ebert, Physica B+C **117-118**, 682, 1983.



Figur 6.1: Kvante-Hall-effekten. Figuren viser den målte værdi af E_y/j_x som funktion af magnetfeltets styrke B, målt i tesla.

6.3 Opgaver

OPGAVE 6.1

En partikel med ladning q bevæger sig i et harmonisk oscillatorpotential givet ved $V(x,y,z) = K(x^2+y^2+z^2)/2$ under indflydelse af et homogent magnetfelt $\vec{B}$. I opgaven benyttes vektorpotentialet (6.9).

a) Vis, at impulsoperatoren $\hat{\vec{p}}$ er ombyttelig med $\vec{A}$, svarende til $\hat{\vec{p}} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \hat{\vec{p}}$.

Magnetfeltet regnes i det følgende for at være tilstrækkeligt svagt til, at man i Hamiltonoperatoren kan se bort fra led, der er kvadratiske i B. Vi betegner med $|n_x, n_y, n_z\rangle$ en egentilstand for Hamiltonoperatoren uden magnetfelt (jvf. opgave 3.5).

b) Idet magnetfeltets bidrag til Hamiltonoperatoren kaldes H', skal forventningsværdien af H' bestemmes for hver af tilstandene $|0,0,0\rangle, |1,0,0\rangle, |0,1,0\rangle$ og $|0,0,1\rangle$.

c) Opskriv Hamiltonoperatoren i den basis, der udgøres af tilstandene $|1,0,0\rangle, |0,1,0\rangle$ og $|0,0,1\rangle$, og find egenværdierne af den fremkomne 3×3 matrix. Angiv de tilhørende egentilstande.

OPGAVE 6.2

En partikel med masse m bevæger sig i et potential givet ved

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \text{ for } x > 0, \quad V(x) = \infty \text{ for } x < 0, \tag{6.51}$$

hvor K er en positiv konstant.

a) Angiv systemets grundtilstandsenergi og skitser den tilhørende bølgefunktion.

b) Til tidspunktet $t = 0$ ændres den potentielle energi til at være

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \text{ for alle } x, \tag{6.52}$$

svarende til en sædvanlig harmonisk oscillator med angulær frekvens $\omega = \sqrt{K/m}$. Bølgefunktionen til tiden $t = 0$ antages at være den under a) fundne. Hvad er sandsynligheden for til et senere tidspunkt ($t > 0$) at måle værdien $\hbar\omega/2$ for partiklens energi? Hvad er sandsynligheden for at måle værdien $3\hbar\omega/2$?

OPGAVE 6.3

En partikel med masse m bevæger sig i xy-planen inden for et område afgrænset af uligheder

$$0 \leq x \leq L_1; \; 0 \leq y \leq L_2. \tag{6.53}$$

Inden for dette område er potentialet V konstant, $V = 0$, mens det er uendeligt stort udenfor. Det benyttes, at partiklens bølgefunktion er nul på områdets rand.

a) Angiv energi og bølgefunktion for grundtilstanden.

b) Vis på en tegning beliggenheden af de fire laveste energiniveauer i tilfældet $L_1 = 2L_2$ og anfør de tilhørende kvantetal.

c) Besvar spørgsmål b) i tilfældet $L_1 = L_2$.

7 Impulsmoment

Ifølge den klassiske mekanik vil en partikels impulsmoment være bevaret i tiden, hvis partiklen bevæger sig i et centralfelt, således at den potentielle energi kun afhænger af partiklens afstand fra et fast punkt. Under disse omstændigheder er kraften rettet langs partiklens stedvektor regnet fra det faste punkt. Kraftmomentet med hensyn til dette punkt må derfor være nul, og som følge heraf vil impulsmomentet ikke ændre sig med tiden. Bevarelsen af impulsmomentet er en konsekvens af den symmetri, der kommer til udtryk i, at den potentielle energi er uændret (invariant) med hensyn til drejninger omkring det faste punkt. For den kvantemekaniske beskrivelse betyder eksistensen af denne symmetri, at operatorerne hørende til de enkelte komposanter af impulsmomentet hver for sig er ombyttelige med Hamiltonoperatoren. De enkelte komposanter af partiklens impulsmoment er imidlertid ikke indbyrdes ombyttelige. Dette ses af udtrykket for det klassiske impulsmoment $\vec{L}$,

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}, \tag{7.1}$$

idet $\vec{r}$ og $\vec{p}$ i kvantemekanikken er repræsenteret ved ikke-ombyttelige operatorer.

Ombytningsrelationerne for impulsmomentets komposanter vil i dette kapitel blive udledt på basis af det klassiske udtryk (7.1). Disse ombytningsrelationer medfører, at de tre komposanter ikke samtidig kan tillægges bestemte værdier. Derimod er det muligt at bestemme fælles egentilstande for en komposant af impulsmomentet og kvadratet på dets længde. Egenværdierne for en komposant af impulsmomentet viser sig at være et hel- eller halvtalligt multiplum af Plancks konstant $\hbar$. De halvtallige egenværdier har ingen analogi i den klassiske fysik. De er en konsekvens af, at den bølgeligning, der beskriver partiklens bevægelse, skal tilfredsstille relativitetsteoriens krav om Lorentzinvarians. I den forstand er ombytningsrelationerne mellem impulsmomentets komposanter mere generelle end udgangspunktet (7.1).

7.1 Impulsmomentkvantisering

I det følgende skal vi først indføre baneimpulsmomentet for en partikel, der bevæger sig i et konstant magnetfelt og diskutere kvantiseringen af en enkelt komposant af impulsmomentet. Valget af den symmetriske form af vektorpotentialet (6.10) medfører, at z-komposanten af

impulsmomentet klassisk set er en bevægelseskonstant. Den tilhørende operator er ombyttelig med Hamiltonoperatoren. Dette afspejler systemets axialsymmetri, der er udtrykt ved, at Hamiltonoperatoren er uændret under drejninger om magnetfeltets retning.

Hamiltonoperatoren for en elektron (ladning $-e$), der bevæger sig i et magnetfelt beskrevet ved vektorpotentialet $\vec{A}$, er anført i (6.19). I stedet for at benytte den asymmetriske Landau-gauge (6.9) skal vi i det følgende anvende den symmetriske gauge, der er givet ved (6.10). Når dette udtryk for vektorpotentialet indsættes i (6.19), bliver resultatet

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \frac{e}{2m} B \hat{L}_z + \frac{e^2 B^2}{8m}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2), \tag{7.2}$$

hvor

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \tag{7.3}$$

er den kvantemekaniske operator hørende til z-komposanten af partiklens klassiske baneimpulsmoment (7.1). Ved at benytte ombytningsrelationerne svarende til (2.44),

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij};\ i, j = 1, 2, 3, \tag{7.4}$$

hvor (q_1, q_2, q_3) betegner (x, y, z) og (p_1, p_2, p_3) tilsvarende (p_x, p_y, p_z), ses det at

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = [\hat{p}_z, \hat{H}] = [\hat{L}_z, \hat{p}_z] = 0. \tag{7.5}$$

Det er altså muligt at finde fælles egentilstande for de tre operatorer $\hat{H}$, $\hat{L}_z$ og $\hat{p}_z$. Vi skal i denne sammenhæng ikke beskæftige os med egenværdierne for $\hat{H}$. Som vist i eksempel 6 i kapitel 6 er de identiske med resultatet (6.30), der blev bestemt ved at benytte den asymmetriske Landau-gauge. Dette er, hvad vi ville forvente, da de to vektorpotentialer (6.9-10) svarer til samme magnetfelt. Derimod ser de tilhørende bølgefunktioner forskellige ud. Mens bølgefunktionen svarende til en bestemt værdi af k_y ifølge (6.32-33) har en absolutværdi, der er konstant på en ret linje parallel med y-aksen, er absolutværdien af bølgefunktionen svarende til en bestemt værdi af L_z konstant langs en cirkel i xy-planen med centrum på z-aksen.

I det følgende skal vi undersøge egenværdiligningen for $\hat{L}_z$,

$$\hat{L}_z|m\rangle = m\hbar|m\rangle, \tag{7.6}$$

hvor vi har indført betegnelsen $m\hbar$ for egenværdierne af $\hat{L}_z$ og tilsvarende mærket tilstandene med m. Da $\hbar$ har samme dimension som impulsmoment, må m være et dimensionsløst tal. Selv om vi har nedskrevet egenværdiligningen (7.6), ved vi endnu ikke, om den har løsninger, og hvilke mulige værdier impulsmomentets komposant kan antage.

Operatoren $\hat{L}_z$ er givet ved (7.3). Det er bekvemt at undersøge egenværdiligningen (7.6) ved at benytte cylinderkoordinater (ρ, ϕ, z), der er forbundet med de cartesiske ved transformationen

$$x = \rho\cos\phi; \quad y = \rho\sin\phi; \quad z = z. \tag{7.7}$$

Impulsmomentets z-komposant svarer ifølge (7.3) til differentialoperatoren

$$\frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}, \tag{7.8}$$

hvor vi har benyttet relationerne (6.37-41).

Vi vil nu løse egenværdiligningen (7.6) ved at gå over til at betragte den tilsvarende ligning for bølgefunktionen $\psi = \psi_m(\phi)$,

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}\psi_m(\phi) = m\psi_m(\phi). \tag{7.9}$$

Bemærk, at bølgefunktionen ψ_m ud over ϕ også afhænger af ρ og z. Denne afhængighed-har imidlertid ingen interesse i denne sammenhæng, da operatoren hørende til z-komposanten af impulsmomentet ifølge (7.8) er proportional med den partielle afledede $\partial/\partial\phi$.

Løsningerne til differentialligningen (7.9) er

$$\psi_m = Ce^{im\phi}, \tag{7.10}$$

hvor C er en konstant (der dog som anført afhænger af ρ og z). Vi vil nu stille som ekstra betingelse, at bølgefunktionen er en entydig funktion af de rumlige variable og dermed periodisk i ϕ,

$$\psi_m(\phi) = \psi_m(\phi + 2\pi). \tag{7.11}$$

En sådan betingelse forekommer naturlig ud fra et klassisk synspunkt, men som vi straks skal se, udelukker den muligheden for at beskrive elektronens spin. Kravet (7.11) om, at bølgefunktionen er periodisk medfører, at

$$m\hbar, \quad \text{hvor} \quad m = 0, \pm1, \pm2, \cdots \tag{7.12}$$

repræsenterer de mulige resultater af en måling af elektronens impulsmoment i magnetfeltets retning. Bemærk, at betingelsen (7.11) har samme form som de periodiske grænsebetingelser (4.50), og resultatet (7.12) modsvarer således kvantiseringsreglen (4.52).

Så længe elektronen kan bevæge sig overalt i rummet, er der ingen øvre grænse for værdierne af m. Som det fremgår af eksempel 6 i forrige kapitel, hører tilstandene

$$|\nu, m, k_z\rangle, \quad \nu = 0,\ k_z = 0, \tag{7.13}$$

til samme energiegenværdi, nemlig $\hbar\omega_c/2$. Udartningsgraden er derfor uendelig, da m kan antage værdierne (7.12). Klassisk set svarer dette til, at elektronens bane i magnetfeltet for en given energi kan have en vilkårlig stor radius. For et endeligt system er udartningsgraden bestemt af arealet vinkelret på magnetfeltets retning, jvf. diskussionen under (6.45).

Ved bevægelse i et centralfelt, der er defineret ved, at den potentielle energi V kun afhænger af længden r af radiusvektor, er også kvadratet på impulsmomentets længde en bevægelseskonstant, svarende til at de tre operatorer $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ er indbyrdes ombyttelige. Til senere brug nedskriver vi udtrykkene for $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ i polære koordinater r, θ, ϕ defineret ved

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \quad y = r\sin\theta\sin\phi, \quad z = r\cos\theta. \tag{7.14}$$

Ved at benytte de omvendte relationer $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ samt $\tan\phi = y/x$ og $\tan\theta = \sqrt{x^2+y^2}/z$ kan vi gå frem i analogi med (6.37-41) og finder derved resultatet for $\hat{L}_z$,

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{7.15}$$

Bemærk, at $\hat{L}_z$ alene afhænger af ϕ, fordi x og y indgår symmetrisk i $\tan\theta$, således at udtrykket for $\hat{L}_z$ bliver det samme i cylinderkoordinater som i sfæriske koordinater.

Kvadratet på impulsmomentet er noget mere omstændeligt at udtrykke i polære koordinater. Ved at benytte relationer svarende til (6.40-41) får man

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]. \tag{7.16}$$

Da såvel $\hat{\vec{L}}^2$ som $\hat{L}_z$ alene afhænger af de variable θ og ϕ, er disse operatorer hver for sig ombyttelige med den potentielle energi V, idet denne kun afhænger af r ifølge vores antagelse. De to operatorer $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ er imidlertid også ombyttelige med den kinetiske emergi. Dette

kan indses ved at udtrykke Laplace-operatoren ∇^2, der er proportional med operatoren for den kinetiske energi, i polære koordinater. Laplace-operatoren ∇^2 er i cartesiske koordinater givet som

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{7.17}$$

Udtrykt i polære koordinater er den

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]. \tag{7.18}$$

Ved sammenligning af (7.18) med (7.16) ses det, at vinkelafhængigheden af operatoren for den kinetiske energi er proportional med kvadratet på impulsmomentet. Dette viser, at operatoren for kinetisk energi er ombyttelig med såvel $\hat{\vec{L}}^2$ som $\hat{L}_z$.

Kommentar. I anvendelserne af kvantemekanikken spiller de såkaldte kuglefunktioner, der er egenfunktioner for $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$, en vigtig rolle. Lad os forsøge på, om vi kan gætte på nogle simple funktioner, der er fælles egenfunktioner for $\hat{L}_z$ og $\hat{\vec{L}}^2$, der er givet i (7.15-16). Enhver funktion, der alene afhænger af r, vil åbenbart være egenfunktion med egenværdi nul. Ligeledes kan vi indse, at det kun er θ- og ϕ-afhængigheden af egenfunktionerne, der har interesse, da r-afhængigheden ikke ændres af operatorerne (7.15-16). Vi har allerede set, at egenfunktionerne til $\hat{L}_z$ er proportionale med $\exp(im\phi)$, hvor m er heltallig. Lad os først antage, at $m = 0$ og gætte på en fælles egenfunktion, der er proportional med z. Begrundelsen for dette gæt er, at det af udtrykkene for $\hat{\vec{L}}$ i cartesiske koordinater følger, at $\hat{L}_x z = (\hbar/i)y$, og $\hat{L}_y z = -(\hbar/i)x$, mens $\hat{L}_z z = 0$. Derved bliver $\hat{L}_x^2 z = \hbar^2 z$ og $\hat{L}_y^2 z = \hbar^2 z$, med resultatet $\hat{\vec{L}}^2 z = 2\hbar^2 z$. Af symmetrigrunde må også x og y være egenfunktioner til $\hat{\vec{L}}^2$ med egenværdi $2\hbar^2$, som vi af hensyn til den videre diskussion skriver som $1(1+1)\hbar^2$. Af (7.3) fremgår, at hverken x eller y er egenfunktion for $\hat{L}_z$. Danner vi imidlertid linearkombinationerne $(x \pm iy)$, ses disse at være egenfunktioner for $\hat{L}_z$ med egenværdier svarende til $m = \pm 1$. Vi har dermed bestemt de første fire af de såkaldte kuglefunktioner $Y_{lm}(\theta,\phi)$ hørende til $(l,m) = (0,0)$ samt $(l,m) = (1,1),(1,0)$ og $(1,-1)$. På nær en normeringskonstant, der sædvanligvis fastlægges ved betingelsen

$$\int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\phi Y^*_{l'm'}(\theta,\phi) Y_{lm}(\theta,\phi) = \delta_{l'l}\delta_{m'm},$$

er disse funktioner givet ved $Y_{00} \propto 1$, $Y_{11} \propto \sin\theta\exp(i\phi)$, $Y_{10} \propto \cos\theta$ og $Y_{1-1} \propto \sin\theta\exp(-i\phi)$. Tilsvarende kan man konstruere de fem kuglefunktioner hørende til $l = 2$ ud fra funktionerne $xy, yz, zx, x^2 - y^2$ og $3z^2 - r^2$ (disse fem funktioner er valgt, så de er ortogonale på Y_{00}). Som det fremgår nedenfor, er egenværdierne for $\hat{\vec{L}}^2$ generelt givet ved $l(l+1)\hbar^2$, hvor l er et helt positivt tal eller nul. I tabel 7.1 har vi anført de normerede kuglefunktioner hørende til $l = 0, 1, 2$ og 3.

Da den potentielle energi V kun afhænger af længden r, er dermed også operatoren for den totale energi, $\hat{H}$, ombyttelig med $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$.

Betragter vi nu en tilstand, der er karakteriseret ved, at kvadratet på impulsmomentet har en bestemt værdi, er det naturligt at vente, at dette medfører eksistensen af en øvre grænse for den numeriske værdi af egenværdierne for $\hat{L}_z$. Ud fra en klassisk betragtning kan størrelsen af en af impulsmomentets komposanter jo ikke overstige impulsmomentets længde. Dette skal vi udnytte i den følgende argumentation, der som udgangspunkt tager ombytningsrelationerne mellem impulsmomentets komposanter.

7.1.1 Egentilstande for $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$

Vi skal nu udelukkende benytte ombytningsrelationerne mellem impulsmomentets tre komposanter til at bestemme egenværdierne for $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$. Ombytningsrelationerne mellem impulsmomentets komposanter udledes ud fra (7.3) og de analoge udtryk for $\hat{L}_x$ og $\hat{L}_y$ ved at anvende (7.4). Det ses, at kommutatoren $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$ er givet ved

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z. \tag{7.19}$$

De øvrige ombytningsrelationer fås ud fra (7.19) ved cyklisk forskydning af indices x, y og z. Ombytningsrelationerne kan skrives på vektorform,

$$\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar \hat{\vec{L}}. \tag{7.20}$$

Ved at benytte (7.20) ser man, at en vilkårlig af impulsmomentets komposanter, f. eks. $\vec{L}_x$ er ombyttelig med kvadratet på det totale impulsmoment, $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x] = 0$. Vi kan skrive de tre ombytningsrelationer for komposanterne som vektorligningen

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{L}}] = 0, \tag{7.21}$$

der indebærer, at det er muligt at bestemme fælles egentilstande for kvadratet på impulsmomentet og en vilkårlig af dets komposanter.

I den følgende diskussion vil vi udnytte, at egenværdierne af kvadratet på impulsmomentet må være større end eller lig med nul. For en vilkårlig tilstand ψ gælder nemlig, at

$$< \hat{\vec{L}}^2 > \geq 0, \tag{7.22}$$

$$Y_{00} = N_{00}, \qquad N_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{10} = N_{10}\cos\theta, \qquad N_{10} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1\pm1} = N_{1\pm1}\sin\theta e^{\pm i\phi}, \qquad N_{1\pm1} = \mp\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\pi}}$$

$$Y_{20} = N_{20}(3\cos^2\theta - 1), \qquad N_{20} = \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{16\pi}}$$

$$Y_{2\pm1} = N_{2\pm1}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}, \qquad N_{2\pm1} = \mp\frac{\sqrt{15}}{\sqrt{8\pi}}$$

$$Y_{2\pm2} = N_{2\pm2}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}, \qquad N_{2\pm2} = \frac{\sqrt{15}}{\sqrt{32\pi}}$$

$$Y_{30} = N_{30}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta), \qquad N_{30} = \frac{\sqrt{7}}{\sqrt{16\pi}}$$

$$Y_{3\pm1} = N_{3\pm1}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)e^{\pm i\phi}, \qquad N_{3\pm1} = \mp\frac{\sqrt{21}}{\sqrt{64\pi}}$$

$$Y_{3\pm2} = N_{3\pm2}\sin^2\theta\cos\theta e^{\pm 2i\phi}, \qquad N_{3\pm2} = \frac{\sqrt{105}}{\sqrt{32\pi}}$$

$$Y_{3\pm3} = N_{3\pm3}\sin^3\theta e^{\pm 3i\phi}, \qquad N_{3\pm3} = \mp\frac{\sqrt{35}}{\sqrt{64\pi}}$$

Tabel 7.1: Egentilstande for $\vec{L}^2$ og L_z.

hvor uligheden følger af, at venstresiden af (7.22) er summen af normkvadraterne på tilstandene $\hat{L}_i\psi$, $i = x, y, z$.

Vi kan derfor skrive egenværdiligningerne for $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ på formen

$$\hat{\vec{L}}^2|\lambda,\mu\rangle = \lambda\hbar^2|\lambda,\mu\rangle \tag{7.23}$$

og

$$\hat{L}_z|\lambda,\mu\rangle = \mu\hbar|\lambda,\mu\rangle. \tag{7.24}$$

hvor λ og μ er reelle tal. Det gælder altså ifølge (7.22), at $\lambda \geq 0$. Da kvadratet på impulsmomentet er summen af de enkelte komposanters kvadrater, må λ og μ tilfredsstille uligheden

$$\lambda \geq \mu^2, \tag{7.25}$$

idet $< \hat{L}_x^2 > + < \hat{L}_y^2 > + < \hat{L}_z^2 > \geq < \hat{L}_z^2 >$.

Til løsning af egenværdiproblemet (7.23-24) er det bekvemt at benytte operatorer svarende til de skabelses- og annihilationsoperatorer, der blev indført i kapitel 2 til bestemmelse af energiegenværdierne for den harmoniske oscillator. I det foreliggende tilfælde definerer vi

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \tag{7.26}$$

og

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y. \tag{7.27}$$

Disse operatorer er ikke hermiteske, idet $\hat{L}_-$ er den hermitesk konjugerede af $\hat{L}_+$. Af ombytningsrelationerne (7.20) følger

$$\hat{L}_z\hat{L}_+ = \hat{L}_+(\hat{L}_z + \hbar) \tag{7.28}$$

og

$$\hat{L}_z\hat{L}_- = \hat{L}_-(\hat{L}_z - \hbar). \tag{7.29}$$

Desuden er det nyttigt at bemærke, at

$$\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z(\hat{L}_z - \hbar) \tag{7.30}$$

og

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z(\hat{L}_z + \hbar). \tag{7.31}$$

Operatorerne $\hat{L}_+$ og $\hat{L}_-$ er altså hverken indbyrdes ombyttelige eller ombyttelige med $\hat{L}_z$. Derimod er de begge ombyttelige med $\hat{\vec{L}}^2$. Heraf følger, at hvis tilstanden

$$|\lambda, \mu\rangle \tag{7.32}$$

er en egentilstand for $\hat{\vec{L}}^2$, er også tilstandene

$$\hat{L}_+|\lambda, \mu\rangle \tag{7.33}$$

og

$$\hat{L}_-|\lambda, \mu\rangle, \tag{7.34}$$

egentilstande for denne operator, med mindre de netop er nulløsningen.

Det følger nu af (7.28), at

$$\hat{L}_z\hat{L}_+|\lambda, \mu\rangle = (\mu + 1)\hbar\hat{L}_+|\lambda, \mu\rangle. \tag{7.35}$$

Ved at gentage dette n gange fås, at

$$\hat{L}_z(\hat{L}_+)^n|\lambda, \mu\rangle = (\mu + n)\hbar(\hat{L}_+)^n|\lambda, \mu\rangle. \tag{7.36}$$

Imidlertid gælder det også, at

$$\hat{\vec{L}}^2(\hat{L}_+)^n|\lambda, \mu\rangle = \lambda\hbar^2(\hat{L}_+)^n|\lambda, \mu\rangle, \tag{7.37}$$

der viser, at brugen af operatorerne (7.26-27) ikke ændrer impulsmomentets længde. Før eller siden vil vi derfor nå en værdi af n, således at $(\mu + n)^2 > \lambda$ i modstrid med (7.25), med mindre rækken bryder af ved en bestemt værdi af n, som vi kalder n_0. Det gælder således, at tilstanden

$$(\hat{L}_+)^{n_0}|\lambda, \mu\rangle \tag{7.38}$$

er forskellig fra nul, mens

$$(\hat{L}_+)^{n_0+1}|\lambda, \mu\rangle \tag{7.39}$$

er lig med nul. Idet $\mu + n_0$ betegnes med l har vi altså

$$\hat{L}_+|\lambda, l\rangle = 0, \quad \hat{L}_z|\lambda, l\rangle = l\hbar|\lambda, l\rangle \tag{7.40}$$

Virker vi nu med operatoren $\hat{L}_-$ på den første af ligningerne i (7.40) fås

$$0 = \hat{L}_-\hat{L}_+|\lambda, l\rangle = (\lambda - l(l+1))\hbar^2|\lambda, l\rangle, \tag{7.41}$$

idet vi har udnyttet (7.31). Da $|\lambda, l\rangle$ er forskellig fra nul, jvf. (7.38), kan man altså slutte, at

$$\lambda - l(l+1) = 0. \tag{7.42}$$

I det følgende mærkes tilstandene $|\lambda, \mu\rangle$ som $|l(l+1), \mu\rangle$ under brug af resultatet (7.42). Alternativt kunne vi have benyttet notationen $|l, \mu\rangle$, da l på entydig måde fastlægger λ via (7.42).

Vi lader nu operatoren $\hat{L}_-$ virke på tilstanden $|l(l+1), l\rangle$. Hvis vi virker tilstrækkelig mange gange med denne, må rækken igen bryde af under hensyn til, at uligheden (7.25) skal være opfyldt. Der findes derfor et helt tal n, således at

$$(\hat{L}_-)^n|l(l+1), l\rangle \tag{7.43}$$

er forskellig fra nul, mens

$$\hat{L}_-(\hat{L}_-)^n|l(l+1), l\rangle = 0. \tag{7.44}$$

Virker vi med operatoren $\hat{L}_+$ på (7.44) og udnytter (7.30), kan vi i analogi med (7.42) slutte, at

$$l(l+1) - (l-n)(l-n-1) = 0, \tag{7.45}$$

eller

$$2l = n, \tag{7.46}$$

idet den negative løsning ($n = -1$) til andengradsligningen (7.45) må forkastes, da n per definition er et helt tal større end eller lig med nul. Da n er et ikke-negativt heltal, følger det af (7.46), at l kun kan antage hel- eller halvtallige værdier. De tilhørende egenværdier for operatorerne $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ er derfor givet ved

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots \tag{7.47}$$

mens m for et givet l antager de $(2l+1)$ forskellige værdier

$$m = l, l-1, l-2, \cdots, -l+1, -l. \tag{7.48}$$

For et rent baneimpulsmoment har vi allerede set, at m og dermed l må være heltallig, men kommutationsrelationerne (7.20), der blev udledt på basis af det klassiske udtryk (7.1) for impulsmomentet, giver åbenbart mulighed for eksistensen af halvtallige værdier af l.

Det følger af (7.43), at

$$\hat{L}_+|\lambda, m\rangle = c|\lambda, m+1\rangle, \tag{7.49}$$

hvor konstanten c kan bestemmes i analogi med (2.108-109) ved at benytte

$$\langle\lambda, m|\hat{L}_-\hat{L}_+|\lambda, m\rangle = c^2 = (\lambda - m(m+1))\hbar^2, \tag{7.50}$$

under brug af (7.31), idet konstanten c er valgt reel. Ved indsættelse af λ fra (7.42) fås da

$$\hat{L}_+|l(l+1), m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\;|l(l+1), m+1\rangle. \tag{7.51}$$

På tilsvarende måde finder man

$$\hat{L}_-|l(l+1), m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\;|l(l+1), m-1\rangle. \tag{7.52}$$

Det bemærkes, at højresiderne af (7.51) og (7.52) er nul, når m er henholdsvis $+l$ og $-l$.

7.2 Spin

Det er en erfaringssag (og som nævnt en konsekvens af Diracs relativistiske elektronteori), at et magnetfelt ikke alene påvirker en elektron via banebevægelsen, som det er udtrykt igennem Hamiltonoperatoren (7.2), men også via det magnetiske moment knyttet til elektronens spin. Vi kan tage hensyn til dette ved til højresiden af (7.2) at addere

$$\hat{H}_s = g_s\frac{e}{2m}B\hat{S}_z, \tag{7.53}$$

hvor $\hat{\vec{S}}$ er operatoren for elektronens spin, mens faktoren g_s som anført i kapitel 1 med meget god tilnærmelse er 2. Egenværdien af $\hat{\vec{S}}^2$ er ifølge den almindelige teori lig med $s(s+1)\hbar^2$, hvor $s = \frac{1}{2}$ for en elektron. Hermed bliver egenværdierne for $\hat{S}_z$ givet ved $\hbar/2$ og $-\hbar/2$. Bidraget fra (7.53) til Hamiltonoperatoren er altså sammenligneligt med det andet led på højre side af (7.2) hidrørende fra elektronens baneimpulsmoment. I atomer giver disse led anledning til den såkaldte Zeeman-effekt.

For i beskrivelsen at tage hensyn til (7.53) kan man indføre egenvektorer af formen (2.79) og (2.80), der henholdsvis svarer til egenværdien $\hbar/2$ og $-\hbar/2$ for operatoren $\hat{S}_z$. I en matrixrepræsentation er denne operator $\hbar\sigma_z/2$, hvor Pauli-matricen σ_z er givet i (2.76). For kortheds skyld betegner man ofte (2.79) med α og (2.80) med β, så egenværdiligningerne for impulsmomentets z-komposant bliver

$$\hat{S}_z\alpha = \frac{\hbar}{2}\alpha \tag{7.54}$$

og

$$\hat{S}_z\beta = -\frac{\hbar}{2}\beta. \tag{7.55}$$

Resultatet af at virke med de to andre komposanter $\hat{S}_x$ og $\hat{S}_y$ kan angives ved at benytte den generelle teori ovenfor og indføre operatorerne

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y; \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y. \tag{7.56}$$

Ifølge (7.51) er

$$\hat{S}_+\alpha = 0, \quad \hat{S}_+\beta = \hbar\alpha, \tag{7.57}$$

mens

$$\hat{S}_-\alpha = \hbar\beta, \quad \hat{S}_-\beta = 0. \tag{7.58}$$

Man kalder α og β for spinfunktioner, idet man i stedet for at benytte deres repræsentation (2.79-80) ved søjlevektorer sammen med (2.76) lige så godt kan tage udgangspunkt i ligningerne (7.54-58) for spinoperatorens komposanter. Det ses endvidere ved at benytte relationen svarende til (7.30) eller (7.31) sammen med (7.54-58), at

$$\hat{\vec{S}}^2\alpha = \frac{3\hbar^2}{4}\alpha \tag{7.59}$$

og

$$\hat{\vec{S}}^2\beta = \frac{3\hbar^2}{4}\beta, \tag{7.60}$$

i overensstemmelse med, at α og β er egentilstande for kvadratet på længden af impulsmomentet, og at egenværdien er $\hbar^2 s(s+1)$, hvor $s = \frac{1}{2}$.

Vi ser endvidere, at komponenterne af elektronens spin kan repræsenteres ved Pauli-matricerne σ_x, σ_y og σ_z, der blev indført i (2.76). Matricerne for $\hat{S}_x$ og $\hat{S}_y$ fås ved henholdsvis

at addere og subtrahere matricerne for $\hat{S_+}$ og $\hat{S_-}$, der kan aflæses af (7.57), med resultatet $\vec{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$. Bemærk ligheden mellem kommutationsrelationerne (2.77) for Pauli-matricerne og de klassiske Poisson-parenteser (2.68) for den todimensionale harmoniske oscillator.

7.3 Addition af impulsmoment

I anvendelserne af kvanteteorien er man ofte ude for at skulle 'addere' eller sammensætte impulsmomenter. En elektron i et atom har ikke blot et impulsmoment hidrørende fra dens spin, men også fra dens banebevægelse (med mindre kvantetallet l, der karakteriserer længden af baneimpulsmomentet netop er nul som for en s-tilstand). Desuden kan det være nødvendigt at sammensætte impulsmomenter for flere forskellige partikler for f. eks. at bestemme et atoms eller en atomkernes totale impulsmoment. Som omtalt i kapitel 1 giver impulsmomenter anledning til magnetiske momenter. De atomare magnetiske momenter kan i mange tilfælde tages som udgangspunkt for beskrivelsen af magnetiske materialers egenskaber. Et antiferromagnetisk materiale som MnF_2 er kendetegnet ved, at magnetiseringen afhænger af temperaturen og bliver nul, når materialet varmes op over en vis kritisk temperatur (der for det pågældende stof er 67K), så længe der ikke er ydre magnetfelter tilstede. Denne opførsel er karakteristisk for et kollektivt fænomen. Magnetismen hidrører fra vekselvirkningen mellem de atomare magnetiske momenter, der er fremkommet ved sammensætning af de magnetiske momenter for atomets bestanddele. Det er normalt kun nødvendigt at tage hensyn til elektronernes bidrag ved denne sammensætning. Kernens bidrag til magnetismen er meget lille, da det gyromagnetiske forhold er langt mindre for protoner og neutroner end for elektroner på grund af forskellen i partiklernes masse, jvf. (1.41).

Den almindelige teori for sammensætning af impulsmomenter vil ikke blive gennemgået her, hvor vi nøjes med at se på det simplest mulige eksempel, sammensætningen af to elektroners spin. Det almindelige resultat for sammensætning af to vilkårlige impulsmomenter er anført nedenfor i (7.72). Matematisk set består addition af impulsmomenter i at finde fælles egentilstande for kvadratet på systemets totale impulsmomentoperator og for dennes komposant langs en bestemt akse. Relevansen af de fremkomne tilstande for beskrivelsen af et fysisk system afhænger af partiklernes indbyrdes vekselvirkning og deres påvirkning af ydre

felter.

For et system bestående af to elektroner er operatoren $\hat{\vec{S}}$ for det totale spin givet ved

$$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2, \tag{7.61}$$

hvor de to spinoperatorer for hver elektron er defineret ved relationer som (7.54-58). For at lette notationen skriver vi spinfunktioner for totalsystemet som

$$\alpha\alpha, \alpha\beta, \beta\alpha, \beta\beta, \tag{7.62}$$

idet den første funktion refererer til elektron 1 og den anden til elektron 2 (vi kunne i stedet have benyttet betegnelserne $\alpha_1\alpha_2, \alpha_1\beta_2, \beta_1\alpha_2, \beta_1\beta_2$). Funktionen $\beta\alpha$ repræsenterer altså en egentilstand for $\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}$ med egenværdi $(-\hbar/2)(\hbar/2) = -\hbar^2/4$. Da komposanterne af spinoperatoren $\hat{\vec{S}}_1$ er ombyttelige med komposanterne af spinoperatoren $\hat{\vec{S}}_2$, kan kvadratet på det totale impulsmoment skrives som

$$\hat{\vec{S}}^2 = \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + 2\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2, \tag{7.63}$$

der kan omformes til

$$\hat{\vec{S}}^2 = \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}. \tag{7.64}$$

Vi vil benytte (7.64) til at bestemme egenværdierne og de tilhørende egentilstande for kvadratet på det totale impulsmoment og dets z-komposant givet ved

$$\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}. \tag{7.65}$$

Ved at virke med operatorerne (7.64) og (7.65) på hver af spinfunktionerne (7.62) ser vi, at disse er egentilstande for $\hat{S}_z$, men ikke for $\hat{\vec{S}}^2$ på grund af (7.57-58). Resultatet angives bekvemt på matrixform, idet $|i\rangle$ for $i = 1, 2, 3, 4$ angiver de fire tilstande i (7.62) i den anførte orden. Under udnyttelse af ortogonaliteten

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \tag{7.66}$$

der kan verificeres ved at benytte repræsentationen (2.79-80), finder man

$$\hat{S}_z/\hbar : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.67}$$

og

$$\hat{\vec{S}}^2/\hbar^2 : \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{7.68}$$

Kommentar. Lad os eftervise (7.67-68) og nøjes med at udregne de to første søjler i hver af de to matricer. Resultatet af at virke med $\hat{S}_z/\hbar$ på $\alpha\alpha$ er $(1/2+1/2)\alpha\alpha = \alpha\alpha$, mens resultatet af at virke med $\hat{S}_z/\hbar$ på $\alpha\beta$ er $(1/2-1/2)\alpha\beta = 0$. Matricen for $\hat{S}_z$ er tydeligvis diagonal i den basis, der udgøres af tilstandene (7.62). Resultatet af at virke med impulsmomentkvadratet (7.64) på $\alpha\alpha$ er $(3/4+3/4+2/4)\hbar^2\alpha\alpha$, idet det tredje og fjerde led i summen (7.64) begge giver nul på grund af (7.57-58). Dette viser, at matricens første søjle bliver givet ved talsættet (2,0,0,0), idet tilstandene (7.62) er ortonormale. Den anden søjle fås ved at lade (7.64) virke på $\alpha\beta$ med resultatet $(3/4+3/4-2/4)\hbar^2\alpha\beta + \hbar^2\beta\alpha$ ved brug af (7.57-58). Heraf ses, at den anden søjle er givet ved talsættet $(0,1,1,0)$. Søjle tre og fire i de to matricer kan udregnes på ganske tilsvarende vis, men kan også fås umiddelbart ved brug af et symmetriargument.

Som det fremgår, er matricen (7.68) ikke diagonal, men det er en enkelt sag at finde dens egenværdier, der er 2 og 0. De tilhørende egentilstande er

$$\alpha\alpha, \beta\beta, \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta + \beta\alpha), \tag{7.69}$$

svarende til egenværdien $2 = 1(1+1)$, der viser, at kvantetallet for det totale spin er $1(=\frac{1}{2}+\frac{1}{2})$, mens de tilhørende egenværdier af z-komposanten er henholdsvis $1, -1, 0$ i enheder af $\hbar$ for de tre tilstande i (7.69). Man siger, at tilstandene (7.69) udgør en triplet, da den pågældende egenværdi for længdekvadratet af det totale spin er tre gange udartet. Til egenværdien 0 svarer en singlet, nemlig tilstanden

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta - \beta\alpha), \tag{7.70}$$

der tillige er egentilstand for $\hat{S}_z$ med egenværdien 0.

Det bemærkes, at diagonaliseringen af matricerne (7.67-68) har resulteret i linearkombinationer (7.69-70) af de oprindelige tilstande (7.62) med bestemt symmetri over for ombytning af de to elektroner. Tilstandene (7.69) ses at være symmetriske, mens (7.70) er antisymmetrisk. Betydningen af dette vil blive uddybet i det følgende kapitel, idet identiske spin-1/2

partikler som elektroner skal beskrives ved tilstande, der er antisymmetriske ved ombytning af to vilkårlige partikler. Dette indebærer ikke, at tilstandene (7.69) er ufysiske, men blot at den rumlige del af bølgefunktionen for de to elektroner i så fald må være antisymmetrisk, mens den i tilfældet (7.70) er symmetrisk. Hermed har vi fået grundlag for at forstå, at energierne hørende til de to sæt af tilstande (7.69) og (7.70) kan være forskellige, idet en antisymmetrisk rumlig bølgefunktion er nul, når de to elektroners rumlige koordinater er sammenfaldende, mens dette ikke er tilfældet for en symmetrisk. Bidraget til heliumatomets energi fra frastødningen mellem dets to elektroner må derfor være forskelligt, alt efter som elektronernes rumlige bølgefunktion er symmetrisk eller antisymmetrisk. Man kan udtrykke dette ved en effektiv Hamiltonoperator, der er

$$\hat{H}_{\text{eff}} = A\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2. \tag{7.71}$$

Ifølge (7.63) er egenværdierne af $2\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2$ lig med egenværdierne af $(\hat{\vec{S}}^2 - 3\hbar^2/2)$. Derved bliver egenværdierne af (7.71) $A\hbar^2/4$ og $-3A\hbar^2/4$ svarende til (7.69) og (7.70), respektive. Man benytter ofte en sum af led af formen (7.71) som Hamiltonoperator for magnetiske materialer.

Den generelle metode til addition af impulsmomenter svarer nøje til ovenstående. Man kalder udviklingskoefficienterne i (7.69-70), der er sandsynlighedsamplituder (jvf. kapitel 3), for *Clebsch-Gordan koefficienter*. I det foreliggende eksempel er de 1 og $\pm 1/\sqrt{2}$. Ved addition af to impulsmomenter $\hat{\vec{J}}_1$ og $\hat{\vec{J}}_2$ bliver egenværdierne for kvadratet på det totale impulsmoment givet ved $j(j+1)\hbar^2$, hvor j kan antage værdierne

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \cdots, |j_1 - j_2|, \tag{7.72}$$

idet $j_1(j_1+1)\hbar^2$ og $j_2(j_2+1)\hbar^2$ er egenværdierne for hvert af de to længdekvadrater. Clebsch-Gordan koefficienterne findes ved diagonalisering af en matrix med $(2j_1+1)(2j_2+1)$ rækker og $(2j_1+1)(2j_2+1)$ søjler svarende til (7.68). Bemærk, at de to impulsmomenter kan være et bane- og et spinimpulsmoment (i så fald bruger man sædvanligvis betegnelserne $\hat{\vec{L}}$ og $\hat{\vec{S}}$), men de kunne også være impulsmomenter, der hver for sig er fremkommet ved addition af spin- og baneimpulsmoment. I opgave 7.1 undersøger vi sammensætningen af et baneimpulsmoment karakteriseret ved kvantetallet $l = 1$ med et spinimpulsmoment, for hvilket $s = 1/2$.

Ved sammensætning af tre spin-1/2 partiklers impulsmoment (opg. 7.5) finder man følgende fire tilstande hørende til $j = 3/2$,

$$\alpha\alpha\alpha,\ \frac{1}{\sqrt{3}}(\beta\alpha\alpha + \alpha\beta\alpha + \alpha\alpha\beta),\ \frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha\beta\beta + \beta\alpha\beta + \beta\beta\alpha),\ \beta\beta\beta. \tag{7.73}$$

Addition af impulsmomenter optræder i mange forskellige sammenhænge i kvanteteorien. Tilstande af formen (7.73) indgår f. eks. i beskrivelsen af baryonernes kvarkstruktur.

7.4 Bevægelse i et centralfelt

Som omtalt i indledningen til dette kapitel er det ved bevægelse i et centralfelt muligt at finde fælles egenfunktioner for Hamiltonoperatoren $\hat{H}$, kvadratet $\hat{\vec{L}}^2$ på baneimpulsmomentet og dets komposant $\hat{L}_z$ med hensyn til en given akse. De fælles egenfunktioner til $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ kaldes kuglefunktioner og betegnes med $Y_{lm}(\theta, \phi)$. Vi har altså

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{7.74}$$

og

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi). \tag{7.75}$$

Energioperatoren er ifølge (7.18) og (7.16) givet ved

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\vec{L}}^2\right) + V(r). \tag{7.76}$$

Løsningen ψ til den tidsuafhængige Schrödingerligning $H\psi = E\psi$ kan derfor separeres ifølge

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi), \tag{7.77}$$

hvor radialfunktionen R afhænger af kvantetallet l såvel som energiegenværdien E. Egenværdiligningen for energien bliver herefter

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{1}{r^2}l(l+1)\right]R(r) + V(r)R(r) = ER(r). \tag{7.78}$$

Vi kan nu gå frem ganske som i eksempel 6, hvor vi reducerede Schrödingerligningen til en éndimensional ligning i cylinderkoordinaten ρ. I det foreliggende tilfælde indfører vi

funktionen $\chi(r) = rR(r)$, der skal tilfredsstille grænsebetingelsen[1] $\chi \to 0$ for $r \to 0$. Analogt med (6.45) får vi af (7.78), at funktionen χ er løsning til ligningen

$$\chi'' + \frac{2m_e}{\hbar^2}[E - V_{\text{eff}}(r)]\chi = 0, \tag{7.79}$$

hvor V_{eff} betegner det effektive potential givet ved

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2}. \tag{7.80}$$

7.4.1 Brintatomet

Løsningerne til (7.79) afhænger af potentialets form. I det følgende skal vi diskutere brintlignende systemer, for hvilke $V(r) = -Ze_0^2/r$. Her er Z kerneladningen, der er 1 for et brintatom, mens den er 2 for He^+-ionen og 3 for Li^{++}-ionen. Hvis vi vil tage hensyn til kernens medbevægelse, skal vi som i den klassiske behandling af tolegemeproblemet erstatte m_e med den reducerede masse $\mu = m_e M/(m_e + M)$, hvor M er protonmassen. Rigtigheden af dette kan indses ved at udtrykke operatoren for den totale kinetiske energi i relative koordinater og tyngdepunktskoordinater, jvf. opgave 7.11.

I stedet for at gennemgå den eksakte løsning til egenværdiproblemet (7.79)[2] vil vi først vise, hvorledes en tilnærmet metode gyldig for store kvantetal fører til en simpel bestemmelse af energierne af de bundne tilstande. En tilsvarende metode kan benyttes på andre effektive potentialer, f. eks. til beregning af vibrationsenergierne i diatomige molekyler. Derefter vil vi bestemme nogle simple løsninger til egenværdiproblemet af interesse for det følgende kapitel.

I tilfældet $V(r) = -Ze_0^2/r$ har det effektive radiale potential formen

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{A}{r} + \frac{B}{2r^2}, \tag{7.81}$$

hvor A og B er positive konstanter. Åbenbart har V_{eff} minimum for $r = r_{\min} = B/A$. Ved at

[1] Den anførte grænsebetingelse er opfyldt, hvis R er endelig i $r = 0$. Det er imidlertid ikke for alle potentialer nødvendigt at forlange, at R er endelig i $r = 0$ (et eksempel er potentialet $V(r) = -C/r^2$, hvor C er en positiv konstant), men divergensen i R for $r \to 0$ skal under alle omstændigheder være så svag, at $\chi = rR \to 0$ for $r \to 0$.

[2] Den eksakte bestemmelse af de bundne tilstande, der er løsning til (7.79) involverer Laguerre-polynomier. Løsningerne kan bestemmes ved potensrækkemetoden (jvf. opgave 3.1).

rækkeudvikle V_{eff} til anden orden i $(r - r_{\min})$ fås

$$V_{\text{eff}} \simeq -\frac{A^2}{2B} + \frac{1}{2}K(r - \frac{B}{A})^2, \tag{7.82}$$

hvor $K = A^4/B^3$. At kraftkonstanten K har denne værdi, kan eftervises ved at differentiere F to gange med hensyn til r og indsætte $r = r_{\min}$, altså $K = -2A/r_{\min}^3 + 3B/r_{\min}^4 = A^4/B^3$. Energiegenværdierne er da givet ved det sædvanlige resultat for en harmonisk oscillator

$$E = -\frac{A^2}{2B} + (p + \frac{1}{2})\hbar\sqrt{\frac{A^4}{B^3 m_e}}. \tag{7.83}$$

Vi indsætter nu $A = Ze_0^2$ og $B = \hbar^2 l(l+1)/m_e$ og benytter antagelsen $l \gg 1$. Hermed bliver energiegenværdierne givet ved

$$E = -\frac{m_e Z^2 e_0^4}{2\hbar^2}[\frac{1}{l^2} - \frac{1}{l^3} - 2(p + \frac{1}{2})\frac{1}{l^3}] \simeq -\frac{m_e Z^2 e_0^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(l+p+1)^2}, \tag{7.84}$$

forudsat at $p \ll l$ (vi har udnyttet, at $(1-\epsilon) \simeq (1+\epsilon)^{-1}$, hvis $\epsilon \ll 1$). Med identifikationen $n = l + p + 1$ er (7.84) åbenbart

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e_0^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \tag{7.85}$$

hvor kvantetallet n er et helt positivt tal. Energispektret (7.85) blev udledt af Bohr i 1913 (se opgave 7.10). Ifølge Bohrs model kan n antage værdierne

$$n = 1, 2, 3 \cdots, \tag{7.86}$$

der også er resultatet af den eksakte løsning til (7.79). Ud over de diskrete egenværdier (7.85) er der et kontinuert spektrum af positive energier, der svarer til, at elektronen ikke er bundet af brintkernen. Bemærk, at p i den foretagne approksimation er identisk med kvantetallet n_r. Antallet af nulpunkter i radialfunktionen R_{nl} ses at være givet ved p i overensstemmelse med den almindelige løsning, der udtrykkes ved Laguerre-polynomier.

Vi vender os nu mod bestemmelsen af nogle simple, eksakte løsninger til differentialligningen (7.79) med den potentielle energi $V(r) = -Ze_0^2/r$. Differentialligningen (7.79) bliver da

$$\chi'' + \frac{2m_e}{\hbar^2}E\chi + \frac{2m_e Ze_0^2}{\hbar^2 r}\chi - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi = 0. \tag{7.87}$$

Så længe vi kun interesserer os for de bundne tilstande, med energi $E < 0$, vil løsningen for $r \to \infty$ gå eksponentielt mod nul, svarende til at det tredje og sidste led på venstre side af

(7.87) er forsvindende sammenlignet med det andet. For små r dominerer derimod det sidste led i forhold til det andet og tredje, og ligningen ses i denne grænse at være tilfredsstillet af funktioner af typen $\chi \propto r^{l+1}$ og $\chi \propto r^{-l}$, der begge opfylder $r^2\chi'' = l(l+1)\chi$. Da vi som grænsebetingelse på χ i $r = 0$ forlanger, at $\chi(0) = 0$, kan vi kun benytte de løsninger, der nær $r = 0$ er givet ved $\chi \propto r^{l+1}$.

Med udgangspunkt i denne diskussion af løsningernes asymptotiske forhold vil vi nu undersøge, om funktioner af formen

$$\chi \propto r^{l+1}e^{-r/a} \tag{7.88}$$

kan tilfredsstille (7.87) overalt. Ved at indsætte (7.88) i (7.87) fås

$$\begin{aligned}(l(l+1) - \frac{2(l+1)r}{a} + \frac{r^2}{a^2})r^{l-1}e^{-r/a} + \frac{2m_e}{\hbar^2}Er^{l+1}e^{-r/a} \\ + \frac{2m_eZe_0^2}{\hbar^2 r}r^{l+1}e^{-r/a} - \frac{l(l+1)}{r^2}r^{l+1}e^{-r/a} = 0\end{aligned} \tag{7.89}$$

Det ses, at ligningen er opfyldt, hvis

$$a = \frac{(l+1)a_0}{Z}, \tag{7.90}$$

hvor a_0 er Bohr-radius givet ved

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me_0^2}, \tag{7.91}$$

mens

$$E = -\frac{e_0^2}{2a^2} = -\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2(l+1)^2} \tag{7.92}$$

er den tilhørende energi. Den laveste energi fremkommer for $l = 0$, der bestemmer systemets grundtilstandsenergi

$$E = -\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2}. \tag{7.93}$$

Vi har ikke bevist, at (7.93) er den lavest mulige egenværdi for Hamiltonoperatoren, men det er plausibelt i betragtning af, at den radiale funktion ikke har nulpunkter, mens den tilhørende kuglefunktion Y_{00} er en konstant.

Selvom resultatet (7.92) er identisk med Bohr-formlen (7.85), er det vigtigt at bemærke, at vi ikke dermed har fundet samtlige løsninger. Dette fremgår af, at (7.87) med $l = 0$ har andre løsninger end funktionen $r\exp(-r/a)$, der er af typen (7.88). Vi kan f. eks. indsætte

$$R_{10} = N_{10}e^{-\rho}, \qquad N_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}}$$

$$R_{20} = N_{20}(1 - \frac{\rho}{2})e^{-\rho/2}, \qquad N_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}(a_0)^{3/2}}$$

$$R_{21} = N_{21}\rho e^{-\rho/2}, \qquad N_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}(a_0)^{3/2}}$$

$$R_{30} = N_{30}(1 - \frac{2\rho}{3} + \frac{2\rho^2}{27})e^{-\rho/3}, \qquad N_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3}(a_0)^{3/2}}$$

$$R_{31} = N_{31}\rho(1 - \frac{\rho}{6})e^{-\rho/3}, \qquad N_{31} = \frac{4\sqrt{2}}{27\sqrt{3}(a_0)^{3/2}}$$

$$R_{32} = N_{32}\rho^2 e^{-\rho/3}, \qquad N_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}(a_0)^{3/2}}$$

$$R_{40} = N_{40}(1 - \frac{3\rho}{4} + \frac{\rho^2}{8} - \frac{\rho^3}{192})e^{-\rho/4}, \qquad N_{40} = \frac{1}{4(a_0)^{3/2}}$$

$$R_{41} = N_{41}\rho(1 - \frac{\rho}{4} + \frac{\rho^2}{80})e^{-\rho/4}, \qquad N_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}(a_0)^{3/2}}$$

$$R_{42} = N_{42}\rho^2(1 - \frac{\rho}{12})e^{-\rho/4}, \qquad N_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}(a_0)^{3/2}}$$

$$R_{43} = N_{43}\rho^3 e^{-\rho/4}, \qquad N_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}$$

Tabel 7.2: Normerede radialbølgefunktioner for brintatomet med $\rho = r/a_0$, $a_0 = \hbar^2/me_0^2$. Bølgefunktioner for brintlignende systemer fås ved substitutionen $e_0^2 \to Ze_0^2$.

funktionen

$$\chi = (r + br^2)e^{-r/a} \tag{7.94}$$

og forsøge at bestemme a, b og c, så (7.87) med $l = 0$ er opfyldt. Resultatet er, at $b = -1/a$ og $a = 2Z/a_0$, mens $E = -Ze_0^2/8a_0$. Energien er altså givet ved, at kvantetallet n i Bohr-formlen (7.85) er lig med 2. Den normerede bølgefunktion ψ_{200} svarende til denne energi er en egenfunktion for $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ med egenværdier nul, da bølgefunktionen kun afhænger af r,

$$\psi_{200} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} (1 - \frac{rZ}{2a_0}) e^{-r/2a_0}. \tag{7.95}$$

Kvantetallene n, l og m er altså henholdsvis 2, 0 og 0. Bemærk, at det såkaldte hovedkvantetal n er lig med $l+1$ for tilstande af typen (7.88). Til en given værdi af l hører der $2l+1$ forskellige værdier af m, jvf. (7.48). For $n = 2$ er der dermed fire tilstande, der har samme energi, nemlig $\psi_{200}, \psi_{210}, \psi_{211}$ og ψ_{21-1}. Udartningsgraden er altså 4 eller $n^2 = 4$. I tabel 7.2 har vi angivet samtlige radialfunktioner hørende til kvantetallene $n = 1, 2, 3$ og 4. Det ses af tabellen, at der til en given energiværdi (et givet n) hører l-værdierne $0, 1, 2, \cdots, n-1$. Dette kan vises at gælde for et vilkårligt n. I almindelighed bliver udartningsgraden derfor givet ved

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \tag{7.96}$$

Udartningsgraden (7.96) skal multipliceres med 2, hvis elektronens spin tages i betragtning.

EKSEMPEL 7. ZEEMAN-EFFEKT OG SPIN-BANE KOBLING.

Spin-bane koblingen giver anledning til finstruktur, der har sin oprindelse i relativistiske effekter. Den beskrives ved til den ikke-relativistiske Hamiltonoperator at føje leddet

$$H_1 = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}, \tag{7.97}$$

hvor vi for nemheds skyld har bragt impulsmomentoperatorerne på dimensionsløs form, således at $\hbar\vec{L}$ er operatoren hørende til elektronens baneimpulsmoment, mens $\hbar\vec{S}$ er operatoren hørende til spinimpulsmomentet. For brintatomet, som vi skal diskutere i dette eksempel, er den potentielle energi givet ved $V(r) = -e_0^2/r$, hvor $e_0^2 = e^2/4\pi\epsilon_0$.

Magnetfeltet påvirker såvel elektronens baneimpulsmoment som dens spinimpulsmoment svarende til leddet

$$H_2 = \mu_B B(L_z + 2S_z), \tag{7.98}$$

hvor μ_B er Bohr-magnetonen, defineret ved $\mu_B = e\hbar/2m$.

I det følgende skal vi beregne indflydelsen af H_1 og H_2 på 2p-niveauets energi, d. v. s. energien af de tilstande, der karakteriseres ved kvantetallene $n = 2$ og $l = 1$ (i den almindeligt benyttede spektroskopiske notation refererer s-tilstande til $l = 0$, p-tilstande til $l = 1$, d-tilstande til $l = 2$, og så videre). Vi opfatter H_1 og H_2 som perturbationer set i forhold til den potentielle energi $-e_0^2/r$, der indgår i den uperturberede Hamiltonoperator H_0. Derimod antager vi ikke noget om den relative betydning af de to perturbationer. Dette indebærer, at vi inden for det underrum, der udgøres af egenfunktionerne $|m_l m_s\rangle$ i tilfældet $l = 1, s = 1/2$ skal bringe Hamiltonoperatoren $H = H_0 + H_1 + H_2$ på diagonalform, svarende til at benytte første ordens perturbationsteori (se formel (8.17) i det følgende kapitel) på det seks ($= 3 \cdot 2$) gange udartede 2p-niveau, hvis uperturberede energi er $E = -e_0^2/8a_0$.

Elektronen i brintatomet bevæger sig i et centralfelt, idet den potentielle energi $V(r) = -e_0^2/r$ kun afhænger af længden af stedvektoren $\vec{r}$. Løsningen til Schrödingerligningen for bevægelsen i centralfeltet kan skrives på formen $R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)$, hvor Y_{lm_l} er en fælles egenfunktion for $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ med egenværdi henholdsvis $\hbar^2 l(l+1)$ og $m_l\hbar$.

Radialfunktionen hørende til 2p-tilstanden er R_{21}, der er proportional med $r\exp(-r/2a_0)$. Da denne radialfunktion er fælles for de seks lineært uafhængige basistilstande $|m_l m_s\rangle$ (vi undlader for nemheds skyld at mærke tilstandene med kvantetallene n og l), vil matricen for operatoren H_1 være proportional med integralet

$$\int_0^\infty drre^{-r/a_0} \tag{7.99}$$

der åbenbart er proportionalt med a_0^2. Af dette ser vi nu, at det er tilstrækkeligt at diagonalisere summen af operatorerne

$$H_a = a\vec{L} \cdot \vec{S} \tag{7.100}$$

og

$$H_b = b(L_z + 2S_z). \tag{7.101}$$

Her er konstanten a af størrelsesordenen $\alpha^4 mc^2$, hvor α er finstrukturkonstanten (1.35), mens b er lig med $\mu_B B$.

Vi nu kommet frem til sagens kerne: hvorledes bringes $H_a + H_b$ på diagonalform inden for det betragtede underrum? Operatoren H_b volder ingen vanskeligheder, da den er 'født' diagonal med den valgte basis. Egenværdierne ses at være $2b, b, 0, -b, -2b$, hvor egenværdien 0 åbenbart hører til såvel $|1\ -1/2\rangle$ som $|-1\ +\ 1/2\rangle$. Ser vi helt bort fra spin-bane koblingen, spalter 2p-niveauet altså op i fem niveauer. Afstanden mellem niveauerne er den samme og ses at være proportional med magnetfeltets størrelse. Ét af disse fem niveauer, nemlig det, der hører til egenværdien 0, er dobbelt udartet.

Operatoren H_a er derimod ikke diagonal. For at bestemme dens matrixelementer anvender vi omskrivningen

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = L_z S_z + \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+) \tag{7.102}$$

og benytter, at $L_-S_+|0\ -1/2\rangle = \sqrt{2}|-1\ +1/2\rangle$, samt $L_-S_+|1\ -1/2\rangle = \sqrt{2}|0\ +1/2\rangle$ (foruden de tilsvarende relationer for den hermitesk konjugerede L_+S_-).

Matricen for $H_a + H_b$ er en 6 × 6-matrix, men den kan åbenbart skrives ned som to 1 × 1-matricer og to 2 × 2-matricer (begrund dette i detaljer!). Egenværdierne λ er givet ved

$$\lambda = \pm 2b + \frac{a}{2} \tag{7.103}$$

svarende til tilstandene $|1\ 1/2\rangle$ og $|-1\ -1/2\rangle$, samt

$$\lambda = \frac{1}{2}(\pm b - \frac{a}{2} + \sqrt{b^2 + (3a/2)^2 \pm ab}) \tag{7.104}$$

og

$$\lambda = \frac{1}{2}(\pm b - \frac{a}{2} - \sqrt{b^2 + (3a/2)^2 \pm ab}). \tag{7.105}$$

Øvelse. Eftervis (7.104-105) og tegn de seks energier (udtrykt som det dimensionsløse forhold λ/a) som funktioner af parameteren b/a. Foretag en rækkeudvikling af λ/a for små værdier af b/a, og benyt denne til at vise, at Zeeman-effekten for svage magnetfelter ($b \ll a$) kan beskrives ved at knytte forskellige g-faktorer til de to finstrukturniveauer hørende til $j = 3/2$ og $j = 1/2$. Bestem g-faktorerne ud fra ovenstående resultat.

7.5 Elektronens spin

Vi har set i kapitel 1, at Dirac-ligningen for en fri partikel er

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{7.106}$$

hvor H er givet ved

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2. \tag{7.107}$$

Når α og β vælges som 4 × 4 matricer i overensstemmelse med (1.140-144), skal ψ opfattes som en søjlevektor med fire komponenter, jvf. (1.145).

I dette afsnit skal vi først se, at det klassiske baneimpulsmoment $\vec{L}$ ikke i sig selv er en bevægelseskonstant i et centralfelt og derved give en fysisk fortolkning til størrelsen $\hbar\sigma_i/2$ som elektronens 'indre' impulsmoment eller spin. Derefter undersøger vi bevægelsen i et konstant magnetfelt.

Ved bevægelse i et centralfelt beskrevet ved den potentielle energi $V(r)$ er den relativistiske Hamiltonoperator, der indgår i (7.106), givet ved

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2 + V(r). \tag{7.108}$$

På basis af den klassiske fysik kunne man vente, at operatoren for baneimpulsmomentet $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ er ombyttelig med H. Dette er imidlertid ikke tilfældet, idet f. eks.

$$[L_z, H] = i\hbar c(\alpha_x p_y - \alpha_y p_x). \tag{7.109}$$

Operatoren L_z er her $(xp_y - yp_x)$ gange en 4×4 enhedsmatrix. Lad os forsøge, om vi kan finde en operator, der **er** ombyttelig med H ved at bestemme kommutatoren mellem H og de tre 4×4 matricer

$$\sigma_i' = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \tag{7.110}$$

Vi finder således under brug af $[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$ og $[\sigma_z, \sigma_y] = -2i\sigma_x$, at

$$[\sigma_z', H] = -2ic(\alpha_x p_y - \alpha_y p_x), \tag{7.111}$$

der sammenholdt med (7.109) viser, at $L_z + \hbar\sigma_z'/2$ er ombyttelig med Hamiltonoperatoren. Da z-retningen ikke udmærker sig i forhold til x- eller y-retningen, er alle tre komponenter $L_i + \hbar\sigma_i'/2$ ombyttelige med Hamiltonoperatoren og dermed bevægelseskonstanter. Vi fortolker derfor størrelsen $L_i + \hbar\sigma_i'/2$ som partiklens totale impulsmoment.

Når de relativistiske effekter behandles som en korrektion, er det kun nødvendigt at tage hensyn til de to første komponenter af søjlevektoren ψ, idet de to sidste er små (for en fri partikel med $E \simeq mc^2$ er de af størrelsesordenen p/mc i forhold til de første to, jvf. (1.145)). Herved kan det totale impulsmoment $\vec{J}$ repræsenteres ved 2×2-matricer, $\vec{J} = \vec{L} + \hbar\vec{\sigma}/2$, mens bølgefunktionen repræsenteres ved en søjlevektor (ψ_1, ψ_2).

7.5.1 Elektronens magnetiske moment

Når en elektron bevæger sig i et magnetfelt beskrevet ved vektorpotentialet $\vec{A}$ skal Hamiltonoperatoren i (7.108) modificeres på sædvanlig måde (jvf. kapitel 6)

$$H = c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}) + \beta mc^2, \tag{7.112}$$

idet elektronens ladning er $-e$. I et konstant magnetfelt $(0, 0, B)$ kan vektorpotentialet vælges til at være

$$A_x = 0, \quad A_y = Bx, \quad A_z = 0, \quad , \tag{7.113}$$

der er den såkaldte Landau-gauge (kap. 6). Vi kan nu nedskrive bølgeligningen svarende til (7.108)

$$(E - cp_x\alpha_x - c\alpha_y(p_y + eBx) - cp_z\alpha_z - \beta mc^2)\psi = 0 \tag{7.114}$$

Vi multiplicerer denne ligning med $(E + cp_x\alpha_x + c\alpha_y(p_y + eBx) + cp_z\alpha_z + \beta mc^2)$,

$$\begin{aligned}(E + cp_x\alpha_x + c\alpha_y(p_y + eBx) + cp_z\alpha_z + \beta mc^2)(E - cp_x\alpha_x - c\alpha_y(p_y + eBx) \\ -cp_z\alpha_z - \beta mc^2)\psi = 0\end{aligned} \tag{7.115}$$

med resultatet

$$(E^2 - c^2(p_x^2 + p_z^2) - c^2(p_y + eBx)^2 - \sigma_z' e\hbar c^2 B - (mc^2)^2)\psi = 0 \tag{7.116}$$

idet

$$(p_x\alpha_x + c\alpha_y eBx)(-p_x\alpha_x - c\alpha_y eBx) = -p_x^2 - c^2e^2B^2x^2 - c\hbar\sigma_z' eB. \tag{7.117}$$

Vi har her benyttet, at $\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$ og $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$ samt ombytningsrelationen $[p_x, x] = -i\hbar$. I den ikke-relativistiske grænse er Hamiltonoperatoren derfor

$$\begin{aligned}H &= \sqrt{(mc^2)^2 + c^2(p_x^2 + (p_y + eBx)^2 + p_z^2) + c^2\sigma_z eB} \\ &\simeq mc^2 + \frac{1}{2m}(p_x^2 + (p_y + eBx)^2 + p_z^2) + \frac{\hbar}{2m}\sigma_z eB,\end{aligned} \tag{7.118}$$

idet hvileenergien mc^2 i denne grænse er meget større end energien hidrørende fra elektronens bevægelse i magnetfeltet. Sammenligner vi dette udtryk med (7.2), ser vi, at elektronens spin s_i givet ved $s_i = \hbar\sigma_i/2$ svarer til et magnetisk moment $g_s(-e/2m)s_i$, hvor $g_s = 2$ er den i (7.53) indførte g-faktor.

I kvanteelektrodynamikken kvantiserer man ikke blot elektronens bevægelse, men også det elektromagnetiske felt. Som resultat af dette finder man, at elektronens g-faktor skal korrigeres i forhold til $g_s = 2$. Til første orden i finstrukturkonstanten $\alpha = e_0^2/\hbar c$ bliver g_s givet ved

$$g_s = 2(1 + \frac{\alpha}{2\pi}). \tag{7.119}$$

Det er muligt at måle elektronens g-faktor meget nøjagtigt. Man finder således

$$g_s = 2 \cdot 1,001\,159\,652\,19. \tag{7.120}$$

Forskellen mellem (7.119) og (7.120) skyldes processer af højere orden i α. Tager man i kvanteelektrodynamikken hensyn til disse ved beregningen af g_s, fås perfekt overensstemmelse med (7.120).

7.6 Opgaver

OPGAVE 7.1

a) Betragt mængden af operatorer

$$\hat{\vec{L}},\ \hat{\vec{S}},\ \hat{\vec{J}},\ \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}},\ \hat{\vec{L}}^2,\ \hat{\vec{S}}^2,\ \hat{\vec{J}}^2,$$

hvor $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$. Hver enkelt komposant af $\hat{\vec{L}}$ er per definition ombyttelig med hver enkelt komposant af $\hat{\vec{S}}$, altså $[L_i, S_j] = 0$. Vis at mængden af operatorer

$$\hat{L}_z,\ \hat{S}_z,\ \hat{\vec{L}}^2,\ \hat{\vec{S}}^2$$

er indbyrdes ombyttelige. Vis tilsvarende, at mængden af operatorer

$$\hat{\vec{J}}^2,\ \hat{J}_z,\ \hat{\vec{L}}^2,\ \hat{\vec{S}}^2$$

er indbyrdes ombyttelige. Vis endelig, at der i operatormængden

$$\hat{J}_z,\ \hat{L}_z,\ \hat{S}_z,\ \hat{\vec{J}}^2,\ \hat{\vec{L}}^2,\ \hat{\vec{S}}^2$$

findes operatorer, der ikke er indbyrdes ombyttelige.

b) Opskriv matricerne svarende til (7.67-68) for sammensætningen af bane- og spinimpulsmomentet for en p-elektron ($l = 1, s = \frac{1}{2}$). Find egenværdier og tilhørende egentilstande.

OPGAVE 7.2

En elektron bevæger sig i et harmonisk oscillatorpotential $V(r) = Kr^2/2$, hvor r angiver længden af stedvektoren $\vec{r}$. På grund af relativistiske korrektioner indgår foruden den kinetiske og den potentielle energi også spin-bane koblingen

$$\hat{H}_{\text{so}} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}} \tag{7.121}$$

i Hamiltonoperatoren.

a) Udtryk $\hat{H}_{\text{so}}$ ved elektronens totale impulsmoment $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$. Hvilke af operatorerne $\hat{\vec{J}}, \hat{\vec{L}}, \hat{\vec{S}}, \hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{\vec{S}}^2$ er ombyttelige med Hamiltonoperatoren?

b) Find hvorledes oscillatorens næstlaveste energiniveau spalter op under indflydelse af spin-bane koblingen og angiv niveauernes udartningsgrad. Som i opgave 6.1 antager vi, at spin-bane koblingen er tilstrækkelig svag til, at opspaltningen kan bestemmes ved at udtrykke Hamiltonoperatoren som en matrix i den begrænsede basis, der udgøres af egentilstandene hørende til det betragtede energiniveau for den harmoniske oscillator.

c) Find endvidere, hvorledes et svagt magnetfelt (jvf. opgave 6.1) påvirker det betragtede energiniveau under hensyn til forekomsten af spin-bane kobling. Undersøg de tilfælde, hvor magnetfeltets betydning er lille, henholdsvis stor i forhold til spin-bane koblingens, såvel som det almindelige tilfælde.

OPGAVE 7.3

Det antages, at en partikels tilstand er beskrevet ved den normaliserede bølgefunktion, udtrykt i sædvanlige polære koordinater,

$$\psi(r,\theta,\phi) = f(r)\sin^2\theta(\cos^2\phi - \sin^2\phi), \tag{7.122}$$

hvor $f(r)$ betegner en funktion af r alene.

a) Undersøg, om ψ er en egenfunktion for operatorerne $\hat{\vec{L}}^2$, $\hat{L}_z$ og $\hat{L}_z^2$.

b) Hvad er sandsynligheden for at finde partiklen med impulsmomentprojektionen $L_z = 2\hbar$?

c) Hvad er værdien af fluktuationskvadratet $\Delta^2(L^2)$?

d) Begrund, at fluktuationskvadraterne opfylder relationen

$$\Delta^2(L_x) = \Delta^2(L_y). \tag{7.123}$$

Vis at $< L_\pm >= 0$ og dermed at $< L_x >=< L_y >= 0$. Benyt dette til at vise relationen

$$\Delta^2(L_x) = \Delta^2(L_y) = \frac{1}{4}\Delta^2(L_z). \tag{7.124}$$

e) Skitser hvorledes den til bølgefunktionen knyttede sandsynlighedstæthed varierer på en kugleoverflade.

OPGAVE 7.4

Vis, at grundtilstandsbølgefunktionen for den isotrope, tredimensionale harmoniske oscillator er fælles egenfunktion for L_x, L_y og L_z. Undersøg, om de tre tilstande $|1,0,0\rangle$, $|0,1,0\rangle$ og $|0,0,1\rangle$ hørende til det næstlaveste energiniveau (samme notation som i opgave 6.1) er egenfunktioner for disse operatorer, og vis hvorledes man kan danne linearkombinationer, således at de resulterende tilstande er egenfunktioner for L_z. Find udartningsgraden af det tredjelaveste energiniveau og vis, at en af de tilhørende energiegentilstande kan vælges på formen angivet i opgave 7.3.

OPGAVE 7.5

Vis, at tilstandene (7.73) er egentilstande for $\vec{S}^2$, hvor $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3$ er summen af tre spin-1/2 partiklers impulsmoment, med egenværdi $j(j+1)\hbar^2$, hvor $j = 3/2$.

OPGAVE 7.6

I kvantemekanikken er man tit ude for at skulle udregne integraler i polære koordinater defineret ved (7.14). Volumenelementet $dxdydz$ er i polære koordinater givet ved

$$r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi. \tag{7.125}$$

Ved anvendelse af disse koordinater er det ofte bekvemt at bruge $\cos\theta$ som integrationsvariabel (jvf. nedenfor), idet man udnytter, at $\sin\theta d\theta = -d(\cos\theta)$.

a) Benyt udtrykkene (7.15-16) til at eftervise, at de tre funktioner

$$\cos\theta,\ \sin\theta e^{i\phi},\ \sin\theta e^{-i\phi} \tag{7.126}$$

er egenfunktioner for kvadratet på impulsmomentet og dets z-komposant. Angiv de tilhørende egenværdier.

b) Find resultatet af at virke på hver af ovenstående funktioner med operatoren O givet ved

$$O = e^{-i\phi}(i\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}). \tag{7.127}$$

c) Vi indfører et indre produkt $(\cdot,\cdot)$ defineret ved

$$(\psi_i, \psi_j) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\psi_i^*\psi_j. \tag{7.128}$$

Ved at gange hver af de tre ovenstående funktioner med en konstant (en såkaldt normeringskonstant) kan ortonormeringsbetingelsen

$$(\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij} \tag{7.129}$$

opfyldes. Bestem normeringskonstanter for hver af de tre funktioner og angiv matricen for operatoren O i denne basis. Er matricen hermitesk?

d) Bestem normeringskonstant for funktionen

$$\psi = \sin^2\theta(\cos^2\phi - \sin^2\phi). \tag{7.130}$$

Hvilket funktionsrum udspændes af $O^n\psi$, hvor n er et vilkårligt positivt tal?

OPGAVE 7.7

Vi betragter en partikel, der befinder sig i tilstanden $|lm\rangle$, hvor $|lm\rangle$ angiver en fælles egentilstand for L^2 og L_z. Vis, at fluktuationskvadraterne $\Delta^2(L_x), \Delta^2(L_y)$ opfylder relationen

$$\Delta^2(L_x) + \Delta^2(L_y) = \hbar^2[l(l+1) - m^2]. \tag{7.131}$$

Find den mindst mulige værdi af denne størrelse for en given værdi af l og diskuter den klassiske grænse, hvor l går imod uendelig.

OPGAVE 7.8

En partikel med masse m bevæger sig i et centralfelt beskrevet ved den potentielle energi $V(r)$ og et svagt homogent magnetfelt $\vec{B}$, svarende til Hamiltonoperatoren (sammenlign ligning (7.2))

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L} + V(r). \tag{7.132}$$

Benyt (4.9) til at vise, at middelværdien af impulsmomentvektoren præcesserer omkring aksen langs $\vec{B}$ og bestem præcessionsfrekvensen. Sammenlign den fundne frekvens med cyklotronfrekvensen. Vis, at $< L_+ >$ tilfredsstiller en førsteordens differentialligning (med tiden som variabel) og angiv den almindelige løsning til denne.

OPGAVE 7.9

I denne opgave undersøger vi bevægelsen af en partikel med masse m i en tredimensional 'brønd' givet ved potentialet

$$V(r) = -V_0 \quad \text{for} \quad r \leq a; \quad V(r) = 0 \quad \text{ellers}, \tag{7.133}$$

hvor V_0 er en positiv konstant. I opgaven skal vi udelukkende betragte bundne s-tilstande, svarende til at kvantetallet l er nul.

a) Opstil differentialligningen for den radiale funktion $u = rR$ og find betingelsen for, at brønden indeholder mindst én s-tilstand.

b) Angiv et tilnærmet udtryk for energierne E_n af de bundne s-tilstande i tilfældene i) $|E_n| \ll V_0$ og ii) $E_n + V_0 \ll V_0$.

OPGAVE 7.10

Bohrs atommodel fra 1913 tager udgangspunkt i Plancks strålingsteori fra 1900 (se afsnit 9.5)) og to grundlæggende antagelser (som senere er kaldt postulater), der på afgørende vis bryder med den klassiske fysik. I lærebøger fremstilles Bohrs teori ofte i en form, der er historisk ukorrekt, hvad angår indholdet af de postulater, der førte Bohr til resultatet (7.85). I den første af tre afhandlinger fra 1913 (N. Bohr, Philosophical Magazine 26, 1 (1913)) hedder det (p.7) "The principal assumptions used are: 1) That the dynamical equilibrium of the systems in the stationary states can be discussed by help of the ordinary mechanics, while the passing of the systems between different stationary states cannot be treated on that basis. 2) That the latter process is followed by emission of a *homogeneous* radiation, for which the relation between the frequency and the amount of energy emitted is the one given by Planck's theory". Derimod er kvantiseringen af baneimpulsmomentet $L = n\hbar$ ikke et postulat, men - som vist i den første afhandling - en konsekvens af Bohrs teori anvendt på elektroner, der bevæger sig i cirkelbaner.

Formålet med denne opgave er at gengive Bohrs argumentation ved at udlede (7.85) ud fra de to nævnte antagelser i forbindelse med et krav om, at den klassiske og kvantefysiske beskrivelse stemmer overens for store kvantetal.

a) Benyt resultaterne fra teorien for Keplerbevægelse til at vise, at en elektron med po-

tentiel energi $V(r) = -e_0^2/r$ klassisk set kan gennemløbe lukkede, ellipseformede baner, hvis halve storakse a er knyttet til energien E igennem

$$E = -\frac{e_0^2}{2a}, \tag{7.134}$$

mens omløbstiden T er givet ved

$$T^2 = \frac{4\pi^2 m a^3}{e_0^2}. \tag{7.135}$$

b) Ifølge (7.134) og (7.135) er omløbsfrekvensen $\Omega = 2\pi/T$ givet ved

$$\Omega = 2\sqrt{\frac{2}{m}}\frac{|E|^{3/2}}{e_0^2}. \tag{7.136}$$

Ud fra postulatet om eksistensen af stationære tilstande kan vi antage, at energien af en stationær tilstand, der er nummereret med et helt tal n, er knyttet til omløbsfrekvensen Ω ved en relation af formen

$$|E| = f(n)\hbar\Omega, \tag{7.137}$$

hvor funktionen $f(n)$ foreløbig er ubestemt. Det følger af (7.136) og (7.137), at energien E_n af den n'te stationære tilstand kan udtrykkes som

$$E_n = -\frac{A}{f(n)^2}, \; A = \frac{me_0^4}{8\hbar^2} \tag{7.138}$$

Ved overgangen fra en stationær tilstand mærket med n_1 til en stationær tilstand mærket med n_2 udsendes der ifølge Bohrs andet postulat stråling med frekvens ω givet ved

$$\hbar\omega = E_{n_1} - E_{n_2}, \tag{7.139}$$

hvor det forudsættes at $E_{n_1} > E_{n_2}$.

Vis, at energiforskellen $E_n - E_{n-1}$ og dermed strålingsfrekvensen ω for store n kan skrives som

$$\hbar\omega = E_n - E_{n-1} = 2A\frac{f'(n)}{f(n)^3}, \tag{7.140}$$

hvor f' angiver den afledede af funktionen $f(x)$ med hensyn til den variable x. Bemærk, at (7.137) og (7.138) medfører, at den klassiske omløbsfrekvens Ω kan udtrykkes som

$$\hbar\Omega_n = \frac{A}{f(n)^3}. \tag{7.141}$$

Da $f(n)$ er en voksende funktion af n, vil forholdet Ω_n/Ω_{n-1} nærme sig 1, når n er stor.

c) For at få overensstemmelse med den eksperimentelt bestemte Balmer-formel antog Bohr, at f var lineær i n, $f = cn$, hvor c er en numerisk konstant, og bestemte konstanten c ved at identificere strålingsfrekvensen ω givet ved (7.140) med omløbsfrekvensen $\Omega_n \simeq \Omega_{n-1}$ i (7.141). Denne betingelse udtrykker kravet om, at den klassiske og kvantefysiske beskrivelse stemmer overens for store kvantetal.

Vis, ud fra (7.140) og (7.141), at de to frekvenser ω og Ω kun kan stemme overens for store kvantetal, hvis f' er konstant, lig med $1/2$, og vis, at $f = n/2$ resulterer i, at energien af de stationære tilstande er givet ved (7.85).

OPGAVE 7.11

Operatoren T for den totale kinetiske energi af to partikler (masse m_1 og m_2), der bevæger sig i én dimension, er

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}.$$

Indfør tyngdepunktskoordinaten

$$X = \frac{1}{m_1 + m_2}(m_1 x_1 + m_2 x_2)$$

og den relative koordinat

$$x = x_2 - x_1$$

og vis, at den kinetiske energi kan skrives på formen

$$T = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

hvor $M = m_1 + m_2$ og μ er den reducerede masse $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$.

8 Symmetrier

Symmetribetragtninger er af grundlæggende betydning på alle områder af fysikken. Hvis Hamiltonfunktionen for et klassisk mekanisk system er uafhængig af en eller flere af de generaliserede koordinater, vil den tilhørende generaliserede impuls være en bevægelseskonstant, jvf. (2.39). For en partikel, der bevæger sig i et axialsymmetrisk potential, vil L_z derfor være bevaret i tiden. Sfærisk symmetri, der er karakteristisk for bevægelse i et centralfelt, giver derimod anledning til bevarelse af alle tre komposanter af impulsmomentet. Hvis Hamiltonfunktionen er uændret under translation, er partiklens lineære impuls bevaret, mens den tilsvarende symmetri i tid er knyttet til energibevarelse. For isolerede systemer betyder sådanne symmetrier, at det er muligt at separere den indre bevægelse fra bevægelsen af systemet som helhed. Således medfører rummets translationsinvarians, at et isoleret systems lineære impuls er bevaret, hvorved tyndepunktets bevægelse kan skilles ud fra den indre bevægelse.

I kvantemekanikken gør der sig en række andre symmetrier gældende foruden de symmetrier, der er kendt fra den klassiske mekanik. Nogle af disse vil blive omtalt i dette kapitel. Til symmetrioperationer er der i kvantemekanikken knyttet lineære operatorer. Karakteristisk for disse er, at deres egenværdier modsat hermiteske operatorers ikke nødvendigvis er reelle. Derimod bevarer disse operatorer normkvadratet på tilstandene, idet symmetrioperatorerne er unitære. En unitær operator U er karakteriseret ved, at dens inverse er lig dens hermitesk konjugerede,

$$U^{-1} = U^{\dagger}. \tag{8.1}$$

På grund af egenskaben (8.1) vil normkvadratet af en tilstand være uændret under en unitær operation,

$$||Uf||^2 = \langle Uf|Uf\rangle = \langle f|U^{\dagger}Uf\rangle = \langle f|f\rangle = ||f||^2. \tag{8.2}$$

8.1 Paritet

For den lineære harmoniske oscillator er den potentielle energi $Kx^2/2$ symmetrisk i x. Denne symmetri giver anledning til eksistensen af en bevægelseskonstant, der ikke har nogen umid-

delbar klassisk analogi. Hamiltonoperatoren for den harmoniske oscillator er invariant under symmetritransformationen

$$x' = -x, \tag{8.3}$$

idet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2} + \frac{1}{2}Kx'^2. \tag{8.4}$$

Hamiltonoperatoren har altså samme udseende i de mærkede koordinater som i de umærkede. Dette gælder åbenbart ikke, hvis den potentielle energi ud over et kvadratisk led i x også indeholder et led af tredje orden.

I kvantemekanikken knytter man en lineær operator til en symmetritransformation. Paritetsoperatoren $\hat{P}$ er defineret ved

$$\hat{P}f(\vec{r}) = f(-\vec{r}). \tag{8.5}$$

Paritetsoperatoren er såvel unitær som hermitesk. Dens egenværdier P' er ± 1. Dette indses af, at

$$\hat{P}^2 f = f \tag{8.6}$$

for en vilkårlig funktion $f(\vec{r})$. Desuden gælder

$$\hat{P}^2 f = P'^2 f, \tag{8.7}$$

hvis f er en egenfunktion for $\hat{P}$. Tilsammen medfører (8.6-7) at $P'^2 = 1$ eller $P' = \pm 1$.

Symmetrien af den harmoniske oscillator er udtrykt ved, at paritetsoperatoren kommuterer med Hamiltonoperatoren. Egentilstandene for den harmoniske oscillators Hamiltonoperator er samtidig egentilstande for paritetsoperatoren med egenværdier $(-1)^n$, hvor kvantetallet n bestemmer energiegenværdierne ifølge (2.103). Grundtilstandens bølgefunktion er således en lige funktion af x, den næste ulige etc. Overlejringer som de minimale bølgepakker, vi undersøgte i kapitel 4, har ingen veldefineret paritet, med mindre det netop er grundtilstanden, der betragtes.

I almindelighed har egentilstandene for systemets Hamiltonoperator ikke nogen veldefineret paritet, selv om paritetsoperatoren kommuterer med Hamiltonoperatoren. Hvis en elektrons potentielle energi som i brintatomet skyldes Coulombkraften mellem elektronen og den positivt ladede kerne, vil Hamiltonoperatoren og paritetsoperatoren kommutere, da den

potentielle energi er uændret, når $\vec{r}$ erstattes med $-\vec{r}$. Energiniveauet hørende til kvantetallet $n = 2$ i brintatomets energiniveauer (7.85), er imidlertid ifølge (7.87) udartet med udartningsgraden $4(= n^2)$, så længe der ses bort fra spin. Som vi har set i afsnit 7.4, kan de fire lineært uafhængige egentilstande vælges proportionale med tilstandene

$$|0,0\rangle, |1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle, \tag{8.8}$$

hvor $|l,m\rangle$ angiver[1] en samtidig egentilstand for kvadratet på elektronens baneimpulsmoment (med egenværdi $l(l+1)\hbar^2$) og z-komposanten af dette (med egenværdi $m\hbar$). Pariteten af disse tilstande er $(-1)^l$, og det er derfor klart, at man ved at blande de fire tilstande kan frembringe tilstande uden nogen bestemt paritet. Således har overlejringerne

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0,0\rangle + |1,0\rangle), \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,0\rangle - |1,0\rangle) \tag{8.9}$$

ingen bestemt paritet. Det ses, at middelværdien af paritetsoperatoren for hver af de to overlejringer (8.9) er nul. Lader vi paritetsoperatoren virke på den første, fremkommer den sidste og omvendt. I en basis, der udgøres af tilstandene (8.9), er paritetsoperatoren altså ikke repræsenteret ved en diagonal matrix, men derimod ved Paulimatricen σ_x, der blev indført i (2.76).

At tilstandene (8.9) ikke er egenfunktioner for paritetsoperatoren, har konsekvenser for, hvorledes de tilhørende energier påvirkes ved en lille ændring af Hamiltonoperatoren. Lad os for eksempel forestille os, at et brintatom påvirkes af et konstant elektrisk felt $\vec{E}$ i z-aksens retning svarende til den potentielle energi V givet ved

$$V = eEz, \tag{8.10}$$

hvor elektronens koordinater (x,y,z) er regnet fra kernens position. Bidraget (8.10) til Hamiltonoperatoren har en bestemt paritet (nemlig -1). Da sandsynlighedstætheden hørende til hver af de fire tilstande i (8.8) har en bestemt paritet (nemlig 1), vil middelværdien af energien (8.10) i en sådan tilstand være nul. Sandsynlighedstæthederne svarende til de to tilstande

[1]Vi mærker her tilstanden med værdien af kvantetallet l i stedet for at benytte længdekvadratet $l(l+1)$ som i kapitel 7. Man har frit valg med hensyn til, hvilken af disse mærkater man ønsker at benytte, men det mest bekvemme er normalt at bruge l.

i (8.9) har derimod ikke nogen bestemt paritet. Man kan da forvente (som en detaljeret beregning bekræfter), at energiændringerne er proportionale med E, idet den til sandsynlighedstæthederne svarende ladningstæthed (der ikke repræsenterer nogen fysisk ladningstæthed, men blot er en hjælpestørrelse givet ved sandsynlighedstætheden gange elektronens ladning $-e$) ikke er symmetrisk under operationen $z \to -z$. Det elektriske felt vil derfor påvirke et system, der befinder sig i en tilstand givet ved en af overlejringerne (8.9), som om systemet besad et elektrisk dipolmoment. Hvis energiændringen ΔE er proportional med størrelsen af den elektriske feltstyrke E, ses det ved dimensionsanalyse, at ΔE må have formen

$$\Delta E = \pm ceEa_0, \tag{8.11}$$

hvor c er en numerisk konstant. Af symmetrigrunde må det nemlig forventes, at energiændringerne hørende til de to tilstande i (8.9) er lige store med modsat fortegn.[2] Størrelsen af konstanten c viser sig at blive 3, når middelværdien af (8.10) beregnes under hensyn til den kendte radiale afhængighed af bølgefunktionerne hørende til tilstandene (8.8).

Med disse overvejelser har vi imidlertid helt set bort fra muligheden af, at andre linearkombinationer end de i (8.9) anførte kunne komme på tale. For at retfærdiggøre denne fremgangsmåde benytter vi, at bidraget (8.10) til systemets Hamiltonoperator er ombyttelig med $\hat{L}_z$, z-komposanten af elektronens baneimpulsmoment. Middelværdien af z i en tilstand fremkommet ved en af de andre mulige linearkombinationer indeholder led af formen

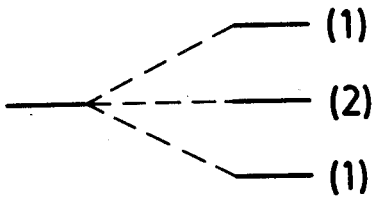
$$\langle l, m|z|l', m'\rangle, \tag{8.12}$$

hvor $l \neq l'$ og $m \neq m'$. Da kommutatoren $[z, \hat{L}_z]$ er nul og det derfor gælder, at

$$\langle l, m|[z, \hat{L}_z]|l', m'\rangle = 0, \tag{8.13}$$

må matrixelementerne (8.12) være nul på grund af, at $m \neq m'$, og at venstresiden af (8.13) kan skrives som $(m'-m)\hbar$ gange (8.12). To af de fire tilstande i (8.8), svarende til $m = \pm 1$, vil derfor ikke give anledning til energiændringer, når brintatomet påvirkes af et svagt elektrisk

[2]Dette fremgår af vinkelafhængigheden af de tilhørende rumlige bølgefunktioner, der resulterer i sandsynlighedstætheder af formen $(f(r) \pm g(r)\cos\theta)^2$, hvor f og g er funktioner af længden r af elektronens stedvektor, mens θ er polarvinklen med hensyn til retningen af det elektriske felt.



Figur 8.1: Opspaltning af det fire gange udartede niveau i brintatomet

felt. Den firedobbelte udartning uden elektrisk felt bliver således delvist hævet af (8.10), idet niveauet spalter op i tre, med et dobbelt udartet niveau, der er uændret af det elektriske felt (fig. 8.1).

Vi har set, hvorledes symmetriargumenter kan give indsigt i, hvordan et brintatom påvirkes af et elektrisk felt. En kvantitativ behandling af dette problem kræver en løsning af Schrödingerligningen ved brug af første ordens perturbationsteori. Det er imidlertid meget vigtigt i anvendelserne af kvanteteorien at udnytte eksistensen af bestemte symmetrier. Dels kan det hjælpe til på forhånd at gætte, hvad den kvantitative behandling resulterer i, og dels kan det - hvad der i praksis har stor betydning - forenkle selve beregningen væsentligt.

8.1.1 Perturbationsteori

Før vi forlader paritetssymmetrien, skal vi vise, hvorledes perturbationsteori kan anvendes til en direkte beregning af energiændringerne til første orden. Lad os antage, at vi har forelagt et system med Hamiltonoperator H givet ved

$$H = H_0 + \lambda H' \tag{8.14}$$

hvor H_0 er nulte ordens Hamiltonoperatoren, mens $\lambda H'$ repræsenterer en perturbation. Parameteren λ er dimensionsløs og indføres som i afsnit 5.4.2 for at holde rede på ordenen i perturbationsudviklingen. I eksemplet ovenfor er H_0 Hamiltonoperatoren $p^2/2m - e_0^2/r$ for brintatomet, mens H' skal identificeres med eEz. Vi ønsker nu at beregne energiændringerne til første orden i H' (svarende til første orden i det elektriske felt E i det betragtede eksempel). Bølgefunktionen ψ deles derfor op i et nulte ordens led $\sum_{i=1}^{g} a_i \Phi_i$, der er uafhængig af perturbationen, samt højere ordens led. Her har vi taget hensyn til en mulig udartning (med

udartningsgrad g) af det uperturberede niveau ved at udvikle nulte ordens leddet på en basis bestående af orthonormale egenfunktioner Φ_i for H_0 hørende til egenværdien E_0. Vi har altså

$$\psi = \sum_{i=1}^{g} a_i \Phi_i + \lambda \psi', \tag{8.15}$$

hvor $\lambda\psi'$ repræsenterer led, der er af første orden i H' (i det foreliggende eksempel den elektriske feltstyrke E). Koefficienterne a_i er foreløbigt ubekendte, men som vi skal se, bliver de bestemt samtidig med energiændringerne $\lambda E'$, forudsat at det oprindeligt g gange udartede niveau spalter op i netop g forskellige niveauer som følge af perturbationen.

Egenværdiligningen for H er herefter

$$(H_0 + \lambda H')(\sum_{i=1}^{g} a_i \Phi_i + \lambda \psi') = (E_0 + \lambda E')(\sum_{i=1}^{g} a_i \Phi_i + \lambda \psi').$$

I denne egenværdiligning kan vi nu for det første udnytte, at $\sum_{i=1}^{g} a_i \Phi_i$ er egenfunktion for H_0 til at eliminere leddene af nulte orden i λ. Ved at bortkaste led af højere orden end første i λ, gange ligningen med Φ_j^* og integrere over de variable (i det pågældende eksempel elektronens rumlige kordinater x, y, z eller r, θ, ϕ) fremkommer matrixligningen

$$\sum_{i=1}^{g} (\langle j|H'|i\rangle - E'\delta_{ji}) a_i = 0, \tag{8.16}$$

hvor $\langle j|H'|i\rangle = \langle \Phi_j | H' \Phi_i \rangle$ er en g gange g matrix. Vi har udnyttet, at $\langle \Phi_j | H_0 \psi' \rangle = E_0 \langle \Phi_j | \psi' \rangle$ og bortdivideret λ. Hvis ligningssystemet (8.16) skrives ud på matrix-form, har det åbenbart følgende udseende

$$\begin{pmatrix} \langle 1|H'|1\rangle - E' & \langle 1|H'|2\rangle & \cdots & \langle 1|H'|g\rangle \\ \langle 2|H'|1\rangle & \langle 2|H'|2\rangle - E' & \cdots & \langle 2|H'|g\rangle \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \langle g|H'|1\rangle & \langle g|H'|2\rangle & \cdots & \langle g|H'|g\rangle - E' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{8.17}$$

Betingelsen for, at det homogene ligningssystem (8.17) har løsninger er, at determinanten til matricen på venstre side af (8.17) er nul. De tilhørende bølgefunktioner bestemmes for hver løsning E' ved at indsætte den fundne værdi af E' i (8.17) og løse for den tilhørende søjlevektor $(a_1, a_2, \cdots, a_g)$. I det specielle tilfælde, hvor udartningsgraden g er 1, bliver energiændringen E' givet ved middelværdien af H' i tilstanden Φ, der er løsning til egenværdiligningen $H_0\Phi = E_0\Phi$,

$$E' = \langle \Phi, H'\Phi \rangle. \tag{8.18}$$

Kommentar. Det er nærliggende at spørge om kriteriet for gyldigheden af førsteordens perturbationsteori. Svaret på dette kan fås ved at gå til anden og højere orden i perturbationen. For nemheds skyld betragter vi blot et system med to ikke-udartede energiniveauer E_1 og E_2 hørende til en Hamiltonoperator H_0. De tilhørende bølgefunktioner kaldes Φ_1 og Φ_2. Idet den totale Hamiltonoperator er $H_0 + H'$, kan de eksakte egenværdier bestemmes ved at bringe matricen

$$\begin{pmatrix} E_1 + H'_{11} & H'_{12} \\ H'_{21} & E_2 + H'_{22} \end{pmatrix},$$

på diagonalform. Her er $H'_{ij} = \langle \Phi_i | H' \Phi_j \rangle$ med $i = 1,2$ og $j = 1,2$ matricen for H' i den basis, der udgøres af egenfunktionerne hørende til H_0. For overskuelighedens skyld skriver vi matricen som

$$\begin{pmatrix} a & c \\ c^* & b \end{pmatrix},$$

hvor $a = E_1 + H'_{11}$, $b = E_2 + H'_{22}$ og $c = H'_{12} = (H'_{21})^*$.

Matricens egenværdier λ ses at være givet ved løsningerne til andengradsligningen

$$(a - \lambda)(b - \lambda) - |c|^2 = 0,$$

altså

$$\lambda = \frac{1}{2}(a + b \pm \sqrt{(a-b)^2 + |c|^2}).$$

Resultatet af at benytte første ordens perturbationsteori svarer åbenbart til at se bort fra de ikke-diagonale elementer i matricen for H', svarende til betingelsen $|c| \ll |a - b|$. Hvis denne betingelse er opfyldt, vil det normalt også gælde, at $|H'_{11} - H'_{22}|$ er lille i forhold til $|E_1 - E_2|$. Betingelsen for, at førsteordens perturbationsteori er gyldig, kan hermed udtrykkes som

$$|H'_{12}| \ll |E_1 - E_2|.$$

Analoge betingelser fås i de tilfælde, hvor matricen for H har mere end to rækker og søjler, jvf. opgave 8.6, hvori resultatet af andenordens perturbationsteori udledes i det ikke-udartede tilfælde.

Resultaterne (8.17-18) af førsteordens perturbationsteori for det stationære tilfælde hører til de mest benyttede i kvanteteorien. Vi illustrerer brugen af (8.17) ved at bestemme matricen $\langle j|H'|i\rangle$ for $n = 2$ niveauet i brintatomet med H' givet ved $H' = eEz$, jvf. (8.10). Som vi så ved hjælp af symmetribetragtninger, er de eneste fra nul forskellige matrixelementer givet ved $\langle 1,0|z|0,0\rangle$ og $\langle 0,0|z|1,0\rangle$. Som vist i (7.95) er den radiale funktion R_{20} hørende til $n = 2$ og $l = m = 0$ proportional med $(1 - r/2a_0)\exp(-r/2a_0)$. Den normerede bølgefunktion svarende

til tilstanden $|0,0\rangle$ bliver herefter

$$|0,0\rangle : \quad \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\frac{1}{a_0^{3/2}}(1-\frac{r}{2a_0})e^{-r/2a_0} \tag{8.19}$$

Tilsvarende har vi i (7.88) vist, at den radiale funktion R_{nl} hørende til $n = 2$ og $l = 1$ er proportional med $r\exp(-r/2a_0)$. Dermed bliver den normerede bølgefunktion hørende til $|1,0\rangle$ givet ved

$$|1,0\rangle : \quad \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\frac{1}{a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta \tag{8.20}$$

idet $\cos\theta$ er egenfunktion for $\hat{\vec{L}}^2$ med egenværdi $2\hbar^2$.

Matrixelementet $\langle 0,0|z|1,0\rangle$ kan nu findes ved at integrere produktet af de to bølgefunktioner (8.19-20) med $r\cos\theta$, med resultatet $-3a_0$, som nævnt ovenfor. Det følger heraf, at afstanden mellem niveauerne på fig. 8.1 er $3ea_0E$. Ved at indsætte de fundne rødder i ligningssystemet kan det verificeres, at de tilhørende nulte ordens bølgefunktioner er bestemt af tilstandene i (8.9). Bemærk, at dobbeltroden $E' = 0$ ikke kan fastlægge nogen bestemt linearkombination af $|1,1\rangle$ og $|1,-1\rangle$. Denne resterende dobbelte udartning kan f. eks. hæves ved, at der tilføjes et magnetfelt.

8.2 Permutation

Som den næste i rækken af symmetrier vil vi diskutere permutationssymmetri og dens anvendelse på identiske partikler. Identiske partikler kan per definition ikke skelnes fra hinanden. En elektron og en neutron kan skelnes ved deres masser og ladning, men to elektroner har samme masse og ladning og kan derfor ikke skelnes ved disse. Dette gælder, uanset om vi beskriver elektronerne klassisk eller kvantemekanisk. I den klassiske mekanik kan ens partikler som de to elektroner imidlertid principielt skelnes fra hinanden ved at følge partiklerne i deres bane, uanset hvor tæt de måtte være på hinanden. Noget tilsvarende er ikke muligt i kvantemekanikken. Manglen på ombyttelighed mellem sted- og impulsoperatorer fører, som vi så i kapitel 3, til usikkerhedsrelationerne og den heraf afledte beskrivelse af partiklens bevægelse ved bølgepakker, der hverken har veldefineret position eller impuls. Kun i den klassiske grænse har det mening at tale om partiklens bane. Hvis elektroner spredes mod hinanden, er det principielt umuligt at 'følge med' elektronernes individuelle bevægelse. Det er

derfor nødvendigt at indbygge den særlige symmetri over for ombytning af identiske partikler i beskrivelsen af et sådant spredningseksperiment.

Permutationsoperatoren $\hat{P}_{12}$ er en lineær operator, der er defineret ved

$$\hat{P}_{12}\psi(1,2) = \psi(2,1). \tag{8.21}$$

Her betragter vi en tilstand med to identiske partikler beskrevet ved bølgefunktionen $\psi(1,2)$. Som for paritetsoperatoren ses egenværdierne at være ± 1, idet

$$\hat{P}_{12}^2\psi(1,2) = \psi(1,2) \tag{8.22}$$

og

$$\hat{P}_{12}\psi(1,2) = P'_{12}\psi(1,2) \tag{8.23}$$

hvis $\psi(1,2)$ er en egenfunktion. Af (8.22-23) følger da, at $P'_{12} = \pm 1$.

Partikler med halvtalligt spin som elektroner, protoner og neutroner er beskrevet ved bølgefunktioner, der skifter fortegn ved ombytning af to identiske partikler, svarende til at egenværdien P' ovenfor er -1. Partikler med heltalligt spin, som pioner eller ^{4}He-atomer, er derimod beskrevet ved bølgefunktioner, der er uændret under en sådan ombytning, svarende til at P' er $+1$. Man kalder den første slags partikler for fermioner, den anden for bosoner. Sammenhængen mellem spin og permutationssymmetri kan vises at være en konsekvens af Lorentzinvarians, men inden for rammerne af den ikke-relativistiske kvanteteori må sammenhængen opfattes som en erfaringssag.

Som eksempel på betydningen af symmetri med hensyn til ombytning af identiske partikler skal vi nu diskutere grundtilstanden af He-atomet. Atomet består af en positivt ladet kerne (kerneladning $2e$) omgivet af to elektroner. Ifølge ovenstående skal den bølgefunktion, der beskriver de to elektroner, være antisymmetrisk med hensyn til ombytning af disse. Hamiltonoperatoren for atomet er

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\vec{p}}_2^2}{2m} - \frac{2e_0^2}{r_1} - \frac{2e_0^2}{r_2} + \frac{e_0^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \tag{8.24}$$

Her angiver $\hat{\vec{p}}_i$ impulsoperatoren for hver af de to elektroner ($i = 1,2$), mens $\vec{r}_i$ er den i'te elektrons stedvektor regnet fra kernen. Der er set bort fra kernens medbevægelse. Hamiltonoperatoren (8.24) er symmetrisk over for ombytning af de to elektroner, i overensstemmelse med at elektronerne er identiske partikler.

Vi ønsker at bestemme heliumatomets grundtilstandsenergi E_0. Da denne per definition er lig med den mindst mulige egenværdi for Hamiltonoperatoren, kan operatoren $\hat{H} - E_0$ kun have egenværdier, der er positive eller nul. Middelværdien af denne operator må derfor også være enten positiv eller nul, hvorfor

$$0 \leq < (\hat{H} - E_0) > = < \hat{H} > - E_0, \tag{8.25}$$

idet middelværdidannelsen er foretaget med en vilkårlig normeret bølgefunktion. I følge (8.25) er $< \hat{H} >$ en øvre grænse på grundtilstandsenergien. Ved at vælge en passende normeret prøvefunktion og eventuelt variere parametre i denne kan vi opnå en tilnærmelse til E_0, der kan forbedres systematisk ved at bruge andre prøvefunktioner eller ved at introducere flere parametre i den oprindelige prøvefunktion. Dette er *variationsmetoden* til bestemmelse af grundtilstandsenergien for et vilkårligt kvantemekanisk system.

For at blive i stand til at vælge en rimelig prøvefunktion skal vi først diskutere problemet ved helt at se bort fra frastødningen mellem elektronerne, der er repræsenteret ved det sidste led i Hamiltonoperatoren (8.24). Herved reduceres Hamiltonoperatoren til en sum af to indbyrdes uafhængige led, der hver for sig beskriver en elektrons bevægelse om en positivt ladet kerne, hvis ladning er den dobbelte af brintatomets. Lad os derfor først bestemme grundtilstandsenergien for brintatomet. Som omtalt i afsnit 7.4 er det muligt at løse dette egenværdiproblem eksakt. Her skal vi blot gætte på en fornuftigt udseende funktion og dernæst vise, at den tilfredsstiller den tidsuafhængige Schrödingerligning med en egenværdi svarende til $n = 1$ i (7.85). For at gøre den kinetiske energi så lille som mulig vælges en funktion, der alene afhænger af afstanden r fra elektronen til brintkernen, og som ikke har nogen nulpunkter og deraf følgende 'krøller', nemlig

$$\psi = Ce^{-r/a}, \tag{8.26}$$

hvor C er en normaliseringskonstant og a er en konstant, der foreløbig er vilkårlig. Med baggrund i dimensionsanalysen fra kapitel 1 er det nærliggende at forvente, at a er proportional med Bohr-radius, der er den eneste karakteristiske længde, der kan dannes ud fra de opgivne størrelser. Da vi har til hensigt at vise, at (8.26) tilfredsstiller Schrödingerligningen, er der ingen grund til at benytte resultatet af dimensionsanalysen, da dette skal være en konsekvens

af differentialligningen. Vi indsætter derfor (8.26) i egenværdiligningen for energioperatoren og udnytter, at kun den radiale del af Laplaceoperatoren indgår på grund af bølgefunktionens kuglesymmetri. Dermed fås

$$-(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr})e^{-r/a}=(-\frac{1}{a^2}+\frac{2}{ra})e^{-r/a} \tag{8.27}$$

som resultat af at virke med operatoren hørende til den kinetiske energi. Vi skal vise, at (8.26) er en løsning til egenværdiligningen

$$-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\psi-\frac{Ze_0^2}{r}\psi=E\psi, \tag{8.28}$$

hvor vi har antaget, at kerneladningen for det brintlignende system er Ze. På grund af Coulombpotentialets karakteristiske afhængighed $1/r$ vil ligningen (8.28) kunne tilfredsstilles efter indsættelse af (8.26) ved passende valg af konstanterne E og a. Betingelserne er, at

$$\frac{\hbar^2}{ma}=Ze_0^2 \tag{8.29}$$

skal være opfyldt, samt at egenværdien E og længden a skal tilfredsstille relationen

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a^2} \tag{8.30}$$

for at (8.26) kan være en løsning. Det ses af (8.29), at

$$a=\frac{a_0}{Z}, \tag{8.31}$$

hvor a_0 er Bohr-radius givet ved

$$a_0=\frac{\hbar^2}{me_0^2}, \tag{8.32}$$

mens (8.29) indsat i (8.30) viser, at

$$E=-\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2} \tag{8.33}$$

er den tilhørende energi. Da bølgefunktionen (8.24) alene afhænger af r, må den være en egenfunktion for $\hat{L}_z$, der kun afhænger af vinkelvariablen ϕ, med egenværdi nul. På grund af bølgefunktionens sfæriske symmetri er den imidlertid også egenfunktion for $\hat{L}_x$ og $\hat{L}_y$ med egenværdi nul og dermed en egenfunktion for $\hat{L}^2$ med egenværdi nul. Tilstanden kan derfor mærkes med kvantetallene n, l og m som $\psi_{n,l,m}$ og er altså givet ved bølgefunktionen

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}, \tag{8.34}$$

hvor a er givet ved (8.31), og tilstanden (8.34) er normeret. Resultatet ses at være i overensstemmelse med diskussionen af brintatomet i afsnit 7.4. Den eneste forskel er, at vi her har baseret diskussionen direkte på Schrödingerligningen (8.28) uden at indføre det effektive potential V_{eff} og hjælpefunktionen χ. Vi har ikke vist, at tilstanden (8.34) svarer til den laveste egenværdi for Hamiltonoperatoren, men det er plausibelt i betragtning af, at den radiale funktion ikke har nogen nulpunkter (smlgn. den harmoniske oscillator i kapitel 3).

Efter dette mellemspil vender vi tilbage til spørgsmålet om He-atomets grundtilstand. Ud fra en energimæssig betragtning er det rimeligt at vælge en prøvefunktion, der svarer til, at begge elektroner er anbragt i den laveste energitilstand for det brintlignende system med $Z = 2$. Men dette strider umiddelbart mod kravet om, at bølgefunktionen skal være antisymmetrisk. Produkttilstanden

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r}_1)\psi_{1,0,0}(\vec{r}_2) \tag{8.35}$$

er jo symmetrisk med hensyn til ombytning af 1 og 2. Vi har imidlertid helt udeladt elektronens spin af disse betragtninger. Som vi så i forrige kapitel er det muligt at danne spinfunktioner, der er henholdsvis symmetriske (triplet, $s = 1$) og antisymmetriske (singlet, $s = 0$) over for ombytning af partiklerne. Multiplicerer vi således den symmetriske rumlige bølgefunktion (8.35) med den antisymmetriske spinfunktion (7.70) fremkommer en tilstand, der har den rigtige permutationssymmetri, idet den skifter fortegn ved ombytning af de to partikler.

Den således fremkomne bølgefunktion Ψ kan skrives på determinantformen

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{1,0,0}(1)\alpha(1) & \psi_{1,0,0}(2)\alpha(2) \\ \psi_{1,0,0}(1)\beta(1) & \psi_{1,0,0}(2)\beta(2) \end{vmatrix}. \tag{8.36}$$

Denne tilstand er ikke en egentilstand til operatoren (8.24), men den besidder den nødvendige symmetri og kan derfor forventes at give rimelige resultater, når den anvendes som prøvefunktion i (8.25). Man finder således (jvf. (8.52) i eksempel 8 nedenfor), at He-atomets energi må være mindre end

$$-\frac{11}{4}\frac{e_0^2}{a_0}, \tag{8.37}$$

der er 0,95 gange den eksperimentelt bestemt værdi. Endnu bedre resultater fås, hvis Z i (8.35) betragtes som en parameter, der kan varieres for at finde den mindste øvre grænse

(eksempel 8). Minimet antages for $Z = 27/16$, hvad der kan fortolkes som et udtryk for en afskærmning af kerneladningen til en værdi, der er mindre end 2. Hertil svarer energien

$$-(\frac{27}{16})^2\frac{e_0^2}{a_0} = -2,85\frac{e_0^2}{a_0}. \tag{8.38}$$

Dette resultat er $0,98$ gange den eksperimentelle værdi.

I det følgende kapitel vil vi gøre udstrakt brug af bølgefunktioner af typen (8.36), idet vi generaliserer denne til at gælde for N partikler, hvor N angiver antallet af ledningselektroner i et metal. I praksis kan N være 10^{23}. For at generalisere (8.36) behøver vi blot at erstatte $1/\sqrt{2}$ i normaliseringsfaktoren foran determinanten med $1/\sqrt{N!}$ og opbygge selve determinanten som i (8.36) ved at lade rækkerne angive N mulige énpartikeltilstande i en vilkårligt valgt orden, mens søjlerne angiver koordinaterne af de N identiske partikler svarende til en vilkårligt valgt nummerering af disse. En sådan tilstand er en egenfunktion for Hamiltonoperatoren for en ikke-vekselvirkende gas af fermioner. I stedet for at angive tilstanden på formen (8.36), der kaldes en *Slater-determinant*, kan man benytte notationen

$$|1_{i_1}, 1_{i_2}, \cdots, 1_{i_N}, 0, 0, \cdots\rangle. \tag{8.39}$$

Denne N-partikeltilstand angiver, at énpartikeltilstandene mærket $i_1, i_2, \cdots i_N$ er besat, mens de øvrige er ubesatte. Som det vil fremgå af det følgende kapitel, behøver vi ikke at skrive sådanne tilstande eksplicit ned, men de er underforstået, når vi for eksempel bestemmer grundtilstandsenergien af en ikke-vekselvirkende elektrongas som udgangspunkt for den kvantemekaniske beregning af lydhastigheden i metaller.

EKSEMPEL 8. HE-ATOMET OG H^--IONEN.

Ved hjælp af variationsmetoden kan man finde en øvre grænse på grundtilstandsenergien E_0, idet middelværdien af Hamiltonoperatoren i en vilkårlig tilstand er større end eller lig med E_0.

I det følgende skal vi bestemme en øvre grænse for grundtilstandsenergien af to-elektronatomer som He-atomet eller H^--ionen. Vi benytter en prøvefunktion af formen

$$\psi(r_1, r_2) = \exp(-\lambda_1 r_1 - \lambda_2 r_2) + \exp(-\lambda_1 r_2 - \lambda_2 r_1), \tag{8.40}$$

hvor λ_1 og λ_2 er variationsparametre. Det er ikke nødvendigt at normere ψ, idet grundtilstandsenergien E_0 tilfredsstiller uligheden

$$E_0 \leq \frac{\langle\psi|H\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \tag{8.41}$$

Højresiden af (8.41) er uændret, hvis prøvefunktionen ψ multipliceres med en vilkårlig konstant.

Hamiltonoperatoren for et to-elektron system (med kerneladning Ze) er i atomare enheder givet ved

$$H = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \tag{8.42}$$

Her er $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, idet $\vec{r}_i$ $(i = 1, 2)$ er stedvektorerne for de to elektroner. Bemærk, at der er set bort fra såvel relativistiske effekter som kernens medbevægelse.

Hamiltonoperatoren (8.42) er symmetrisk over for ombytning af de to elektroners koordinater. Da elektroner er identiske fermioner, skal prøvefunktionen derfor multipliceres med en antisymmetrisk spinfunktion, for at kravet om antisymmetri for den totale bølgefunktion kan blive opfyldt. Da Hamiltonoperatoren (8.42) ikke afhænger af elektronernes spinoperatorer, kan vi imidlertid helt se bort fra spinfunktionen (der er en egentilstand for kvadratet på det totale spin med egenværdien nul) ved middelværdidannelsen.

For at gøre beregningen overskuelig deler vi Hamiltonoperatoren op i to led, hvoraf det første repræsenterer elektronernes kinetiske energi og deres vekselvirkning med kernen, mens det andet hidrører fra frastødningen mellem elektronerne. Vi definerer derfor

$$H_i^0 = -\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{Z}{r_i}, \tag{8.43}$$

hvor $i = 1, 2$, og finder først middelværdien af $H_1^0 + H_2^0$. Ved bestemmelsen af middelværdien af den kinetiske energi udnyttes det, at

$$-\frac{1}{2r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr}e^{-\lambda r}) = -(\frac{\lambda^2}{2} - \frac{\lambda}{r})e^{-\lambda r}. \tag{8.44}$$

Integrationerne over de radiale variable r_1 og r_2 er elementære og resulterer i

$$\frac{\langle\psi|(H_1^0 + H_2^0)\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = -\frac{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}{2} + (\frac{1}{\lambda_1^3\lambda_2^3} + \frac{64}{(\lambda_1 + \lambda_2)^6})^{-1}$$
$$\cdot[(\lambda_1 - Z)(\frac{1}{\lambda_1^2\lambda_2^3} + \frac{32}{(\lambda_1 + \lambda_2)^5}) + (\lambda_2 - Z)(\frac{1}{\lambda_1^3\lambda_2^2} + \frac{32}{(\lambda_1 + \lambda_2)^5})]. \tag{8.45}$$

Bemærk, at udtrykket er symmetrisk over for ombytning af λ_1 og λ_2. Den mindste værdi af funktionen (8.45) antages, når $\lambda_1 = \lambda_2 = Z$, svarende til energien $-Z^2$. Dette er, hvad vi ville vente. Når der ikke tages hensyn til vekselvirkningen mellem elektronerne, er den samlede energi lig med det dobbelte af grundtilstandsenergien $-Z^2/2$ for et brintlignende system med kerneladning Z. Det er naturligvis overflødigt at anvende variationsmetoden for at opnå dette resultat, der er en konsekvens af, at Hamiltonoperatoren i denne tilnærmelse separerer i de to elektroners koordinater.

Vi skal nu bestemme middelværdien af vekselvirkningen $H' = 1/r_{12}$ mellem elektronerne. Denne vekselvirkning afhænger ikke blot af længden af elektronernes stedvektorer, men også af vinklen mellem disse, idet

$$H' = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta}}, \tag{8.46}$$

hvor θ er vinklen mellem $\vec{r}_1$ og $\vec{r}_2$. Først udføres integrationen over θ, idet vi vælger en polarakse langs $\vec{r}_1$. Ved at indføre variablen $x = \cos\theta$ fås

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1} dx \frac{1}{\sqrt{a - bx}} = (\sqrt{a + b} - \sqrt{a - b})/b, \tag{8.47}$$

hvor $a = r_1^2 + r_2^2$ og $b = 2r_1r_2$. Værdien af (8.47) ses at være $1/r_1$, hvis $r_1 > r_2$ og $1/r_2$, hvis $r_1 < r_2$. Det er derfor nødvendigt at opdele den efterfølgende integration over de radiale variable i to områder svarende til $r_1 > r_2$ og $r_1 < r_2$.

De radiale integrationer involverer således integraler af formen

$$I(\alpha,\beta) = \int_0^\infty dyye^{-\alpha y} \int_0^y dzz^2 e^{-\beta z} \tag{8.48}$$

og

$$J(\alpha,\beta) = \int_0^\infty dyy^2 e^{-\alpha y} \int_y^\infty dzze^{-\beta z}. \tag{8.49}$$

Ved udregning af disse integraler ses det, at summen $I + J$ er givet ved

$$I(\alpha,\beta) + J(\alpha,\beta) = \frac{2}{\alpha^2\beta^3} - \frac{2}{(\alpha+\beta)^2\beta^3} - \frac{2}{\beta^2(\alpha+\beta)^3}. \tag{8.50}$$

Heraf fås

$$\frac{\langle\psi|H'\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left(\frac{1}{\lambda_1^3\lambda_2^3} + \frac{64}{(\lambda_1+\lambda_2)^6}\right)^{-1}\left[\frac{\lambda_1+\lambda_2}{2\lambda_1^3\lambda_2^3} - \frac{\lambda_1^3+\lambda_2^3}{2(\lambda_1+\lambda_2)^2\lambda_1^3\lambda_2^3} - \frac{\lambda_1^2+\lambda_2^2}{2(\lambda_1+\lambda_2)^3\lambda_1^2\lambda_2^2} + \frac{20}{(\lambda_1+\lambda_2)^5}\right]. \tag{8.51}$$

Ligesom i (8.45) hidrører størrelsen opløftet til eksponenten -1 fra nævneren (ψ,ψ) i (8.41).

Dette afslutter bestemmelsen af middelværdien af Hamiltonoperatoren (8.42) i tilstanden givet ved (8.40), idet højresiden af (8.41) identificeres med summen af (8.45) og (8.51). I det følgende bestemmes forskellige øvre grænser på E_0 svarende til forskellige valg af parametrene λ_1 og λ_2.

A. $\lambda_1 = \lambda_2 = Z$.

Dette valg af parametre repræsenterer den eksakte løsning i det tilfælde, hvor vi helt ser bort fra H'. Værdien af (8.51) bliver da $5Z/8$. For He-atomet (Z=2) bliver den således bestemte grundtilstandsenergi givet ved uligheden

$$E_0 \leq -\frac{11}{4}, \qquad \text{(He)} \tag{8.52}$$

mens energien af H^--ionen er opadtil begrænset af

$$E_0 \leq -\frac{3}{8}. \qquad (H^-) \tag{8.53}$$

Disse resultater er i overensstemmelse med førsteordens perturbationsteori, idet prøvefunktionen jo er valgt som løsning til egenværdiligningen for Hamiltonoperatoren $H_1^0 + H_2^0$. Det fremgår også, at H^--ionen i denne tilnærmelse ikke er stabil, da (8.53) er større end grundtilstandsenergien $-1/2$ for et H-atom og en isoleret elektron.

B. $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$.

I dette tilfælde bliver udtrykket (8.45) lig med $\lambda^2 - 2\lambda Z$, mens udtrykket (8.51) er $5\lambda/8$. Minimeres summen af disse fås, at $\lambda = Z - 5/16$ giver den mindste værdi, nemlig $-(Z-5/16)^2$. Heraf følger, at

$$E_0 \leq -(Z - \frac{5}{16})^2. \tag{8.54}$$

For He er højre side af (8.54) lig med $-2,848$, hvad der er en forbedring af perturbationsresultatet (8.52). For H^--ionen er højre side $-0,4727$, hvad der stadigvæk ikke er nok til at stabilisere systemet. Dette opnås først, når vi lader de to parametre variere uafhængigt af hinanden.

C. Variation af både λ_1 og λ_2.

Ved udregning af summen af (8.45) og (8.51), finder man for H^--ionen ($Z = 1$), at den mindste værdi fremkommer, når $\lambda_1 = 1,039$ og $\lambda_2 = 0,283$. Nedenfor angiver vi i alt ni værdier af summen, svarende til parameterværdier λ_1, λ_2 i omegnen af det sæt, der giver mindst energi. Det fremgår af disse tal, at

$$E_0 \leq -0,51330. \qquad (H^-) \tag{8.55}$$

Hermed har vi vist, at H^--ionen er stabil med en bindingsenergi, hvis størrelse mindst er $0,01330$ a.u. eller $0,3619$ eV.

Tabel

λ_1	λ_2	energi (a.u.)
1,038	0,282	-0,51330163
1,039	0,282	-0,51330217
1,040	0,282	-0,51330176
1,038	0,283	-0,51330218
1,039	0,283	-0,51330284
1,040	0,283	-0,51330256
1,038	0,284	-0,51330176
1,039	0,284	-0,51330254
1,040	0,284	-0,51330238

De bedste sæt af λ-værdier er åbenbart meget forskellige, idet den karakteristiske længde $1/\lambda_2$ er næsten fire gange så stor som $1/\lambda_1$. Ud fra et klassisk synspunkt kan vi forsøge at fortolke bølgefunktionen hørende til det optimale parametersæt $(\lambda_1, \lambda_2) = (1,039, 0,283)$ som en afspejling af, at den ene elektron kredser om kernen i en afstand, der omtrent er lig Bohr-radius, mens den anden bevæger sig i en bane, hvis radius er næsten fire gange så stor. Et sådant billede må dog ikke tages bogstaveligt: bølgefunktionen (8.40) er en sum af to produktfunktioner. Absolutkvadratet på bølgefunktionen, der repræsenterer en sandsynlighedstæthed i et seksdimensionalt rum, indeholder foruden kvadratet på hver af produktfunktionerne også et dobbelt produkt, og kan derfor ikke identificeres med et simpelt produkt af sandsynlighedstætheder hørende til hver elektron.

EKSEMPEL 9. AMMONIAKMOLEKYLET, MASEREN OG DEN KEMISKE BINDING.

I dette eksempel vil vi først undersøge en simpel model for ammoniakmolekylet og benytte denne til at bestemme, hvorledes inversionsfrekvensen afhænger af højden af den energibarriere, der adskiller de to potentialminima for kvælstofatomet. Dernæst diskuterer vi maseren som eksempel på et system, der kan beskrives i en basis bestående af to tilstande. Til slut skal vi se, at resultaterne kan give en forståelse af den kemiske binding.

I det følgende skal vi antage, at den potentielle energi for kvælstofatomet i dets bevægelse vinkelret på brintatomernes plan er givet ved

$$V(z) = \frac{V_0}{z_0^4}(z^2 - z_0^2)^2, \tag{8.56}$$

hvor V_0 er en positiv konstant, mens z angiver positionen af kvælstofatomet relativt til den plan, hvori de tre brintatomer er placeret. Hamiltonoperatoren er givet ved

$$H = T + V(z), \tag{8.57}$$

hvor T er den kinetiske energi,

$$T = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dz^2}. \tag{8.58}$$

Her er μ den reducerede masse (se nedenfor).

I området omkring $z = \pm z_0$ kan V tilnærmes ved det harmoniske oscillatorpotential $4V_0(z \mp z_0)^2/z_0^2$. Det ses, at kraftkonstanten er $K = 8V_0/z_0^2$, hvorved energikvantet $\hbar\omega$ bliver

$$\hbar\omega = \sqrt{\frac{8V_0\hbar^2}{\mu z_0^2}}. \tag{8.59}$$

Oscillatorens karakteristiske længde a er

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}. \tag{8.60}$$

Størrelsen

$$\epsilon = \frac{a^2}{z_0^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{8\mu V_0 z_0^2}} \tag{8.61}$$

er et mål for udstrækningen af oscillator-bølgefunktionen i forhold til positionen af potentialets minima. Det fremgår ved sammenligning af (8.59) og (8.61), at

$$\epsilon = \frac{\hbar\omega}{8V_0}. \tag{8.62}$$

Når ϵ er lille, er inversionsfrekvensen meget mindre end $\hbar\omega$. Modelpotentialet (8.56) kan ikke bruges til en kvantitativ beskrivelse af ammoniakmolekylets egenskaber, men dets simple form gør det velegnet til at illustrere forskellen mellem de karakteristiske inversions- og vibrationsfrekvenser.

Den potentielle energi (8.56) er en lige funktion af z og derfor ombyttelig med paritetsoperatoren. Egenfunktionerne for Hamiltonoperatoren er enten lige eller ulige, da energiniveauerne ikke er udartede. Grundtilstandsbølgefunktionen er en lige funktion af z. Vi kan foretage en tilnærmet bestemmelse af grundtilstandsenergien og den næstlaveste energiegenværdi ved at benytte variationsprincippet med prøvefunktioner af

formen

$$\psi_\pm = N_\pm(e^{-(z-z_0)^2/2a^2} \pm e^{-(z+z_0)^2/2a^2}), \tag{8.63}$$

hvor $N_\pm$ er en reel normeringskonstant. Ifølge variationsprincippet er $\langle\psi_+|H\psi_+\rangle$ en øvre grænse på grundtilstandsenergien. Tilsvarende er $\langle\psi_-|H\psi_-\rangle$ en øvre grænse på den laveste energiværdi hørende til de ulige egentilstande. Forskellen ΔE_1 mellem disse to energier er derfor med tilnærmelse givet ved

$$\Delta E_1 = \langle\psi_-|H\psi_-\rangle - \langle\psi_+|H\psi_+\rangle. \tag{8.64}$$

Normeringsbetingelsen på $\psi_\pm$ er

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz\psi_\pm^2 = 1. \tag{8.65}$$

Heraf følger, at konstanten $N_\pm$ er givet ved

$$N_\pm^{-2} = 2a\sqrt{\pi}(1 \pm e^{-z_0^2/a^2}). \tag{8.66}$$

Vi kan nu bestemme $\langle\psi_\pm|T\psi_\pm\rangle$ og $\langle\psi_\pm|V\psi_\pm\rangle$, idet vi udnytter, at

$$\frac{d^2\psi_\pm}{dz^2} = N_\pm[((z-z_0)^2a^{-4} - a^{-2})e^{-(z-z_0)^2/2a^2} \pm ((z+z_0)^2a^{-4} - a^{-2})e^{-(z+z_0)^2/2a^2}]. \tag{8.67}$$

Ved udregningen af $\langle\psi_\pm|T\psi_\pm\rangle$ får man brug for de bestemte integraler

$$\int_{-\infty}^{\infty} dze^{-z^2} = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dzz^2e^{-z^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dzz^4e^{-z^2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}. \tag{8.68}$$

Middelværdien af den kinetiske energi er herefter

$$\langle\psi_\pm|T\psi_\pm\rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega\frac{1 \mp (\frac{2}{\epsilon} - 1)e^{-1/\epsilon}}{1 \pm e^{-1/\epsilon}}. \tag{8.69}$$

For den potentielle energi fås tilsvarende

$$\langle\psi_\pm|V\psi_\pm\rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega\frac{(1 + \frac{3\epsilon}{8}) \pm (\frac{1}{2\epsilon} - \frac{1}{2} + \frac{3\epsilon}{8})e^{-1/\epsilon}}{1 \pm e^{-1/\epsilon}}. \tag{8.70}$$

Idet vi behandler såvel $\exp(-1/\epsilon)$ som ϵ som små størrelser, fås at

$$\langle\psi_\pm|H\psi_\pm\rangle \simeq \frac{1}{2}\hbar\omega(1 \mp \frac{3}{4\epsilon}e^{-1/\epsilon}) \tag{8.71}$$

og dermed

$$\Delta E_1 = \hbar\omega\frac{3}{4\epsilon}e^{-1/\epsilon}. \tag{8.72}$$

Størrelsen ΔE_1 angiver altså opsplitningen af det udartede oscillatorniveau $\hbar\omega/2$, der svarer til, at de to potentialminima er uendeligt langt fra hinanden.

På ganske tilsvarende måde kan man for oscillatorniveauet $3\hbar\omega/2$ finde energiforskellen ΔE_2 givet ved

$$\Delta E_2 = \langle\phi_-|H\phi_-\rangle - \langle\phi_+|H\phi_+\rangle \tag{8.73}$$

ved brug af funktionerne

$$\phi_\pm = C_\pm((z-z_0)e^{-(z-z_0)^2/2a^2} \pm (z+z_0)e^{-(z+z_0)^2/2a^2}). \tag{8.74}$$

Resultatet svarende til (8.72) bliver da

$$\Delta E_2 = \hbar\omega \frac{3}{2\epsilon^2} e^{-1/\epsilon}. \tag{8.75}$$

Det understreges, at udtrykkene (8.72) og (8.75) ikke er eksakte, da de er fundet ved at beregne middelværdien af H i tilstande, der ikke er egentilstande for Hamiltonoperatoren. Sålænge ϵ er lille, kan vi imidlertid regne med, at udtrykkene (8.72) og (8.75) er gode tilnærmelser til opsplitningen af de to oscillatorniveauer $\hbar\omega/2$ og $3\hbar\omega/2$.

Vi kan nu sammenligne de beregnede energiforskelle med eksperimenterne. Vibrationsbølgetallet $\bar{\nu} = \omega/2\pi c$ er målt til at være 950 cm^{-1}, mens de målte værdier af inversionsbølgetallene $\bar{\nu}_1 = \Delta E_1/2\pi\hbar c$ og $\bar{\nu}_2 = \Delta E_2/2\pi\hbar c$ er henholdsvis 0,794 cm^{-1} og 36 cm^{-1}. Ved at indsætte de eksperimentelt bestemte værdier af $\hbar\omega$ og ΔE_1 i (8.72) fås, at $\epsilon = 0,111$. Den således bestemte værdi af ϵ kan nu indsættes i udtrykket

$$\frac{\Delta E_1}{\Delta E_2} = \frac{\epsilon}{2} \tag{8.76}$$

med resultatet 0,056. Til sammenligning tjener, at det målte forhold er 0,794/36 eller 0,022. Anvender vi nu den fundne værdi $\epsilon = 0,111$ til at finde V_0 ud fra $\hbar\omega$, får vi ifølge (8.62) resultatet $V_0 = 0,1326$ eV. Herefter kan vi benytte (8.61) til at bestemme z_0 ud fra de opgivne parametre og den reducerede masse μ, der kan antages at være lig med $3m_H m_N/(m_N + 3m_H) = 2,49$u, hvor $m_H(m_N)$ betegner massen af et hydrogenatom (kvælstofatom). Man finder som resultat, at z_0 er 0,36 Å, mens den eksperimentelle værdi er 0,38 Å.

Vi har benyttet den målte inversionsfrekvens på 23,8 GHz (svarende til 0,794 cm^{-1}) og vibrationsfrekvensen $\hbar\omega$ til at fastlægge ϵ og V_0. Når vi med disse parametre forsøger at beregne andre målelige størrelser som inversionsfrekvensen hørende til det næstlaveste niveau, får vi imidlertid ikke kvantitativ overensstemmelse, mens resultatet for z_0 er i nogenlunde overensstemmelse med molekylets kendte struktur. For at forbedre modellen kan man vælge et potential, der indeholder flere justerbare parametre, der bestemmes ved sammenligning med eksperimentelle resultater.

Hvis vi i stedet betragter molekylet NT_3, hvor T betegner tritium, må vi vente, at inversionsfrekvensen bliver væsentligt reduceret på grund af forøgelsen af den reducerede masse, der i dette tilfælde er $\mu_T = 5,50$ u. Hvis parametrene V_0 og x_0 antages uændrede, bliver $\epsilon_T = 0,0747$ og den deraf beregnede værdi af ΔE_1 for NT_3 er derfor $\exp(1/0,0747)/\exp(1/0,111) = 81$ gange så lille som for NH_3. Eksperimentelt finder man, at inversionsfrekvensen for NT_3 er 306 MHz eller 78 gange så lille som for NH_3.

I stedet for at benytte en Hamiltonoperator for ammoniakmolekylet med en potentiel energi som (8.56), der ikke kan beskrive molekylet kvantitativt, vil vi i det følgende beskrive inversionen ved at approksimere Hamiltonoperatoren med en 2 × 2 matrix. Som basis benytter vi tilstandene $|\uparrow\rangle$ og $|\downarrow\rangle$, der svarer til, at kvælstofatomet befinder sig henholdsvis over og under brintatomernes plan. Tilstandsvektoren $|\psi\rangle$ kan under denne forudsætning udtrykkes ved superpositionen

$$|\psi\rangle = c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle. \tag{8.77}$$

Vi indsætter nu $|\psi\rangle$ i den tidsafhængige Schrödingerligning

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle. \tag{8.78}$$

Ved som sædvanlig at tage det indre produkt af denne ligning med basisvektorerne $|\uparrow\rangle$ og $|\downarrow\rangle$ fås de to koblede ligninger

$$i\hbar\dot{c}_\uparrow = \langle\uparrow|H|\uparrow\rangle c_\uparrow + \langle\uparrow|H|\downarrow\rangle c_\downarrow \tag{8.79}$$

og

$$i\hbar\dot{c}_\downarrow = \langle\downarrow|H|\uparrow\rangle c_\uparrow + \langle\downarrow|H|\downarrow\rangle c_\downarrow. \tag{8.80}$$

Vi vil lede efter løsninger svarende til stationære tilstande,

$$c_\uparrow = c_\uparrow^0 e^{-iEt/\hbar}, \quad c_\downarrow = c_\downarrow^0 e^{-iEt/\hbar}. \tag{8.81}$$

Vi antager nu, at ammoniakmolekylet befinder sig i et tidsuafhængigt elektrisk felt $\mathcal{E}$, der er rettet langs z-aksen. Det forudsættes, at feltet er tilstrækkeligt svagt til, at vi kan negligere dets indflydelse på de ikke-diagonale matrixelementer. De diagonale matrixelementer indeholder et led, der er lineært i $\mathcal{E}$, hidrørende fra det elektriske dipolmoment i tilstandene $|\uparrow\rangle$ og $|\downarrow\rangle$. Matrixelementerne af H bliver derved givet ved

$$\langle\uparrow|H|\uparrow\rangle = a + p\mathcal{E}, \quad \langle\downarrow|H|\downarrow\rangle = a - p\mathcal{E}, \quad \langle\uparrow|H|\downarrow\rangle = b, \quad \langle\downarrow|H|\uparrow\rangle = b\,. \tag{8.82}$$

Her er a, b og p positive konstanter. Når $b = 0$, udtrykker denne matrix, at energien af tilstanden $|\uparrow\rangle$ øges med den elektriske feltstyrke, mens energien af tilstanden $|\downarrow\rangle$ mindskes, svarende til, at det elektriske dipolmoment i de to tilstande er lige stort med modsat fortegn.

Ved at indsætte (8.81) i ligningerne (8.79-8.80) og forlange, at det fremkomne homogene ligningssystem har egentlige løsninger, finder man, at determinanten til matricen

$$\begin{pmatrix} a + p\mathcal{E} - E & b \\ b & a - p\mathcal{E} - E \end{pmatrix} \tag{8.83}$$

skal være nul. Løsningerne til den resulterende andengradsligning er

$$E = a \pm \sqrt{p^2\mathcal{E}^2 + b^2}. \tag{8.84}$$

Lad os nu undersøge betydningen af (8.84). Hvis $\mathcal{E}$ er nul, er energiforskellen $2b$ identisk med ΔE_1, der er indført ovenfor. Bemærk, at matrixelementet b blot er en konstant, som vi kan tilpasse den beregnede størrelse af ΔE_1. Når $\mathcal{E} \neq 0$, viser (8.84), at det elektriske felt øger den opsplitning, der skyldes tunneleffekten. Hvis $\mathcal{E}$ er meget stor i forhold til b/p, er energiopsplitningen givet ved $\pm p\mathcal{E}$, svarende til energien af to modsat rettede dipoler.

Vi ser af (8.84), at et stationært elektrisk felt giver mulighed for at separere molekyler i den øverste energi-egentilstand fra molekyler i den nederste energi-egentilstand: når molekylerne bevæger sig i et område af rummet, hvor $\nabla(\mathcal{E}^2)$ er forskellig fra nul, vil kræfterne på molekyler i de to tilstande være modsat rettede.

Dette princip udnyttes i maseren til at skabe omvendt befolkning af de to tilstande. Lad os betegne energien af den højeste (laveste) energi-egentilstand med $E_2(E_1)$. Hvis vi helt ser bort fra det statiske elektriske felt, har vi altså

$$E_2 = a + b, \quad E_1 = a - b. \tag{8.85}$$

Nu antager vi, at molekylerne påvirkes af et oscillerende elektrisk felt i z-aksens retning

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \tag{8.86}$$

og udvikler tilstanden på de to tilstandsvektorer $|i\rangle$, der er egentilstande for energioperatoren uden oscillerende elektrisk felt,

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1,2} a_i(t)|i\rangle e^{-iE_i/\hbar} \tag{8.87}$$

med resultatet

$$i\hbar\frac{da_k(t)}{dt} = \sum_{l=1,2} \langle k|H'|l\rangle e^{i\omega_{kl}t} a_l, \tag{8.88}$$

hvor $\omega_{kl} = (E_k - E_l)/\hbar$ (jvf. ligning (5.51) i afsnit 5.4). Vi antager, at matrixelementet $\langle k|H'|l\rangle$ kun er forskelligt fra nul ($= p\mathcal{E}_0$), når $(l,k) = (1,2)$ eller (2,1), mens diagonalelementerne er nul. Herved bliver ligningerne (8.88) givet ved

$$i\hbar\frac{da_1(t)}{dt} = p\mathcal{E}_0(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t})a_2 \tag{8.89}$$

og

$$i\hbar\frac{da_2(t)}{dt} = p\mathcal{E}_0(e^{i(\omega+\omega_0)t} + e^{-i(\omega-\omega_0)t})a_1, \tag{8.90}$$

hvor vi har indført forkortelsen $\omega_0 = \omega_2 - \omega_1$.

I nærheden af resonans, for $\omega \simeq \omega_0$, kan vi se bort fra de hurtigt varierende led, der er proportionale med $\exp(\pm i(\omega + \omega_0)t)$. Herved fås de simplere ligninger

$$i\hbar\frac{da_1(t)}{dt} = p\mathcal{E}_0 e^{i(\omega-\omega_0)t} a_2 \tag{8.91}$$

og

$$i\hbar\frac{da_2(t)}{dt} = p\mathcal{E}_0 e^{-i(\omega-\omega_0)t} a_1. \tag{8.92}$$

Ved at løse ligning (8.91) for a_2, differentiere a_2 med hensyn til tiden og indsætte i (8.92) fås da

$$a_1 + \frac{\hbar^2}{p^2\mathcal{E}_0^2}(-i\dot{a}_1(\omega - \omega_0) + \ddot{a}_1) = 0. \tag{8.93}$$

Når resonansbetingelsen $\omega = \omega_0$ er opfyldt, fremkommer den simple ligning

$$\ddot{a}_1 + \omega_p^2 a_1 = 0 \tag{8.94}$$

med tilhørende frekvens

$$\omega_p = \frac{p\mathcal{E}_0}{\hbar}. \tag{8.95}$$

Den generelle løsning til (8.94) er

$$a_1 = \alpha \cos \omega_p t + \beta \sin \omega_p t, \tag{8.96}$$

hvor α og β er konstanter. Den tilhørende løsning for a_2 er

$$a_2 = i\beta \cos \omega_p t - i\alpha \sin \omega_p t. \tag{8.97}$$

Antager vi, at $a_1 = 0$ og $a_2 = 1$ til tiden $t = 0$, svarende til at $\alpha = 0$ og $\beta = -i$, vil tilstanden 2 affolkes i løbet af en kvart svingningstid $\pi/2\omega_p$, og energien overføres til det elektromagnetiske felt.

Lad os til sidst se på betydningen af disse resultater for den kemiske binding, idet vi tager H_2^+-ionen og H_2-molekylet som eksempel. Man kalder en tilstand som ψ_+ for en 'bonding'-tilstand, mens ψ_- kaldes for en 'antibonding'-tilstand (den kemiske binding hedder på engelsk 'the chemical bond'). Betydningen af de to typer linearkombinationer kan illustreres for H_2^+-ionen ved at finde middelværdien af energien i tilstandene

$$\psi_\pm(\vec{r}) = C_\pm(u_0(r) \pm u_0(|\vec{r} - \vec{R}|)), \tag{8.98}$$

hvor $\vec{R}$ er stedvektoren for den ene proton i et koordinatsystem, hvori den anden proton er placeret i origo, mens $u_0(r) = \exp(-r/a_0)/\sqrt{\pi a_0^3}$ er grundtilstandsbølgefunktionen for hydrogenatomet. Integralerne udregnes som i eksempel 8 ved at benytte polære koordinater, idet $\vec{R}$ vælges som polarakse. Integraler af typen

$$\int_{-1}^{1} dx e^{-\sqrt{\alpha - \beta x}},$$

hvor x er cosinus til vinkelen mellem $\vec{r}$ og $\vec{R}$, mens $\alpha = (R^2 + r^2)/a_0^2$ og $\beta = 2Rr/a_0^2$, udregnes ved at indføre $y = \sqrt{\alpha - \beta x}$ som ny variabel. Da $\sqrt{\alpha - \beta} = |R - r|/a_0$ er det nødvendigt at dele integrationen over r op i områderne $r < R$ og $r > R$ (smlgn. eksempel 8). Man finder, at middelværdien af elektronens kinetiske energi i atomare enheder ($e_0 = m = \hbar = 1$) er givet ved

$$\langle \psi_\pm | T \psi_\pm \rangle = \frac{1}{2} \mp \frac{R^2 e^{-R}}{3(1 \pm S)}, \tag{8.99}$$

hvor

$$S = e^{-R}(1 + R + \frac{R^2}{3}), \tag{8.100}$$

mens middelværdien af elektronens potentielle energi er

$$\langle \psi_\pm | V \psi_\pm \rangle = -1 + (1 \pm S)^{-1}[\pm(\frac{R^2}{3} - R - 1)e^{-R} - \frac{1}{R}(1 - e^{-2R}(1 + R))] \tag{8.101}$$

Den totale energi findes ved at lægge bidraget $1/R$ fra protonernes indbyrdes frastødning til summen af (8.99) og (8.101). Det ses af (8.99), at den kinetiske energi er reduceret i 'bonding'-tilstanden ψ_+ i forhold til værdien $1/2$ svarende til $R \to \infty$. Den totale energi i 'bonding'-tilstanden ψ_+ har minimum for $R = 1,32$ Å med en tilhørende bindingsenergi på 1,77 eV (den eksakte værdi er 2,79 eV).

Bindingsenergien af brintmolekylet kan nu bestemmes med tilnærmelse ved at lade hver af de to elektroner besætte 'bonding'-tilstanden ψ_+, idet spinfunktionen er en singlet, således at den totale bølgefunktion

er antisymmetrisk over for ombytning af de to elektroner. Når denne prøvefunktion benyttes til at bestemme bindingsenergien for brintmolekylet, fås 2,68 eV med den tilhørende ligevægtsafstand 0,8 Å. Den eksperimentelt fundne bindingsenergi er 4,75 eV og ligevægtsafstanden 0,74 Å. Den enkle 'bonding-antibonding' beskrivelse, som vi her har skitseret, giver således en kvalitativ forståelse af den kemiske binding.

8.3 Translation

I denne kortfattede oversigt over nogle af kvanteteoriens vigtige symmetrioperationer er vi nu kommet til translation og skal i dette afsnit omtale forskydninger i både rum og tid.

I matematisk forstand udgør symmetrioperationer en gruppe. Hermed menes en samling elementer $a, b, c, \cdots$, for hvilke der foreligger en kombinationsregel (symboliseret ved ab, etc.). For at elementerne udgør en gruppe, skal følgende fire betingelser være opfyldt: 1) ethvert resultat af at kombinere to elementer er et element i gruppen, 2) den associative lov gælder, så at $(ab)c = a(bc)$ for alle a, b og c, 3) der eksisterer et enhedselement e, så $ea = a$ for ethvert a samt 4) til ethvert element a svarer et inverst a^{-1}, så at $a^{-1}a = 1$. Gruppen af translationer i rummet er en kontinuert gruppe i den forstand, at elementerne kan mærkes med kontinuert varierende parametre. Translationsgruppen er tillige kommutativ eller, som man også siger, abelsk. Hermed menes, at $ab = ba$ for ethvert par af elementer a, b. Ikke alle grupper er abelske. I et følgende afsnit skal vi diskutere rotationer, der udgør en ikke-abelsk gruppe. Et andet eksempel på en abelsk gruppe er gauge-transformationer (jvf. kapitel 6), som vi også skal diskutere i det følgende.

For at indføre en unitær operator hørende til translation betragter vi en forskydning i en bestemt retning, f. eks. x-aksens. Operatoren $\hat{T}_{x_0}$ er da defineret ved

$$\hat{T}_{x_0} f(x) = f(x - x_0), \tag{8.102}$$

hvor f er en vilkårlig funktion. Ved at rækkeudvikle højre side af (8.102) fås

$$\hat{T}_{x_0} f(x) = f(x) - x_0 \frac{df}{dx} + \frac{1}{2} x_0^2 \frac{d^2 f}{dx^2} + \cdots. \tag{8.103}$$

Højre side af (8.103) kan skrives på formen

$$e^{-x_0 d/dx} f(x), \tag{8.104}$$

der viser, at $\hat{T}$ kan udtrykkes ved impulsoperatoren som følger

$$\hat{T}_{x_0} = e^{-ix_0\hat{p}_x/\hbar}. \tag{8.105}$$

Ved at udnytte, at $\hat{p}_x$ er en hermitesk operator, kan unitariteten af operatoren (8.105) direkte eftervises.

Betragter vi en infinitesimal forskydning på ϵ, er den tilhørende operator altså

$$\hat{T}_\epsilon = 1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{p}_x. \tag{8.106}$$

Man kalder som følge af (8.106) impulsoperatoren for en generator for infinitesimale rumlige forskydninger. Hvis en partikel bevæger sig frit, uden påvirkning af ydre kræfter, vil Hamiltonoperatoren være ombyttelig med forskydningsoperatoren såvel som med generatoren af de infinitesimale rumlige forskydninger. Dette modsvares i den klassiske mekanik af, at impulsen er en bevægelseskonstant for et sådant system.

Forskydninger i tid kan behandles på tilsvarende måde. For at indføre en operator hørende til en infinitesimal forskydning i tiden definerer vi i analogi med (8.102) en operator $\hat{U}_{t_0}$ ved

$$\hat{U}_{t_0} f(t) = f(t - t_0). \tag{8.107}$$

For en infinitesimal forskydning er denne ligning

$$\hat{U}_{t_0} f(t) = f(t) - t_0\frac{\partial f}{\partial t}. \tag{8.108}$$

Hvis f repræsenterer en fysisk tilstand, der adlyder Schrödingerligningen, kan operatoren i (8.108) åbenbart udtrykkes ved Hamiltonoperatoren som

$$\hat{U}_{t_0} = 1 + \frac{it_0\hat{H}}{\hbar}. \tag{8.109}$$

Forudsat at $\hat{H}$ er uafhængig af tiden, bliver operatoren hørende til en endelig tidsforskydning t_0 givet ved

$$\hat{U}_{t_0} = e^{it_0\hat{H}/\hbar}. \tag{8.110}$$

I dette tilfælde er operatorerne $\hat{H}$ og $\hat{U}$ altså indbyrdes ombyttelige. Hvis systemets Hamiltonoperator er uafhængig af tiden, vil en tilstand, der fremkommer ved en tidsforskydning på t_0, også være en mulig tilstand, idet man nemt viser, at den forskudte tilstand tilfredsstiller Schrödingerligningen på grund af ombytteligheden mellem $\hat{U}$ og $\hat{H}$.

8.4 Gauge-transformation

I kvanteteorien indføres magnetfelter, som vi har set, ved hjælp af vektorpotentialer, idet man tager udgangspunkt i den klassiske Hamiltonfunktion. Vektorpotentialet $\vec{A}$ bestemmer den magnetiske induktion $\vec{B}$ ifølge

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \tag{8.111}$$

men som tidligere omtalt er dette ikke tilstrækkeligt til at fastlægge vektorpotentialet éntydigt ud fra et givet magnetfelt. Transformationen

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi, \tag{8.112}$$

hvor χ er en vilkårlig funktion, ændrer ikke $\vec{B}$. Vi har allerede diskuteret to forskellige valg af vektorpotential eller - som man siger - gauge, nemlig (6.9) og (6.10), hvor forskellen i vektorpotential svarer til funktionen χ i (8.112) er givet ved $\chi = -Bxy/2$. De to valg af vektorpotential giver samme energispektrum, men som nævnt i kapitel 6 ser de resulterende bølgefunktioner forskellige ud. Ved valg af Landau-gauge (6.9) fremkommer bølgefunktioner, hvis absolutværdi er konstant langs en ret linje vinkelret på magnetfeltet, mens den symmetriske gauge resulterer i bølgefunktioner, hvis absolutværdi minder mere om den klassiske bevægelse, idet den er konstant på en cirkel i planen vinkelret på magnetfeltet. Udartningsgraden for et bestemt energiniveau - såvel som dettes værdi - er imidlertid uafhængig af valget af gauge, jvf. eksempel 6 i kapitel 6.

Ved at ledsage gauge-transformationen (8.68) af en tilsvarende transformation af bølgefunktionen kan vi opnå, at Schrödingerligningen (3.22) bliver uændret i form under en sådan transformation. For en elektron med ladning $-e$ optræder $\hat{\vec{p}}$, sammen med vektorpotentialet i kombinationen

$$\hat{\vec{p}} + e\vec{A}, \tag{8.113}$$

jvf. (6.19). En ændring af vektorpotentialet svarende til (8.112) vil derfor blive opvejet af transformationen

$$\psi' = \psi e^{-ie\chi/\hbar}, \tag{8.114}$$

således at egenværdiligningen for den transformerede Hamiltonoperator

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}')^2 \tag{8.115}$$

er

$$\hat{H}'\psi' = E\psi'. \tag{8.116}$$

Dette eftervises ved at benytte, at $\hat{\vec{p}}$ er givet ved $\hbar\nabla/i$, således at

$$(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}')\psi' = e^{-ie\chi/\hbar}(\hat{\vec{p}} + e\vec{A})\psi. \tag{8.117}$$

Gruppen af gauge-transformationer er tydeligvis kommutativ.[3]

8.5 Rotation

Det sidste eksempel på symmetritransformationer, vi skal diskutere, adskiller sig fra de forudgående ved, at symmetrigruppens elementer ikke udgør en kommutativ gruppe. Derfor bliver den matematiske beskrivelse af gruppen - herunder repræsentationen af gruppeelementerne ved matricer, der giver anledning til at indføre begrebet irreducibel repræsentation[4] - mere kompliceret, men til gengæld mere indholdsrig. For drejningers vedkommende skal vi kun beskæftige os med det kontinuerte tilfælde, selv om symmetritransformationer svarende til diskrete drejninger har mange anvendelser i de faste stoffers fysik.

Det er nemt at overbevise sig selv om, at ikke alle drejninger er indbyrdes ombyttelige ved f. eks. at sammensætte drejninger om på hinanden vinkelrette akser i forskellig rækkefølge. Denne ikke-kommutativitet modsvares af manglen på ombyttelighed mellem generatorerne for de infinitesimale rumlige drejninger, opfattet som kvantemekaniske operatorer. Disse er nemlig, som vi skal se i det følgende, givet ved komposanterne af impulsmomentoperatoren $\hat{\vec{L}}$.

En drejning i rummet frembringes ved transformationen

$$\vec{r}' = \overleftrightarrow{R}\,\vec{r}. \tag{8.118}$$

Her angiver $\overleftrightarrow{R}$ en 3×3 matrix. For en drejning på vinklen ϕ om z-aksen er drejningsmatricen

[3]Generaliserede gauge-transformationer, der ikke er kommutative, spiller en vigtig rolle i teorien for svage og stærke vekselvirkninger.

[4]Teorien for de irreducible repræsentationer gør det f. eks. muligt at finde - uden at løse Schrödingerligningen - hvorledes energiniveauerne hørende til et kuglesymmetrisk potential i et atom spalter op, når atomet er anbragt i et potential med kubisk symmetri.

givet ved

$$\overleftrightarrow{R}: \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8.119}$$

Drejningsmatricerne opfylder alle de krav, vi har stillet ovenfor til elementerne i en gruppe, idet kombinationsreglen er matrixmultiplikation, der opfylder den associative lov, enhedselementet er enhedsmatricen, mens det inverse element $\overleftrightarrow{R}^{-1}$ i det ovenstående eksempel svarer til en drejning på $-\phi$ om z-aksen. En vilkårlig drejning kan angives ved tre kontinuert varierende parametre, der specificerer retningen af den enhedsvektor, om hvilken drejningen sker, og størrelsen af den pågældende drejningsvinkel. I teorien for symmetrigrupper betegnes denne gruppe med $O(3)$, der således udgøres af mængden af alle 3×3 reelle matricer, hvis rækker og søjler er orthonormale, og hvis determinant er 1.

Analogt med (8.102) definerer vi den unitære operator, der hører til symmetritransformationen (8.118), ved

$$\hat{U}_{\overleftrightarrow{R}} f(\vec{r}) = f(\overleftrightarrow{R}^{-1}\,\vec{r}). \tag{8.120}$$

For en infinitesimal drejning om z-aksen på vinklen ϕ er

$$\overleftrightarrow{R}: \begin{pmatrix} 1 & -\phi & 0 \\ \phi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8.121}$$

Betegner vi vektoren $(0, 0, \phi)$ som $\vec{\phi}$, kan vi skrive

$$\overleftrightarrow{R}^{-1}\,\vec{r} = \vec{r} - \vec{\phi} \times \vec{r} \tag{8.122}$$

til laveste orden i ϕ, og dermed har vi opnået at skrive resultatet af den infinitesimale drejning på en form, der gælder for en vilkårlig drejningsretning. Ved at rækkeudvikle højresiden af (8.120) fås da

$$\hat{U}_{\overleftrightarrow{R}} f(\vec{r}) = f(\vec{r}) - \frac{i}{\hbar}\vec{\phi} \times \vec{r} \cdot \hat{\vec{p}} f(\vec{r}), \tag{8.123}$$

der viser, at generatorerne for de infinitesimale drejninger er komposanterne af impulsmomentoperatoren $\hat{\vec{L}}$, idet

$$\hat{U}_{\overleftrightarrow{R}} = 1 - \frac{i}{\hbar}\vec{\phi} \cdot \hat{\vec{L}}. \tag{8.124}$$

Det understreges, at (8.124) kun gælder for en infinitesimal drejning. En drejning hørende til en vilkårlig drejningsmatrix $\overleftrightarrow{R}$ kan ikke skrives på denne form.

På samme måde som $\hat{\vec{p}}$ er generator for infinitesimale rumlige forskydninger, er $\hat{\vec{L}}$ generator for infinitesimale rumlige drejninger. Forskellen mellem de to tilfælde er, at forskydninger langs forskellige rumlige akser - ligesom impulsoperatorens komposanter - er indbyrdes ombyttelige, mens drejninger om forskellige retninger - ligesom impulsmomentoperatorens komposanter - ikke er indbyrdes ombyttelige. For et rotationsinvariant system kommuterer $\hat{U}$ i (8.124) med Hamiltonoperatoren, svarende til at generatorerne $\hat{\vec{L}}$ hver for sig er ombyttelige med systemets Hamiltonoperator.

8.6 Opgaver

OPGAVE 8.1

I denne opgave skal vi benytte variationsmetoden til at bestemme en øvre grænse for grundtilstandsenergien E_0 hørende til bevægelsen i potentialet, der er givet i opgave 1.11. Det kan gøre beregningen mere overskuelig, hvis man bruger prøvefunktioner, der ikke er normerede. I så fald er den øvre grænse på E_0 givet ved

$$E_0 \leq \frac{\int_0^\infty dz \psi^* H \psi}{\int_0^\infty dz \psi^* \psi}, \tag{8.125}$$

idet integrationen er udstrakt over det område $(0 < z < \infty)$, hvori bølgefunktionen $\psi = \psi(z)$ er forskellig fra nul.

a) Benyt prøvefunktionen

$$\psi = z e^{-bz}, \tag{8.126}$$

hvor b er en konstant, til at udregne en øvre grænse på E_0 som funktion af b. Find den værdi af b, der giver det bedste resultat, og bestem den tilhørende værdi af grundtilstandsenergien. Sammenlign med resultatet af at anvende dimensionsanalyse (opgave 1.11).

b) Vi ændrer nu prøvefunktionens udseende til

$$\psi = z e^{-cz^2}. \tag{8.127}$$

Find den bedste værdi af c og sammenlign den tilhørende værdi af grundtilstandsenergien med den under a) bestemte.

OPGAVE 8.2

To identiske partikler, hver med masse m, bevæger sig under indflydelse af den potentielle energi

$$V(x_1, x_2) = \frac{\alpha}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \frac{\beta}{2}(x_1 - x_2)^2. \tag{8.128}$$

Her er α og β positive konstanter, mens x_1 og x_2 angiver partiklernes positioner.

a) Udtryk Hamiltonoperatoren ved de variable $(x_1 + x_2)$ og $(x_1 - x_2)$. Vis, at Schrödingerligningen separerer i disse variable og find egenværdierne samt de tilhørende egenfunktioner for Hamiltonoperatoren.

b) Angiv egenfunktionernes symmetri over for ombytning af de to partikler. Hvilke tilstande er mulige, hvis partiklerne er identiske spin-0 partikler?

OPGAVE 8.3

En partikel med masse m bevæger sig i to dimensioner i et potential givet ved

$$V(x,y) = \frac{1}{2}K(x^2+y^2) \quad \text{for} \quad x>0, y>0; \quad V(x,y) = \infty \text{ ellers}, \tag{8.129}$$

hvor K er en positiv konstant. Find systemets grundtilstandsenergi.

OPGAVE 8.4

En partikel med masse m bevæger sig i et potential givet ved

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \quad \text{for} \quad x>0, \quad V(x) = \infty \quad \text{for} \quad x<0, \tag{8.130}$$

hvor K er en positiv konstant. Benyt prøvefunktionerne fra opgave 8.1 til at finde tilnærmede værdier for grundtilstandsenergien og sammenlign med det kendte eksakte resultat.

OPGAVE 8.5

Benyt (8.17) til at finde, hvorledes magnetfeltet i opgave 6.1 påvirker oscillatorens laveste og næstlaveste energiniveau, når magnetfeltet opfattes som en perturbation. Sammenlign resultatet med svaret på spørgsmål c) i opgave 6.1.

OPGAVE 8.6

Benyt Schrödingerligningen

$$(H_0+\lambda H')(\psi^{(0)}+\lambda\psi^{(1)}+\lambda^2\psi^{(2)}+\cdots) = (E^{(0)}+\lambda E^{(1)}+\lambda^2 E^{(2)}+\cdots)(\psi^{(0)}+\lambda\psi^{(1)}+\lambda^2\psi^{(2)}+\cdots). \tag{8.131}$$

til at vise, at energikorrektionen $E_n^{(2)}$ af et ikke-udartet niveau til anden orden i perturbationen er givet ved

$$E_n^{(2)} = \sum_{n'\neq n} \frac{|\langle n|H'|n'\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}, \tag{8.132}$$

hvor E_n^0 er den uperturberede energi hørende til den uperturberede tilstand $\psi^{(0)}$. Benyt resultatet (8.132) til at vise, at et elektrisk felt med feltstyrke E mindsker grundtilstandsenergien af brintatomet og vurder størrelsesordenen af effekten for $E = 1$ kV/cm.

9 Fermioner og bosoner

I faste, krystallinske stoffer er atomerne regelmæssigt ordnet i et gitter. Afstanden mellem to naboatomer er af størrelsesordenen 10^{-10} m, svarende til den karakteristiske længde (1.30). De enkelte atomer kan udføre svingninger om deres ligevægtspositioner. I første tilnærmelse kan atomernes svingninger repræsenteres ved et sæt af koblede harmoniske oscillatorer. Vi skal i dette kapitel se, hvorledes vi kan anvende kvanteteorien for en enkelt harmonisk oscillator til at forklare størrelsen og temperaturafhængigheden af faste stoffers varmefylde.

Ud over de gitteratomer, der under svingningerne befinder sig nær positionen i det ideale gitter, indeholder faste stoffer som metaller og halvledere også frit bevægelige elektroner. Et metal som aluminium består af et gitter af positivt ladede ioner og en gas af frit bevægelige ledningselektroner. Det er disse ledningselektroner, der transporterer den elektriske strøm igennem metallet, når det indgår i et elektrisk kredsløb. Hvis vi ser bort fra gitteratomernes svingninger om deres ligevægtsposition, giver de positive ioner anledning til et periodisk potential. Man kunne tro, at den elektriske strøm blev bremset af, at elektronerne under deres bevægelse blev afbøjet af sammenstødene med de positivt ladede ioner. Dette er imidlertid ikke tilfældet. Som vi skal se i dette kapitel, er de stationære tilstande for en elektron, der bevæger sig i et periodisk potential, udstrakt over hele krystallen og ligner på denne måde kvantetilstandene for en fri elektron i et konstant potential (afsnit 4.3). Den elektriske modstand skyldes afvigelser fra det periodiske potential hidrørende fra gitteratomernes svingninger, fremmedatomer, fejlsteder i krystallen eller lignende.

I dette kapitel vil vi først undersøge elektronernes bevægelse i faste stoffer, når gitteratomerne ligger stille, så elektronerne bevæger sig i et periodisk potential. På grund af den store forskel mellem et gitteratoms masse og massen af en elektron kan gitteret i første tilnærmelse betragtes som statisk, når det gælder om at finde energiegentilstandene for en elektrons bevægelse. I dette kapitel vil vi bestemme formen af disse egentilstande under udnyttelse af den særlige symmetri, der gælder for bevægelsen i et ordnet gitter. Derefter behandler vi gitteratomernes svingninger om deres ligevægtspositioner og viser, hvorledes disse kan opløses i normalsvingninger. De kvantiserede gittersvingninger kan beskrives som partikler, de såkaldte fononer, der ligesom lyskvanter (fotoner) er bosoner. På grund af git-

teratomernes svingninger om deres ligevægtsposition er der mulighed for overgange mellem de stationære tilstande for en elektron, der bevæger sig i det periodiske potential. Vi skal ikke gå nærmere ind på, hvorledes man bestemmer overgangssandsynligheden. Hovedsigtet med det følgende er at belyse årsagen til forskellen mellem metaller, halvledere og isolatorer, og i denne sammenhæng spiller gitteratomernes svingninger ingen væsentlig rolle.

I andre sammenhænge er det derimod ikke muligt at se bort fra gitteratomernes bevægelse. Hvis man ønsker at forklare temperaturafhængigheden af metallernes elektriske modstand eller forekomsten af superledning, er det afgørende at tage hensyn til gitteratomernes svingninger. Man kan udtrykke det på den måde, at elektroner og fononer ikke er uafhængige af hinanden. En elektron kan således udsende eller absorbere en fonon, fordi gitterets bevægelse giver anledning til afvigelser fra det strengt periodiske potential. Sådanne processer er ansvarlige for temperaturafhængigheden af metallernes elektriske modstand. Det er også muligt for to elektroner at vekselvirke ved, at den ene udsender en fonon, som absorberes af den anden. Denne vekselvirkning, der under bestemte betingelser er tiltrækkende, er årsagen til, at mange metaller bliver superledende ved lave temperaturer (kap. 10).

Som nævnt skal vi her i første omgang se bort fra gitterets bevægelse og udnytte den særlige symmetri, der karakteriserer bevægelse i et periodisk potential: invarians over for forskydninger på en gittervektor. Ud over denne symmetri er det afgørende at tage hensyn til, at elektroner er fermioner. Det er derfor nødvendigt at beskrive dem ved bølgefunktioner, der er antisymmetriske over for ombytning af to vilkårlige elektroner. Undertiden formuleres dette som et Pauliprincip: i en given kvantetilstand kan der kun anbringes én partikel. Det er værd at bemærke, at Pauliprincippet i denne formulering er baseret på en antagelse om, at elektronerne ikke vekselvirker indbyrdes. Kun da vil en Slater-determinant af typen (8.36) være egentilstand for Hamiltonoperatoren for elektronerne, så det har mening at tale om besætning af en given énpartikelkvantetilstand.

9.1 Fri elektrongas

Ledningselektronerne i et metal udgør en gas af bevægelige partikler. I den simplest tænkelige model beskriver man denne gas ved helt at se bort fra gitterionernes tilstedeværelse såvel

som fra vekselvirkningen mellem elektronerne indbyrdes. Det positivt ladede iongitter sørger for, at metallet som helhed er elektrisk neutralt. Man kan derfor i modellen forestille sig dette som en jævnt udsmurt baggrund af positiv ladning. I denne fri-elektron model er den potentielle energi af en elektron konstant overalt i metallets indre, en konstant, der uden indskrænkning kan vælges til nul. Hermed er vi i stand til at anvende resultaterne fra afsnit 4.3, hvor tilstandstætheden for en fri partikel i en kasse blev bestemt som funktion af energien. Egentilstandene er givet ved plane bølger, jvf. (4.54), med tilhørende bølgevektor $\vec{k}$ under brug af periodiske grænsebetingelser.

Når Pauliprincippet tages i brug ved opfyldning af de mulige energiegentilstande for en elektron, fremkommer grundtilstanden for elektronsystemet som helhed ved besætning af $\vec{k}$-tilstandene inden for en kugle i $\vec{k}$-rummet. Kuglens radius k_{F} er givet ved

$$N = 2\frac{4\pi}{3}k_{\mathrm{F}}^3\frac{V}{(2\pi)^3}, \tag{9.1}$$

hvor N er det samlede antal ledningselektroner, og V er metallets volumen. Faktoren 2 i (9.1) skyldes elektronens spin. De øvrige faktorer fremgår af diskussionen i afsnit 4.3. Idet $n = N/V$ er tætheden af elektroner, kan (9.1) også udtrykkes som

$$k_{\mathrm{F}} = (3\pi^2 n)^{1/3}, \tag{9.2}$$

der viser, at k_{F} alene afhænger af tætheden af fermioner. Man kalder k_{F} for Fermibølgetallet. Den tilhørende Fermiimpuls p_{F} er givet ved

$$p_{\mathrm{F}} = \hbar k_{\mathrm{F}}, \tag{9.3}$$

mens Fermienergien er

$$E_{\mathrm{F}} = \frac{\hbar^2 k_{\mathrm{F}}^2}{2m}, \tag{9.4}$$

idet m er elektronmassen. Fermienergien er altså den kinetiske energi af de metalelektroner, der i systemets grundtilstand besætter de mest energirige tilstande. I $\vec{k}$-rummet definerer $E = E_{\mathrm{F}}$ en flade, der adskiller de besatte fra de tomme tilstande. I den simple fri-elektron model er Fermifladen en kugleoverflade, men som vi skal se i dette kapitel, kan den antage andre former, når der tages hensyn til det periodiske potential. Endelig indføres Fermihastigheden v_{F} ved definitionen

$$v_{\mathrm{F}} = \frac{\hbar k_{\mathrm{F}}}{m}. \tag{9.5}$$

Grundtilstandsenergien E_0 for elektronsystemet som helhed kan nu findes ved at summere $\hbar^2k^2/2m$ over de besatte pladser. Ved på sædvanlig måde at omdanne summen over $\vec{k}$ til et integral over k, jvf. (4.55-56), fås

$$E_0 = \frac{V}{\pi^2}\int_0^{k_F} dk k^2 \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{3}{5}NE_F. \tag{9.6}$$

At grundtilstandsenergien per partikel er mindre end Fermienergien, nemlig $3E_F/5$, er ikke overraskende, da alle tilstandene inden for Fermifladen er besat. Hvis elektronerne bevæger sig i to snarere end i tre dimensioner - som det i praksis kan lade sig gøre på en overflade af flydende helium - fremkommer et lignende resultat med en anden numerisk konstant (opg. 9.1).

Bortset fra de numeriske konstanter følger udtrykkene for Fermienergien, Fermiimpulsen og Fermihastigheden alle af en dimensionsbetragtning. Sålænge vi antager, at kun $\hbar$, elektrontætheden n og elektronmassen m indgår i resultatet, viser den i kapitel 1 beskrevne dimensionsanalyse, at $\hbar^2n^{2/3}/m$ er den eneste energi, der kan dannes ud fra disse størrelser.

Ud fra metallernes elektrontæthed kan vi nu finde størrelsen af Fermibølgetallet k_F og den dertil knyttede energi, impuls og hastighed. For Al kan n bestemmes ved at antage, at det enkelte aluminiumatom i metallet afgiver tre elektroner til ledningselektronerne, i overensstemmelse med at atomets valens i kemiske forbindelser er tre. Ved at benytte aluminiums densitet og molmasse findes n til at være $1,8\cdot10^{29}\ \mathrm{m}^{-3}$. Det tilhørende Fermibølgetal er da

$$k_F = 1,8\cdot10^{10}\,\mathrm{m}^{-1}, \tag{9.7}$$

mens Fermihastigheden er

$$v_F = 2,0\cdot10^{6}\,\mathrm{m/s}. \tag{9.8}$$

Fermienergien er den kinetiske energi af en elektron med Fermibølgetallet k_F og ses at blive

$$E_F = 1,9\cdot10^{-18}\,\mathrm{J}. \tag{9.9}$$

Omsat til Fermitemperaturen defineret ved $T_F = E_F/k$ svarer (9.9) til $1,4\cdot10^5$ K. Størrelsen af Fermitemperaturen i forhold til stuetemperatur viser, at elektrongassen ikke kan beskrives som en klassisk gas, med mindre temperaturen er så høj, at metallet forlængst er smeltet eller fordampet. Dette forhold har vigtige konsekvenser f. eks. for elektronernes bidrag

til varmefylden, som er langt mindre - svarende til faktoren T/T_F - end man skulle vente ifølge den klassiske ligefordelingslov. Det er ikke vanskeligt at se, hvorfor varmekapaciteten af elektrongassen er så meget mindre end den klassiske værdi $3k/2$ per partikel. Når temperaturen er forskellig fra nul, øges elektronsystemets energi som følge af den termiske bevægelse. Pauliprincippet medfører imidlertid, at kun elektroner med energi nær E_F bliver løftet til højere tilstande på grund af temperaturbevægelsen. De elektroner, der befinder sig i tilstande med energi langt under Fermienergien, har ingen pladser til deres rådighed, idet alle nabotilstande inden for et energiinterval af størrelsen kT er fuldt besat. Antallet af termisk anslåede elektroner må derfor, når $T \ll T_F$, være givet omtrentligt ved NT/T_F, hvorfor de øger den samlede energi med ca. NkT^2/T_F. Af dette følger, at varmekapaciteten per elektron er af størrelsesordenen kT/T_F, altså langt mindre end resultatet $3k/2$ for partiklerne i en klassisk ideal gas.

Selv om vi med denne diskussion af en Fermigas har benyttet metallers ledningselektroner som eksempel, kan vi anvende ovenstående resultater på andre Fermigasser. F. eks. kan man ved hjælp af disse betragtninger forklare væsentlige træk af stjernernes udviklingshistorie. For de stjernetyper, der går under navnet hvide dværge, er balancen mellem den kinetiske energi af de frit bevægelige elektroner og stjernens gravitationsenergi en afgørende faktor. I sådanne stjerner er tætheden så stor, at atomernes elektroner er løsrevet fra kernerne og bevæger sig frit i forhold til disse. På grund af elektronernes lille masse er den kinetiske energi og dermed også trykket i stjernens indre domineret af elektronernes bidrag. Kernerne bidrager i denne tilnærmelse kun til gravitationsenergien.

Lad os først antage, at elektrongassens tæthed ikke er større, end at det ikke-relativistiske resultat (9.6) kan anvendes til at vurdere den kinetiske energi. Dermed bliver den kinetiske energis afhængighed af massen åbenbart givet ved $E_{\text{kin}} \propto N^{5/3}/V^{2/3} \propto M^{5/3}/R^2$. Her er R stjernens radius ($\propto V^{-1/3}$) og M stjernens masse, idet M udtrykt ved antallet N af frit bevægelige elektroner er $M = Nm'$, hvor m' er massen per elektron (typisk omkring to nukleonmasser). Gravitationsenergien er $E_{\text{grav}} \propto -M^2/R$ (sammenlign med energien af en ladet kugle!). I ligevægt må derfor gælde, at summen af E_{kin} og E_{grav} er mindst mulig, således at $M \propto R^{-3}$.

Hvis elektrontætheden er så stor, at det er nødvendigt at anvende det relativistiske udtryk

$E_k = \hbar ck$ i stedet for $E_k = \hbar^2 k^2/2m$ for den kinetiske energi af en elektron med impuls $\hbar k$, ser man, at (9.6) skal erstattes med $E_0 = 3NE_F/4$. Her er Fermienergien $E_F = \hbar ck_F$, mens k_F fortsat er givet ved (9.2). Det ses nu, at såvel den kinetiske energi som gravitationsenergien bliver omvendt proportional med R. Vi har under disse betingelser, at $E_{kin} \simeq \hbar c(M/m')^{4/3}/R$ og $E_{grav} \simeq -M^2/R$, således at der kun kan være ligevægt for en bestemt værdi M_c af massen M. På nær en konstant er M_c givet ved at $E_{kin} = |E_{grav}|$, svarende til $M = M_c = (\hbar c/G)^{3/2}/m'^2$, som omtalt i afsnit 1.5.5.

9.1.1 Lyd i metaller

Fri-elektron modellen for metaller blev indført af Sommerfeld i 1928. Den havde stor succes som basis for beskrivelsen af egenskaber som varmefylde eller elektrisk og termisk ledningsevne, og dens enkelhed gør, at den stadig er et nyttigt udgangspunkt i mange forskellige sammenhænge. I dette afsnit skal vi se et enkelt eksempel på modellens anvendelse. Vi vil benytte resultatet (9.6) for grundtilstandsenergien af den fri elektrongas til at bestemme lydhastigheden i metaller. I en vis forstand forlader vi hermed den antagelse, at gitterionerne blot udgør en baggrund af positiv ladning. Udbredelse af lyd indebærer jo oscillationer i metallets massetæthed, som er domineret af ionernes bidrag. Som vi skal se, kan vi ved hjælp af fri-elektron modellen bestemme den trykgradient, der påvirker ionernes bevægelse.

I det følgende skal vi undersøge en simpel, isotrop model af et metal, der gør det muligt at finde lydhastigheden på samme måde som i en gas.

Lydens hastighed i gasser findes ud fra kontinuitetsligningen

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0, \tag{9.10}$$

hvor ρ er massetætheden, og $\vec{j} = \rho \vec{v}$ er strømtætheden. Vi har indført et hastighedsfelt $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r}, t)$, der angiver den lokale drifthastighed. Ifølge Newtons 2. lov er den tidsafledede af $\vec{j}$ bestemt af trykgradienten ∇p,

$$\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} = -\nabla p. \tag{9.11}$$

Der er her set bort fra gnidningsprocesser, der fører til dæmpning af lyden, samt ulineære led.

Ved at tage den afledede af (9.10) med hensyn til tiden fås

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \nabla^2 p. \tag{9.12}$$

For at kunne bestemme lydhastigheden ud fra (9.12) må ændringer i trykket p knyttes til ændringer i massetætheden ρ. Lad os først antage, at lydudbredelsen foregår isotermt, så at vi kan benytte luftarternes tilstandsligning

$$p = \frac{\rho}{M} kT, \tag{9.13}$$

hvor M er massen af et luftmolekyle. Af (9.12-13) følger, at lydhastigheden s er givet ved

$$s^2 = (\partial p/\partial \rho)_T = \frac{kT}{M}. \tag{9.14}$$

I virkeligheden er lydudbredelsen (ved sædvanlige frekvenser) ikke isoterm, men adiabatisk. Dette medfører, at resultatet (9.14) for kvadratet på lydhastigheden skal ganges med forholdet C_p/C_V, der er forholdet mellem varmekapaciteten ved konstant tryk og ved konstant rumfang. Det resulterende udtryk for lydhastigheden, $s = \sqrt{C_p kT/C_V M}$, er i særdeles god overensstemmelse med de eksperimentelt bestemte lydhastigheder i gasser.

Vi vender nu tilbage til lydudbredelsen i metaller. I metaller er tilstandsligningen ikke givet ved (9.13). Sammenhængen mellem tryk og volumen er anderledes og involverer, som vi skal se, ikke temperaturen. Dette er ikke overraskende. Vi har jo allerede set, at varmekapaciteten af elektrongassen er langt mindre, end man skulle forvente ud fra den klassiske statistiske mekanik[1].

Ved de relativt lave frekvenser og lange bølgelængder, der kendetegner lyd, er det muligt at opfatte metallet som et kontinuum og gøre direkte brug af ligningerne (9.10-11), der resulterer i (9.12). Sammenhængen mellem tryk og volumen er imidlertid ikke givet ved (9.13). For at finde trykket som funktion af volumenet behøver vi blot at benytte, at grundtilstandsenergien E_0 i vor simple model kan identificeres med den indre energi U ved det absolutte temperaturnulpunkt. Vi har altså

$$U = \frac{3}{5} N E_{\mathrm{F}} \propto V^{-2/3}. \tag{9.15}$$

[1] En af konsekvenserne af dette er, at forskellen mellem C_p og C_V er forsvindende for ledningselektronerne. Man kan derfor med god tilnærmelse regne lydudbredelsen for isoterm.

Følgelig er trykket proportionalt med $V^{-5/3}$, idet det er givet ved

$$p = -\frac{\partial U}{\partial V} = \frac{2U}{3V} = \frac{2}{5} n k T_{\mathrm{F}}. \tag{9.16}$$

Denne tilstandsligning for elektrongassen er altså helt forskellig fra tilstandsligningen (9.13) for en klassisk gas. Forskellen ses (på nær numeriske faktorer) at være, at den absolutte temperatur i (9.13) er erstattet med Fermitemperaturen T_{F}, der er et mål for elektrongassens tæthed.

Massetætheden ρ er med god tilnærmelse givet ved

$$\rho = n_{ion} M, \tag{9.17}$$

hvor M er massen af en ion i krystalgitret, og n_{ion} iontætheden. Vi antager, at der er Z ledningselektroner per ion, hvorfor n_{ion} er lig med n/Z. Heraf fås

$$s^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} = \frac{Z}{3} \frac{m}{M} v_{\mathrm{F}}^2. \tag{9.18}$$

Dette resultat er i rimelig overensstemmelse med målingerne af lydhastigheden i simple metaller som Al, Na eller Cu. Man finder således, at den beregnede værdi ifølge (9.18) er henholdsvis 9,1, 3,0 og 2,7 km/s, mens de målte longitudinale lydhastigheder er 6,8, 3,1 og 4,7 km/s. Lydudbredelse i metaller er altså et egentligt kvantefænomen, da elektrongassens kompressibilitet - som vi har set - afhænger af Plancks konstant $\hbar$. At det er ledningselektronernes kompressibilitet, der indgår i lydhastigheden, er udtryk for, at bevægelsen af ioner og elektroner ikke er uafhængig af hinanden. Tværtimod følger elektronerne med i ionernes svingninger for lokalt at neutralisere disses ladninger. Herved bliver elektrongassen skiftevis udvidet og sammentrykt, så trykgradienten lokalt er bestemt af ændringer i elektrongassens energi som følge af ændringer af dens tæthed.

9.2 Periodisk potential

Indtil nu har vi i dette kapitel kun taget hensyn til ledningselektronernes kinetiske energi. De positive ioner i krystalgitteret giver imidlertid anledning til, at elektronens potentielle energi varierer periodisk i rummet. Den potentielle energi $V(\vec{r})$ har symmetriegenskaben

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}), \tag{9.19}$$

hvor $\vec{R}$ er en vilkårlig gittervektor[2]. Denne symmetri skal vi udnytte til at vise, at egentilstandene for Hamiltonoperatoren for en elektron i et periodisk potential kan vælges på formen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}). \tag{9.20}$$

Her er u en funktion, der har samme periodicitet som den potentielle energi, jvf. (9.19). Egentilstandene (9.20) er altså plane bølger, der er moduleret med en periodisk funktion med samme periodicitet som gitteret. Dette er *Blochs sætning.*

For overskuelighedens skyld skal vi nu vise Blochs sætning i én dimension. Elektronens potentielle energi antages altså at opfylde periodicitetsbetingelsen

$$V(x + na) = V(x). \tag{9.21}$$

Her betegner a afstanden mellem to nærmeste naboer i det endimensionale gitter, og n nummererer gitterpladserne fra 1 til N, idet vi benytter periodiske grænsebetingelser. I analogi med (8.56) definerer vi translationsoperatoren $\hat{T}_n$ ved

$$\hat{T}_n f(x) = f(x - na) \tag{9.22}$$

hørende til en forskydning på na. Hamiltonoperatoren for en enkelt elektron er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{9.23}$$

Det ses nu, at $\hat{T}$ og $\hat{H}$ er indbyrdes ombyttelige, idet

$$\hat{T}\hat{H}f(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d(x-na)^2}f(x - na) + V(x - na)f(x - na), \tag{9.24}$$

mens

$$\hat{H}\hat{T}f(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}f(x - na) + V(x)f(x - na), \tag{9.25}$$

der ses at være ens på grund af (9.21). Det er derfor muligt at finde fælles egenfunktioner for $\hat{T}$ og $\hat{H}$. Inden vi gør dette, bemærker vi, at forskydningerne på sættet af gittervektorer na udgør en gruppe. Ifølge de periodiske grænsebetingelser er $\hat{T}_N = \hat{T}_0$ og $\hat{T}_{N+1} = \hat{T}_1$. Gruppen er tydeligvis abelsk. Dette gælder også i tre dimensioner.

[2]Gittervektorerne $\vec{R}$ er stedvektorer for gitterpunkterne og fremkommer ved linearkombinationer af tre lineært uafhængige basisvektorer $\vec{a}_i, i = 1, 2, 3$ ifølge $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$, hvor n_i er hele tal.

Lad ψ være en fælles egenfunktion for $\hat{T}_n$ og $\hat{H}$. Vi kalder egenværdien hørende til $\hat{T}_n$ for $\lambda(n)$,

$$\hat{T}_n\psi = \lambda(n)\psi. \tag{9.26}$$

Idet

$$\hat{T}_{n+n'} = \hat{T}_n\hat{T}_{n'} \tag{9.27}$$

gælder åbenbart

$$\lambda(n+n') = \lambda(n)\lambda(n'). \tag{9.28}$$

Ifølge de periodiske grænsebetingelser er

$$\lambda(N) = 1,\ \lambda(N+1) = \lambda(1). \tag{9.29}$$

Skriver vi $\lambda(n)$ på formen

$$\lambda(n) = e^{-ikna}, \tag{9.30}$$

må det derfor gælde, at k er reel. Samtidig ses betingelsen (9.28) at være opfyldt.

Vi danner nu funktionen

$$u(x) = e^{-ikx}\psi(x), \tag{9.31}$$

der åbenbart er periodisk, $u(x-na) = u(x)$, idet

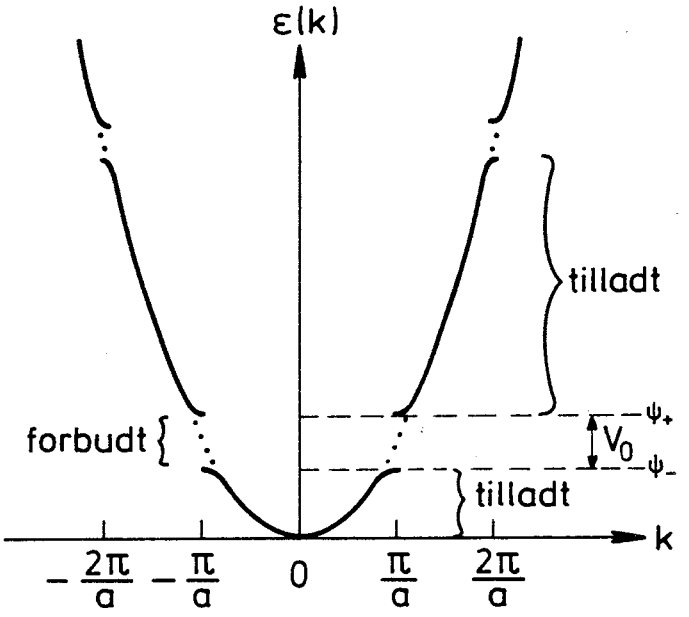
$$\psi(x-na) = e^{-ikna}\psi(x). \tag{9.32}$$

Hermed har vi vist Blochs sætning i én dimension,

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x). \tag{9.33}$$

Da forskydningsoperatorerne hørende til de tre forskellige krystalakseretninger er indbyrdes ombyttelige, kan beviset uden videre generaliseres til tre dimensioner. Vi bemærker også, at brugen af periodiske grænsebetingelser forløber på ganske samme måde som i afsnit 4.3. Specielt er ligning (4.55) fortsat gyldig for Bloch-tilstande som (9.20).

Energien af en Bloch-tilstand afhænger af udseendet af det periodiske potential. I én dimension kan sammenhængen mellem energiegenværdien $\epsilon(k)$ og k være som vist på figur 9.1. Bemærk eksistensen af energigab, hvori der ikke findes Bloch-tilstande.



Figur 9.1: Energiegenværdi $\epsilon(k)$ i én dimension

Som afslutning på denne introduktion til bevægelse i et periodisk potential skal vi løse Schrödingerligningen for en meget simpel model, hvori den potentielle energi er repræsenteret ved deltafunktioner. Selv om denne fysisk set er urealistisk, giver den alligevel indsigt i væsentlige aspekter af bevægelse i et periodisk potential.

EKSEMPEL 10. ET ÉNDIMENSIONALT GITTER.

Vi vil undersøge bevægelsen i et potential af formen

$$V(x) = \sum_n I\delta(x - (n + \frac{1}{2})a), \tag{9.34}$$

hvor I er en positiv konstant, n heltallig, mens a repræsenterer afstanden mellem naboatomer. Når potentialet er uendeligt stort, kan vi ikke - som vi plejer - forlange, at bølgefunktionens afledede skal være kontinuert. Tværtimod ser vi af ligningen

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + \delta(x)C_1\psi = C_2\psi, \tag{9.35}$$

hvor C_1 og C_2 er konstanter, at forskellen mellem $d\psi/dx$ i punktet $x = \epsilon_1$ og $x = -\epsilon_1$ må være $C_1\psi$ taget i punktet $x = 0$ (ϵ_1 er infinitesimal og positiv). Dette vises ved at integrere ligningen (9.35) fra $-\epsilon_1$ til ϵ_1.

Når man skal løse Schrödingerligningen med det forelagte potential, er det bekvemt at indføre dimensionsløse variable ved

$$x' = x/a, \quad \epsilon' = 2ma^2\epsilon/\hbar^2, \quad I' = 2maI/\hbar^2. \tag{9.36}$$

Herved bliver egenværdiligningen for Hamiltonoperatoren

$$[-\frac{d^2}{dx^2} + I\sum_n \delta(x-(n+\frac{1}{2}))]\psi = \epsilon\psi, \tag{9.37}$$

idet vi har fjernet mærkerne på de dimensionsløse variable.

I området

$$-\frac{1}{2} < x < \frac{1}{2} \tag{9.38}$$

er løsningen

$$\psi = A\cos\sqrt{\epsilon}x + B\sin\sqrt{\epsilon}x. \tag{9.39}$$

Ifølge Blochs sætning er

$$\psi(\frac{1}{2}) = e^{ik}\psi(-\frac{1}{2}). \tag{9.40}$$

For den afledede fås tilsvarende

$$e^{ik}\frac{d\psi}{dx}|_{x=-\frac{1}{2}+\epsilon_1} = \frac{d\psi}{dx}|_{x=\frac{1}{2}+\epsilon_1}. \tag{9.41}$$

Værdien af den afledede i punktet $x = \frac{1}{2}+\epsilon_1$ er som vist under (9.35) knyttet til værdien i punktet $x = \frac{1}{2}-\epsilon_1$ ved

$$\frac{d\psi}{dx}|_{x=\frac{1}{2}+\epsilon_1} = \frac{d\psi}{dx}|_{x=\frac{1}{2}-\epsilon_1} + I\psi|_{x=\frac{1}{2}}. \tag{9.42}$$

Af (9.39) og (9.40) fås da

$$A\cos(\sqrt{\epsilon}/2) + B\sin(\sqrt{\epsilon}/2) = e^{ik}A\cos(\sqrt{\epsilon}/2) - e^{ik}B\sin(\sqrt{\epsilon}/2), \tag{9.43}$$

mens (9.39) og (9.41-42) resulterer i

$$e^{ik}\sqrt{\epsilon}A\sin(\sqrt{\epsilon}/2) + e^{ik}\sqrt{\epsilon}B\cos(\sqrt{\epsilon}/2) = -\sqrt{\epsilon}A\sin(\sqrt{\epsilon}/2) + \sqrt{\epsilon}B\cos(\sqrt{\epsilon}/2) + I[A\cos(\sqrt{\epsilon}/2) + B\sin(\sqrt{\epsilon}/2)]. \tag{9.44}$$

Det fremgår, at (9.43-44) udgør et homogent ligningssystem for de to ubekendte A og B. Betingelsen for, at ligningssystemet har løsninger forskellige fra nulløsningen $(A,B) = (0,0)$, er at determinanten er nul, d.v.s.

$$(1-e^{ik})^2\sqrt{\epsilon}\cos^2(\sqrt{\epsilon}/2) + (1+e^{ik})^2\sqrt{\epsilon}\sin^2(\sqrt{\epsilon}/2) - 2e^{ik}I\sin(\sqrt{\epsilon}/2)\cos(\sqrt{\epsilon}/2) = 0, \tag{9.45}$$

der kan omformes til

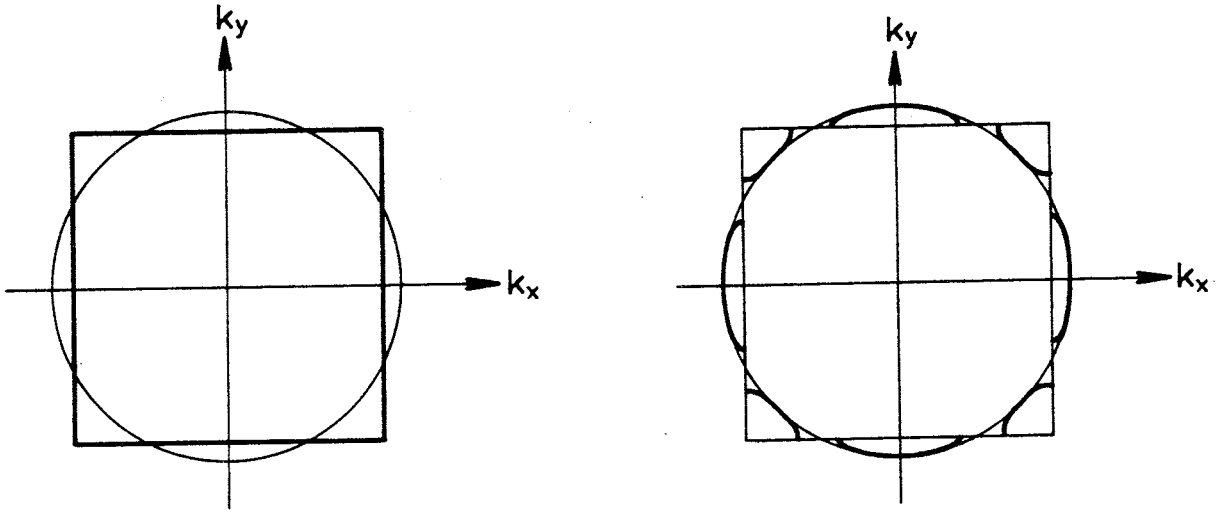
$$4\sin^2 k/2\sqrt{\epsilon}\cos^2(\sqrt{\epsilon}/2) + 4\cos^2 k/2\sqrt{\epsilon}\sin^2(\sqrt{\epsilon}/2) = I\sin\sqrt{\epsilon}. \tag{9.46}$$

Ved at udtrykke kvadratet på sinus og cosinus ved cosinus til den dobbelte vinkel fås

$$\cos k = \cos\sqrt{\epsilon} + \frac{I}{2}\frac{\sin\sqrt{\epsilon}}{\sqrt{\epsilon}}. \tag{9.47}$$

Vi kan nu vælge et ϵ og finde det tilsvarende k (hvis det eksisterer), jvf. opgave 9.3. Herved bestemmes ϵ som funktion af k,

$$\epsilon = F(k). \tag{9.48}$$



Figur 9.2: Kurver med konstant energi

Resultatet kan sammenlignes med skitsen på fig. 9.1.

I to dimensioner separerer problemet, når vi vælger den potentielle energi til at være

$$V = V(x) + V(y). \tag{9.49}$$

Heraf findes energien ϵ som

$$\epsilon = F(k_x) + F(k_y), \tag{9.50}$$

hvor F er funktionen i (9.48). Ved at vælge et ϵ kan k_y nu findes som funktion af k_x ved hjælp af lommeregneren. På fig. 9.2 har vi tegnet en cirkel i $k_x - k_y$-planen svarende til konstant energi i tilfældet $I = 0$ og skitseret en kurve svarende til konstant energi for $I > 0$. Gabenes størrelse kan varieres igennem parameteren I.

I tre dimensioner bliver sammenhængen mellem ϵ og $\vec{k}$ naturligvis mere kompliceret, men princippet for løsning af egenværdiproblemet er det samme, idet Blochs sætning benyttes som randbetingelse på løsningen til Schrödingerligningen inden for krystallens enhedscelle. Opfyldningen af de mulige energiniveauer bestemmer, hvorvidt stoffet i dets grundtilstand er metallisk eller isolerende, og størrelsen af energigabene bestemmer om stoffet karakteriseres som en halvleder eller en isolator.

9.3 Gittersvingninger

I faste, krystallinske stoffer er atomerne regelmæssigt ordnet i et gitter. De enkelte atomer kan udføre svingninger om deres ligevægtsposition, men disse svingninger er ikke uafhængige. De

Figur 9.3: Lineær kæde

svingninger, som et bestemt atom udfører omkring dets ligevægtsposition, vil påvirke naboatomernes svingninger. En kubikcentimeter af et krystallinsk stof må derfor opfattes som et system af koblede oscillatorer, hvis antal er af størrelsesordenen 10^{23}. Ikke desto mindre er resultatet (2.103) for energiegenværdierne af en enkelt harmonisk oscillator grundlaget for at beskrive krystallens gittersvingninger som helhed.

For at indse dette skal vi gå frem i tre trin, hvoraf det første kun benytter klassisk mekanik, det andet kvantemekanik og det tredje statistisk mekanik. Hensigten er at omforme bevægelsesproblemet for de koblede oscillatorer til et simplere, hvori svingningerne sker uafhængigt af hinanden. Man kalder en sådan transformation en overgang til normalkoordinater og de resulterende svingninger for normalsvingninger. Først vil vi gennemføre overgangen til normalsvingninger for den simplest tænkelige 'krystal', der består af en lineær kæde af atomer.

9.3.1 Normalsvingninger

Dette afsnit omhandler det klassiske bevægelsesproblem. Vi betragter en lineær kæde af atomer, der er indbyrdes koblede ved fjedre med samme kraftkonstant K (fig. 9.3). Atomernes masse kaldes M. Med u_n betegner vi udsvinget af det n'te atom fra ligevægtsstillingen. Atomerne kan kun bevæge sig i kædens længderetning. Vi skal senere se, hvorledes denne model kan generaliseres til det tilfælde, hvor atomerne sidder i et tredimensionalt gitter og kan svinge i en vilkårlig retning i rummet. Ifølge Newtons anden lov er accelerationen $\ddot{u}_n$ af det n'te atom givet ved

$$M\ddot{u}_n = -K(u_n - u_{n-1}) - K(u_n - u_{n+1}). \tag{9.51}$$

Idet kæden antages at bestå af N atomer, vil vi pålægge løsningerne til (9.51) de periodiske randbetingelser

$$u_N = u_0; \quad u_{N+1} = u_1. \tag{9.52}$$

Afstanden mellem naboatomer i ligevægt kaldes for a, og kædens længde L er åbenbart $L = Na$. Randbetingelserne (9.52) svarer åbenbart til, at kædens ender er føjet sammen.

Ved løsningen af bevægelsesligningerne er det bekvemt at opfatte u_n som realdelen af en kompleks størrelse. Vi ser nemlig, at (9.51) er tilfredsstillet af

$$u_n = u_0 e^{iqna - i\omega t} \tag{9.53}$$

forudsat, at ω og q er knyttet sammen ved betingelsen

$$M\omega^2 = 4K \sin^2 \frac{qa}{2}. \tag{9.54}$$

Løsningen (9.53) har form af en plan bølge

$$e^{iqx - i\omega t}, \tag{9.55}$$

hvor stedkoordinaten x antager de diskrete værdier $x = na$, $n = 1, \cdots, N$. Bølgetallet er åbenbart $q/2\pi$, mens den angulære frekvens er ω . Det virkelige udsving u_n er naturligvis en reel størrelse, og (9.53) bør strengt taget skrives på formen

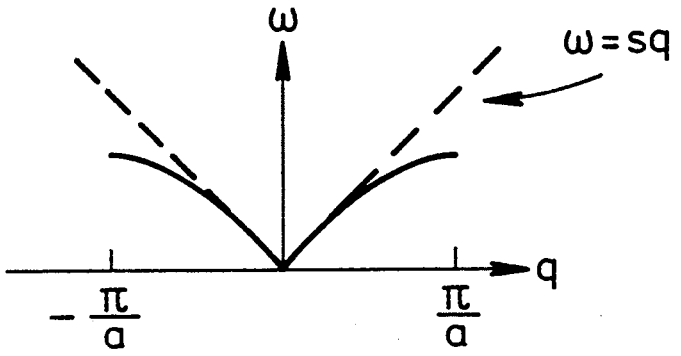
$$u_n = \Re u_0 e^{iqna - i\omega t} = u_0 \cos(qna - \omega t), \tag{9.56}$$

hvis u_0 er valgt reel. Symbolet $\Re$ angiver realdelen. Ofte udelader man imidlertid af bekvemmelighedsgrunde $\Re$, idet man underforstår, at realdelen tages af slutresultatet. Nu fremkommer ved indsættelse i (9.51) den samme betingelse (9.54) svarende til

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}} |\sin \frac{qa}{2}|, \tag{9.57}$$

idet fortegnet af ω vælges positivt. En ligning som (9.57), der sammenknytter bølgetal og frekvens, kaldes for en dispersionsrelation. Det svingningsmønster u_n, der hører til en bestemt værdi af q (og dermed ω), betegnes en normalsvingning. Dispersionsrelationen (9.57) er vist i fig. 9.4. Bemærk, at sammenhængen mellem ω og q er lineær for små q. I denne grænse svarer svingningsmønstret til en lydsvingning, med dispersionsrelation

$$\omega = sq, \tag{9.58}$$



Figur 9.4: Dispersionsrelation for lineær kæde

hvor lydhastigheden s er givet ved

$$s = a\sqrt{\frac{K}{M}}. \tag{9.59}$$

Når frekvensen ω bliver lille for små værdier af q, skyldes det, at svingningsmønstret i denne grænse næsten ikke flytter naboatomer i forhold til hinanden. Hvis q derimod antager værdien π/a, vil naboatomer svinge mod hinanden ($u_n = -u_{n-1}$), og frekvensen ω bliver derved maksimal, lig med $2\sqrt{K/M}$.

Vi kan nu benytte grænsebetingelserne (9.52) til at bestemme de tilladte værdier af q. Bemærk, at problemstillingen er rent klassisk. For at (9.52) kan være opfyldt må ligningen

$$e^{iqNa} = 1 \tag{9.60}$$

være tilfredsstillet, og q skal derfor antage værdierne

$$q = \frac{m}{N}\frac{2\pi}{a}, \tag{9.61}$$

hvor m er et helt tal (positivt, negativt eller nul).

Foruden (9.61) må de mulige bølgetal tilfredsstille endnu en betingelse. Hvis vi nemlig i (9.53) erstatter q med $q + 2\pi/a$, vil u_n og dermed svingningsmønstret ikke ændre sig. De to forskellige værdier af bølgetallet svarer altså til det samme svingningsmønster, i konsekvens af, at det kun er værdien af den plane bølge (9.55) i gitterpunkterne $x = na$, der har fysisk betydning. Da svingningsmønstret er uændret, hvis vi lægger et helt multiplum af $2\pi/a$ til q,

kan vi begrænse q til at ligge i området

$$-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}. \tag{9.62}$$

Lad os opsummere, hvad vi har vist om normalsvingninger og deres egenskaber. Krystalatomernes udsving kan sammensættes af svingningsmønstre som (9.53), forudsat at ω og q er knyttet sammen via dispersionsrelationen (9.57). Der er præcis N mulige svingningsmønstre, nemlig lige så mange som de tilladte værdier af q i intervallet $-\pi/a < q < \pi/a$.

Inden vi går over til den kvantemekaniske behandling af svingningsproblemet, skal vi understrege, at den forudgående behandling af gittersvingningerne er rent klassisk. Ganske vist har vi fundet, at q kun antager diskrete værdier, jvf. (9.61), men dette skyldes, at vi har pålagt periodiske grænsebetingelser på normalsvingningerne (svarende til at kædens ender føjes sammen). I det følgende afsnit skal vi diskutere, hvorledes systemets Hamiltonoperator fremkommer ud fra dets Hamiltonfunktion.

9.3.2 Fononer

Vi har nu løst det klassiske bevægelsesproblem for den lineære kæde bestående af N atomer, hver med masse M, hvis vekselvirkning er repræsenteret ved fjedre med kraftkonstant K. Et svingningsmønster som (9.56) løser de klassiske bevægelsesligninger, forudsat at ω og q er knyttet sammen via (9.57). En vilkårlig løsning, der svarer til bestemte begyndelsesbetingelser, fremkommer ved en superposition af sådanne normalsvingninger. Den komplicerede bevægelse af de koblede gitteratomer er herved opløst i noget langt simplere, en overlejring af uafhængige normalsvingninger givet ved (9.56-57). Med udgangspunkt i dette klassiske resultat er det nærliggende at antage, at Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ for den lineære kæde er en sum over q af led af formen (2.91), svarende til

$$\hat{H} = \sum_q \hbar\omega_q(\hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2}). \tag{9.63}$$

Hamiltonoperatoren for den lineære kæde har således en meget simpel form, idet den er en sum af operatorer hørende til hver enkelt harmonisk oscillator, eller normalsvingning, specificeret ved en af de N mulige værdier af q. Sammenhængen mellem svingningsfrekvensen ω_q og q er den klassiske, givet ved (9.57).

Vi har antaget, at (9.63) er Hamiltonoperatoren for den lineære kæde. Dette kan vises ud fra den klassiske Hamiltonfunktion, som afhænger af udsvingene u_n og de tilhørende generaliserede impulser p_n, ved at benytte ombytningsrelationerne $[u_n, p_m] = i\hbar\delta_{nm}$. Vi skal dog ikke gennemføre udledelsen her.

De mulige energiegenværdier findes ud fra (9.63) som for den enkelte harmoniske oscillator: systemets energiniveauer specificeres ved angivelse af antallet af kvanter n_q hørende til hver normalsvingning, således at det tilsvarende bidrag til energien er $\hbar\omega_q(n_q + 1/2)$. Systemets totale energi i den givne tilstand er da summen over alle q af disse energier. Tilstanden angives som en ket, mærket med værdierne af kvantetallene n_{q_i}, hvor index i gennemløber N værdier fra 1 til N svarende til (9.78),

$$|n_{q_1}, n_{q_2}, \cdots, n_{q_N}\rangle. \tag{9.64}$$

Energikvanterne i en normalsvingning kaldes for fononer på grund af, at normalsvingningerne i grænsen for lange bølgelængder ($qa << 1$) har lineær dispersion, svarende til lyd, jvf. (9.58). I stedet for at tænke på de forskellige egenværdier af den totale energi som en sum af energiegenværdierne hørende til hver normalsvingning, specificeret ved kvantetallene n_q, kan man lige så godt angive den pågældende egentilstand ved antallet af fononer, n_q, hørende til hver normalsvingning. Gitteret er hermed transformeret fra et system af N atomer, der vekselvirker indbyrdes, til en samling af fononer (lydkvanter), der ikke vekselvirker. At fonongassen er ideal, er en konsekvens af, at Hamiltonoperatoren kun indeholder led, der er kvadratiske i gitterudsvingene. Hvis man medtager højere ordens led i Hamiltonfunktionen og behandler disse som små størrelser, kan man med god tilnærmelse beskrive krystallen som en samling af fononer, men fononerne får nu en endelig levetid, svarende til, at en given fonon kan henfalde til to eller flere andre fononer. Sådanne processer er afgørende for isolatorers varmeledningsevne, der ville være uendelig, hvis fononerne kunne betragtes som en ideal gas.

I modsætning til hvad der gælder for sædvanlige gasser bestående af for eksempel kvælstofmolekyler i en lukket beholder, er antallet af fononer ikke nogen bevaret størrelse. I gitterets grundtilstand er antallet af fononer nul, da $n_{q_i} = 0$ for alle i. I det følgende afsnit skal vi se, at befolkningen af energitilstandene ved en given temperatur er bestemt ved Planckfordelingen, og på dette grundlag finde størrelsen og temperaturafhængigheden af varmefylden.

9.3.3 Gittervarmefylde

En lineær kæde af atomer er naturligvis ikke en tilfredsstillende model for et fast stof. I en virkelig, tredimensional krystal har et atom typisk seks, otte eller tolv nærmeste naboer, afhængigt af krystalstrukturen. For at bestemme de klassiske gittersvingninger er det nødvendigt at tage udgangspunkt i den givne krystalstruktur og - som et minimum - tage hensyn til koblingen mellem et atom og alle dets nærmeste naboer. Dette komplicerer beregningen af normalsvingningernes frekvens, men medfører ingen begrebsmæssige ændringer. Metoden er i det tredimensionale tilfælde nøjagtig som i det endimensionale, hvor et atom kun vekselvirker med de to nærmeste naboer. En normalsvingning bliver nu karakteriseret ved en bølgevektor $\vec{q}$ med tilhørende angulære frekvens $\omega_{\vec{q}}$, svarende til at (9.53) erstattes med

$$\vec{u} = \vec{u}_0 e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}-i\omega t}, \tag{9.65}$$

hvor $\vec{R}$ er en gittervektor. Til forskel fra det éndimensionale tilfælde kan atomerne svinge i tre retninger i rummet, og der hører derfor tre normalsvingninger til hver værdi af $\vec{q}$. Man siger, at gittersvingningerne er polariseret i tre forskellige retninger og angiver disse ved polarisationsvektorer, der altid kan vælges vinkelret på hinanden. Hvis retningen af $\vec{q}$ er sammenfaldende med en symmetriakse i krystallen, kan polarisationsvektorerne desuden vælges parallelt med, henholdsvis vinkelret på $\vec{q}$. Man taler da om longitudinale, henholdsvis transversale fononer. Hvis krystallens enhedscelle indeholder forskellige atomer, finder man som i det éndimensionale tilfælde både akustiske og optiske grene. Tre af grenene vil altid være akustiske, men de tilhørende lydhastigheder, der i lighed med (9.58) fremkommer i grænsen $q \to 0$, har normalt forskellig størrelse.

Også kvantiseringen af normalsvingningerne forløber som vist i det endimensionale eksempel. Hamiltonoperatoren bliver givet ved (9.63), forudsat at q i dette udtryk opfattes som $(\vec{q}, \lambda)$, hvor λ er et polarisationsindex. I følge ovenstående kan λ antage tre forskellige værdier ($\lambda = 1, 2, 3$) svarende til de tre enhedsvektorer $\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$ og $\vec{e}_3$, der for et givet $\vec{q}$ angiver normalsvingningernes polarisationsretninger. Hermed er vi i stand til at nedskrive de forskellige mulige energiegenværdier E_i for krystallen som helhed,

$$E_i = \sum_{\vec{q},\lambda} \hbar\omega_{\vec{q},\lambda}(n_{\vec{q},\lambda} + \frac{1}{2}). \tag{9.66}$$

I dette udtryk skal i opfattes som et index, der står for samlingen af kvantetal $n_{\vec{q},\lambda}$.

For at kunne bestemme faste stoffers varmefylde på basis af de mulige energiværdier (9.66) må vi inddrage et hovedresultat af den statistiske mekanik, nemlig den såkaldte kanoniske fordeling. Denne statistiske fordeling vedrører et system, der er i kontakt med et varmebad med temperaturen T. Under disse omstændigheder vil sandsynligheden p_i for at finde systemet i en tilstand med energi E_i være

$$p_i = \frac{e^{-E_i/kT}}{\sum_i e^{-E_i/kT}}. \tag{9.67}$$

Det ses, at summen af p_i over alle i er 1. Konstanten k, der optræder i (9.67), kaldes Boltzmanns konstant. Dens værdi er $1,38 \cdot 10^{-23}$ Joule/K.

Den kanoniske fordeling (9.67) vil ikke blive udledt her, men den kan sandsynliggøres på forskellig måde. For det første er det klart, at vi må beskrive de termodynamiske egenskaber af store systemer ved statistiske metoder. Det er håbløst at tænke på at løse Hamiltons ligninger eller Schrödingerligningen for 10^{23} partikler, der vekselvirker indbyrdes og med omgivelserne. Blot at angive begyndelsesbetingelserne ville kræve en uoverkommelig stor informationsmængde. I stedet for at angive systemets tilstand så detaljeret som kvantemekanikken tillader det, er vi tvunget til at nøjes med at angive sandsynligheden for at finde et system, der er i kontakt med et varmebad, i en tilstand svarende til en bestemt energi. Det er plausibelt, at de forskellige energiegentilstande ikke kan være ligeligt befolket, men at der er større sandsynlighed for at finde systemet i en tilstand med lavere energi end i en tilstand med højere. Som illustration af dette tjener diatomige luftmolekyler, der som nævnt i kapitel 1 ikke blot har translatoriske frihedsgrader, men også kan vibrere eller rotere. Hvis energiforskellen $\hbar\omega$ mellem den næstlaveste og laveste vibrationstilstand er stor i sammenligning med kT, er det overvejende sandsynligt, at molekylet befinder sig i den laveste vibrationstilstand, svarende til at kvantetallet n i energispektret (2.103) er nul. Kun hvis $\hbar\omega$ er sammenlignelig med kT, der pånær en talfaktor er middelværdien af de enkelte molekylers kinetiske energi, kan vi forvente nogen væsentlig befolkning af de højere liggende energiegentilstande.

Et eksempel på en kanonisk fordeling er den velkendte Maxwell-Boltzmann hastighedsfordeling i en klassisk ideal gas. Ifølge denne er antallet $f(\vec{p})d\vec{p}$ af molekyler med impuls-

komposanter i intervallerne $(p_x, p_x + dp_x)$, $(p_y, p_y + dp_y)$ og $(p_z, p_z + dp_z)$ givet ved

$$f(\vec{p})d\vec{p} = C_0 e^{-p^2/2mkT} d\vec{p}, \tag{9.68}$$

hvor C_0 er en konstant og m er molekylmassen. I dette tilfælde er den energi $p^2/2m$, der indgår i eksponentialfunktionen, åbenbart rent kinetisk, men dette gælder naturligvis ikke i almindelighed. Et andet eksempel er den såkaldte højde- eller barometerformel, der knytter en ideal luftarts tæthed n (og dermed tryk) til variationen i molekylernes potentielle energi i et tyngdefelt. Højdeformlen er

$$n(z) = n_0 e^{-mgz/kT}. \tag{9.69}$$

hvor n_0 er en konstant, mens z angiver højden over jordoverfladen og g er tyngdeaccelerationen. Her er det den potentielle energi mgz, der optræder i eksponentialfunktionen.

Ovenstående eksempler på en kanonisk fordeling er hentet fra den klassiske statistiske mekanik, men fordelingen (9.67) gælder helt alment for et system i kontakt med et varmebad, og dermed også for systemer, hvori kvanteeffekter spiller en afgørende rolle. Vi skal nu se, hvorledes anvendelsen af den kanoniske fordeling på en harmonisk oscillator fører til den Planckfordeling, der er grundlaget for beskrivelsen af faste stoffers varmefylde, stråling fra sorte legemer og en mangfoldighed af andre fænomener.

I det følgende betragtes en enkelt oscillator i kontakt med et varmebad, og middelenergien bestemmes som funktion af temperaturen. Spektret af energiegenværdier er givet ved (2.103). Sandsynligheden p_n for at finde oscillatoren i tilstanden mærket med n er således

$$p_n = \frac{e^{-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega/kT}} \tag{9.70}$$

og middelenergien $\bar{E}$ er derfor

$$\bar{E} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n p_n. \tag{9.71}$$

Summen (9.71) udregnes nemmest ved at beregne den såkaldte tilstandssum Z, der i almindelighed er defineret ved

$$Z = \sum_i e^{-E_i/kT}, \tag{9.72}$$

hvor E_i er systemets energiegenværdier. Når disse er givet ved (2.103) danner de enkelte led i (9.72) en geometrisk række. Hermed kan summen (9.72) let udføres med resultatet

$$Z = \frac{e^{-\hbar\omega/2kT}}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \tag{9.73}$$

Ved sammenligning af (9.71) og (9.72) ses det, at middelenergien kan skrives som

$$\bar{E} = -\frac{\partial \ln Z(\beta)}{\partial \beta}, \tag{9.74}$$

hvor parameteren β er defineret ved $\beta = 1/kT$. Når (9.73) indsættes i (9.74), bliver oscillatorens middelenergi udtrykt som

$$\bar{E} = \hbar\omega(\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} + \frac{1}{2}). \tag{9.75}$$

Funktionen $\bar{n}$ givet ved

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \tag{9.76}$$

kaldes Planckfordelingen (jvf. (1.1)). Den er lig med middelværdien af antallet n af energikvanter i en harmonisk oscillator, hvis klassiske frekvens er ω. Når temperaturen er høj i forhold til $\hbar\omega/k$, er $\bar{n}$ med tilnærmelse givet ved $kT/\hbar\omega$. Middelenergien bliver derfor uafhængig af Plancks konstant,

$$\bar{E} \simeq kT. \tag{9.77}$$

I den modsatte grænse, $kT << \hbar\omega$, er $\bar{E}$ med tilnærmelse lig med oscillatorens nulpunktsenergi $\hbar\omega/2$. I denne grænse har befolkningen af oscillatorens højere energitilstande ingen betydning for middelenergien, da sandsynligheden for at finde oscillatoren i en højere energitilstand er meget lille, givet ved $1 - p_0 \simeq e^{-\hbar\omega/kT}$.

Efter at have bestemt middelenergien af en enkelt oscillator i kontakt med et varmebad er vi nu i stand til at finde middelenergien for en krystal bestående af N atomer. I den klassiske grænse, hvor $kT/\hbar$ er stor i sammenligning med en vilkårlig fononfrekvens, kan vi benytte resultatet (9.77) for en enkelt oscillator og multiplicere dette med antallet af oscillatorer $3N$. Bemærk at hvert atom svarer til tre oscillatorer, idet udsvingene fra gitterpositionen kan foregå i tre forskellige retninger. Herved fås

$$\bar{E} = 3NkT. \tag{9.78}$$

Varmekapaciteten C er i almindelighed givet ved den termodynamiske relation

$$C = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T}. \tag{9.79}$$

Det er underforstået, at krystallens volumen er holdt fast ved differentiationen med hensyn til temperaturen. Så længe gittersvingningerne som ovenfor behandles i den harmoniske approksimation svarende til Hamiltonoperatoren (9.63), er der ingen forskel på varmefylden ved konstant volumen og ved konstant tryk. I den klassiske grænse, hvor $\bar{E}$ er givet ved (9.78), bliver varmekapaciteten derfor

$$C = 3Nk. \tag{9.80}$$

Ifølge (9.80) er den molære varmekapacitet en universel størrelse, der er lig med tre gange gaskonstanten R eller 25 Joule/molK. Resultatet (9.80) er almindeligvis i god overensstemmelse med målinger af varmekapaciteten ved stuetemperatur. En sådan lovmæssighed blev først fundet empirisk af Dulong og Petit i 1819. Til illustration af gyldigheden af Dulongs og Petits lov kan det nævnes, at C ved stuetemperatur er målt til at være $28, 26, 24$ og $8,5$ Joule/molK for henholdsvis Na, Ca, Al og C (diamant). Den store afvigelse for C (diamant) er udtryk for, at kvanteeffekter er vigtige selv ved stuetemperatur. Vi skal i det følgende se, at alle de nævnte grundstoffers varmekapacitet med god tilnærmelse kan beskrives ved en universel funktion af temperaturen.

Vi er nu i stand til at angive middelenergien for krystallen, hvis energispektrum er givet ved (9.66). Da de mulige værdier af krystallens totale energi er givet ved summen af de mulige energiegenværdier for hver enkelt oscillator, er det ikke overraskende, at middelenergien af hele krystallen er lig med summen af de enkelte oscillatorers middelenergier,

$$\bar{E} = \sum_{\vec{q},\lambda} \hbar\omega_{\vec{q},\lambda}(\bar{n}_{\vec{q},\lambda} + \frac{1}{2}). \tag{9.81}$$

Her er $\bar{n}_{\vec{q},\lambda}$ Planckfordelingen (9.76) med $\omega = \omega_{\vec{q},\lambda}$. Gyldigheden af (9.81) kan vises direkte ud fra (9.74) ved som ovenfor at danne tilstandssummen Z, der er et produkt af $3N$ faktorer $Z_{\vec{q},\lambda}$, hvor hver faktor $Z_{\vec{q},\lambda}$ er givet ved (9.73) med $\omega = \omega_{\vec{q},\lambda}$. Middelenergien fås da af (9.74) ved at benytte at $\ln Z$ er summen af $\ln Z_{\vec{q},\lambda}$ over $\vec{q}, \lambda$ og bliver som ventet givet ved (9.81).

Varmefylden kan således findes af (9.81) og (9.79) på basis af et givet fononspektrum $\omega_{\vec{q},\lambda}$. Da de tilladte værdier af $\vec{q}$ ligger meget tæt i en krystal af makroskopisk udstrækning, kan summen over $\vec{q}$ omdannes til et integral ifølge

$$\sum_{\vec{q}} \cdots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \cdots \tag{9.82}$$

hvor V er krystallens volumen. Reglen (9.82) eftervises ved at generalisere (9.61) til tre dimensioner som følger. Vi betragter en kubisk krystal, hvis enhedscelle har kantlængderne a_1, a_2 og a_3, og hvis volumen V udgøres af $N = N_1N_2N_3$ enhedsceller. Komposanterne af vektoren $\vec{q}$ skal da antage værdierne

$$q_x = \frac{m_1}{N_1}\frac{2\pi}{a_1},\ q_y = \frac{m_2}{N_2}\frac{2\pi}{a_2},\ q_z = \frac{m_3}{N_3}\frac{2\pi}{a_3}, \tag{9.83}$$

hvor m_1, m_2 og m_3 er hele tal, for at de periodiske randbetingelser kan blive opfyldt.

I almindelighed er det kompliceret at beregne gittervarmefylden ud fra (9.81) på basis af et realistisk fononspektrum, da $\omega_{\vec{q},\lambda}$ ikke alene afhænger af længden af bølgevektoren $\vec{q}$, men også af dens retning. Når temperaturen er så lav, at $kT/\hbar$ er meget mindre end den største fononfrekvens, er beregningen af middelenergien og dermed varmefylden imidlertid simpel. Antager vi for nemheds skyld, at alle tre akustiske grene har samme lydhastighed s, bliver den temperaturafhængige del af middelenergien ved lave temperaturer givet ved

$$\bar{E} = 3\frac{V}{(2\pi)^3}\int_0^\infty dq 4\pi q^2 \frac{\hbar sq}{e^{\hbar sq/kT}-1} \tag{9.84}$$

Her er V krystallens volumen, og tretallet foran integralet skyldes, at vi har taget hensyn til de tre mulige polarisationsretninger, mens $4\pi q^2$ er overfladearealet af en kugle med radius q. Ved overgangen fra (9.81) til (9.84) har vi udeladt den temperaturuafhængige nulpunktsenergi, der er krystallens energi i grundtilstanden svarende til at alle $n_{\vec{q},\lambda}$ er nul. Integrationen over q er i (9.84) udstrakt til uendelig. Gyldigheden af denne approksimation er betinget af, at temperaturen er så lav, at bidraget til middelenergien fra integrationen over den del af $\vec{q}$-rummet, hvori fononfrekvenserne ikke afhænger lineært af q, er forsvindende. Som det ses af (9.81), er det Planck-fordelingens eksponentielle afhængighed af $\omega_{\vec{q},\lambda}$ for $\hbar\omega_{\vec{q},\lambda} >> kT$, der gør det muligt at foretage en sådan approksimation ved lave temperaturer.

For at finde temperaturafhængigheden af middelenergien $\bar{E}$ er det bekvemt som integrationsvariabel at benytte den dimensionsløse variable

$$x = \frac{\hbar sq}{kT}, \tag{9.85}$$

hvorved (9.84) ses at blive

$$\bar{E} = \frac{3}{2\pi^2}\frac{V(kT)^4}{(\hbar s)^3}\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x-1} \tag{9.86}$$

Værdien af integralet i (9.86) er $\pi^4/15$. Heraf fås resultatet for varmekapaciteten

$$C = \frac{2\pi^2}{5}\frac{Vk^4T^3}{(\hbar s)^3} \tag{9.87}$$

Resultatet (9.87) gælder kun ved lave temperaturer. Til slut skal vi se, hvorledes varmefylden kan regnes ud for alle temperaturer ved at benytte en simplificeret lineær dispersionsrelation $\omega_q = sq$ for alle q op til en maksimal værdi q_{D}, der alene afhænger af tætheden N/V af gitteratomer,

$$q_{\mathrm{D}}^3 = \frac{6\pi^2 N}{V}. \tag{9.88}$$

Denne værdi af q_{D} fremkommer ved at forlange, at antallet af forskellige normalsvingninger skal være $3N$ eller N per polarisationsretning, idet (9.82) medfører at

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi q_{\mathrm{D}}^3}{3}, \tag{9.89}$$

som resulterer i (9.88). Middelenergien fås da af (9.84) ved at erstatte øvre grænse i integralet med q_{D}, og varmekapaciteten bliver

$$C = 3NkF(T/\Theta_{\mathrm{D}}), \tag{9.90}$$

hvor funktionen $F(x)$ er givet ved

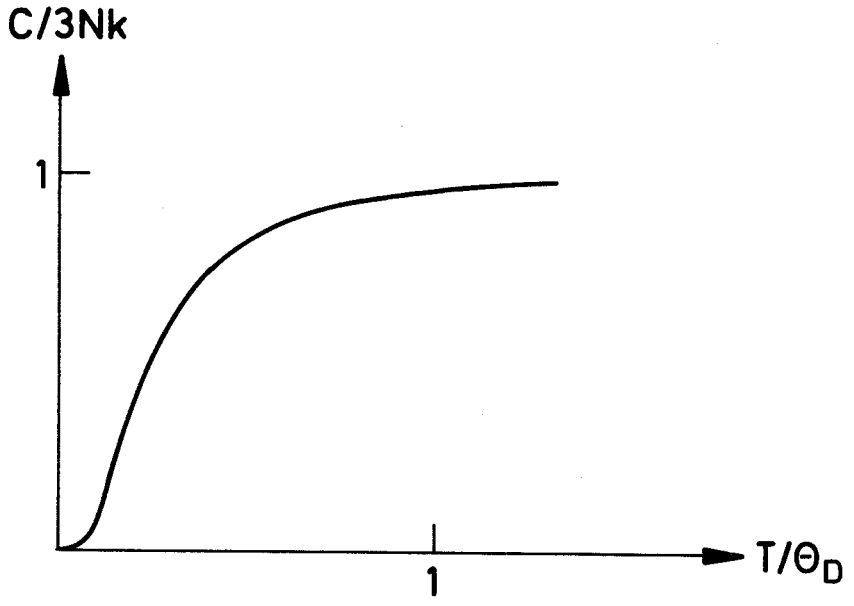
$$F(x) = \frac{3}{4}x^3\int_0^{1/x} dy \frac{y^4}{\sinh^2(y/2)} \tag{9.91}$$

og parameteren Θ_{D} er defineret ved

$$\Theta_{\mathrm{D}} = \hbar s q_{\mathrm{D}}/k. \tag{9.92}$$

Funktionen F er vist på fig. 9.5.

Denne simplificerede model, der skyldes Debye, giver en god beskrivelse af temperaturafhængigheden af den målte varmekapacitet, når man ved sammenligningen tilpasser parameteren Θ_{D}, der kaldes for Debyetemperaturen. Denne er typisk nogle få hundrede grader og er altså et mål for den temperatur, under hvilken kvanteeffekter har betydning. Ifølge Debyeudtrykket for varmefylden er varmekapaciteten givet ved $0,95$ gange den klassiske værdi, når temperaturen er lig med Θ_{D}, mens den er faldet til cirka halvdelen af den klassiske værdi, når temperaturen er lig med $\Theta_{\mathrm{D}}/4$, jvf. fig. 9.5. For grundstofferne Na, Ca, Al og C, der er



Figur 9.5: Varmekapaciteten i Debye-modellen, (9.90-91).

omtalt ovenfor, er Debyetemperaturen 150, 230, 390 og 1860 K. Disse værdier er opnået ved tilpasning af den beregnede Debyekurve (9.90) til den målte varmekapacitet som funktion af temperaturen. Et groft skøn over størrelsen af Debyetemperaturen kan fås ud fra (1.49), idet kraftkonstanten for krystalatomernes koblede svingninger kan forventes at være af samme størrelsesorden som molekylets. Ved at indsætte atommassen for de nævnte grundstoffer i (1.49) finder man energier, der omsat til temperaturer ligger mellem 1000 og 2000K.

9.4 Spinbølger

Mens et krystalgitters mulige tilstande i afsnit 9.3 blev karakteriseret ved et antal fononer hørende til hver af de forskellige normalsvingninger, skal vi i dette afsnit se, hvorledes ferromagneter ved lave temperaturer kan beskrives ved spinbølger, også kaldet magnoner. Ligesom fononerne repræsenterer magnonerne eksciterede tilstande for systemet, altså tilstande med en energi, der er højere end grundtilstandens energi. Vi vil først finde magnonernes energi som funktion af deres bølgetalsvektor og dernæst anvende formel (9.81) for middelenergien til at finde et ferromagnetisk stofs varmefylde ved lave temperaturer.

For nemheds skyld betragter vi en lineær kæde af atomer, der vekselvirker med de nærme-

Figur 9.6: Grundtilstand for lineær magnetisk kæde

ste naboatomer. Hamiltonoperatoren for den magnetiske kæde er

$$\hat{H} = -J\sum_n \hat{\vec{S}}_n \cdot \hat{\vec{S}}_{n+1} = -J\sum_n (\hat{S}_{n,z}\hat{S}_{n+1,z} + \frac{1}{2}(\hat{S}_{n,+}\hat{S}_{n+1,-} + \hat{S}_{n,-}\hat{S}_{n+1,+})), \tag{9.93}$$

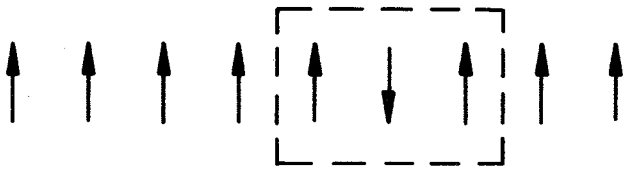
hvor J er en positiv konstant. Her er som sædvanlig $\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$ og $\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$. Spinoperatorernes egenværdier er for nemheds skyld gjort dimensionsløse ved, at alle spinoperatorer er divideret med $\hbar$. Herved får J dimension af energi. Atomernes positioner i kæden er nummereret ved $n = 1, 2, 3, \cdots, N$, hvor N er antallet af atomer, og vi anvender som ovenfor periodiske grænsebetingelser. Ved at udnytte impulsmomentoperatorernes egenskaber ser man, at tilstanden $|0\rangle$ givet ved

$$|0\rangle = |s_1, s_2, \cdots s_N\rangle \tag{9.94}$$

er en egentilstand for $\hat{H}$,

$$\hat{H}|0\rangle = -JNs^2|0\rangle, \tag{9.95}$$

idet $s_i = s$ angiver den (fælles) maksimale værdi af det i'te atomare spins z-komposant (for en enkelt elektron er $s = \frac{1}{2}$, men i almindelighed kan s være større end denne værdi, da de atomare spin fremkommer ved sammensætning af mange elektroners impulsmoment). Tilstanden $|0\rangle$ er således givet ved at egenværdien for ethvert $\hat{S}_{n,z}$ er s. Denne tilstand er anskueliggjort på fig. 9.6. Det er ikke svært at vise, at egenværdien i (9.95) er den mindst mulige svarende til systemets grundtilstand, men dette bevis skal vi udelade her. Ud fra en klassisk betragtning er det plausibelt at den laveste energi fremkommer ved at 'ensrette' spinnene, idet J er antaget positiv. Hvis J er negativ som for et antiferromagnetisk materiale, er forholdene væsentligt mere komplicerede, og det er ikke muligt at finde et simpelt udtryk for systemets grundtilstand svarende til (9.94-95).



Figur 9.7: Illustration af (9.96) for $s = \frac{1}{2}$.

Lad os nu forsøge at finde eksciterede tilstande for systemet, altså egentilstande for Hamiltonoperatoren med energier, der er større end grundtilstandsenergien $-JNs^2$. Vi betragter en (normeret) tilstand $|n\rangle$ givet ved

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2s}}\hat{S}_{n,-}|0\rangle. \tag{9.96}$$

Denne tilstand, der er anskueliggjort på fig. 9.7 i tilfældet $s = \frac{1}{2}$, er imidlertid ikke en egentilstand for $\hat{H}$. Man får nemlig (jvf. fig. 9.7)

$$\hat{H}|n\rangle = -Js(|n+1\rangle + |n-1\rangle) - J(N-2)s^2|n\rangle - s(s-1)2J|n\rangle \tag{9.97}$$

ved at benytte de kendte egenskaber af impulsmomentoperatorerne. Danner vi nu linearkombinationen

$$|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{iqna}|n\rangle, \tag{9.98}$$

hvor a er afstanden mellem naboatomer, bliver (9.98) en egentilstand, idet

$$\hat{H}|q\rangle = (-JNs^2 + 2Js(1-\cos qa))|q\rangle. \tag{9.99}$$

Åbenbart er $|q\rangle$ en eksciteret tilstand med energi

$$\hbar\omega_q = 2Js(1-\cos qa) = 4Js\sin^2 qa/2 \tag{9.100}$$

relativt til grundtilstanden. Ligesom krystalgitterets egentilstande ovenfor blev angivet ved antaller af fononer (energikvanter) hørende til en bestemt normalsvingning, kan vi opfatte tilstanden (9.98) som en egentilstand, der indeholder netop én magnon. Bemærk, at denne tilstand er en egentilstand for z-komposanten af det totale spin med egenværdi $Ns-1$ (i

enheder af $\hbar$), da den er fremkommet ved en superposition (9.98) af tilstande som (9.96), der er egentilstande for z-komposanten af det totale spin med egenværdi $Ns-1$, idet operatoren $\hat{S}_{n,-}$ reducerer egenværdien med 1 i forhold til grundtilstandens.

Beregningen af magnonenergien forløber i det tredimensionale tilfælde på helt tilsvarende vis som i det éndimensionale. Antager vi for nemheds skyld, at det magnetiske materiale er ordnet i et simpelt kubisk gitter, skal magnonenergien (9.100) erstattes med

$$\hbar\omega_{\vec{q}} = 4Js(\sin^2(q_x a/2) + \sin^2(q_y a/2) + \sin^2(q_z a/2)), \tag{9.101}$$

idet magnontilstanden er karakteriseret ved en tredimensional bølgevektor $\vec{q}$ som for fononer. Dispersionsrelationen (9.101) har kubisk symmetri, idet magnonenergien ikke ændrer sig ved en ombytning af akserne i $\vec{q}$-rummet. Den er anisotrop i den forstand, at energien ikke blot afhænger af længden af $\vec{q}$, men også af retningen. Ved lave temperaturer ($T \ll J/k$) er det primært de langbølgede magnoner med lille energi, der bestemmer de termodynamiske størrelser, da middelantallet af magnoner som for fononer er givet ved Planckfordelingen

$$\bar{n}_{\vec{q}} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\vec{q}}/kT} - 1}, \tag{9.102}$$

jvf. (9.76). Det er derfor ved lave temperaturer tilstrækkeligt at benytte magnonenergien (9.101) i grænsen for små bølgevektorer svarende til

$$\hbar\omega_q = Jsq^2a^2. \tag{9.103}$$

Den temperaturafhængige del af middelenergien $\bar{E}$ er

$$\bar{E} = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}}\bar{n}_{\vec{q}}. \tag{9.104}$$

Ved at indsætte (9.103) i dette udtryk for middelenergien og benytte (9.82), hvor $V = Na^3$ er volumenet af det magnetiske materiale indeholdende N atomer, fås

$$\bar{E} = \frac{Na^3}{(2\pi)^3}\int_0^\infty dq 4\pi q^2 \frac{Jsq^2a^2}{e^{Jsq^2a^2/kT} - 1}, \tag{9.105}$$

jvf. (9.84). Indføres den dimensionsløse variable $x = Jsq^2a^2/kT$ finder man

$$\bar{E} = \frac{1}{4\pi^2} N \frac{(kT)^{\frac{5}{2}}}{(Js)^{\frac{3}{2}}}\int_0^\infty \frac{x^{\frac{3}{2}}}{e^x - 1}, \tag{9.106}$$

idet værdien af integralet i (9.106) er $\Gamma(5/2)\zeta(5/2)$, hvor $\Gamma(z)$ og $\zeta(z)$ er henholdsvis gamma- og zetafunktionen[3]. Herved bliver varmefylden (9.79)

$$C = \frac{5\Gamma(\frac{5}{2})\zeta(\frac{5}{2})}{8\pi^2} Nk(\frac{kT}{Js})^{\frac{3}{2}}. \tag{9.107}$$

Denne lov er i god overensstemmelse med målinger af jerns varmefylde ved temperaturer, der er meget mindre end J/k.

Magnetiseringen findes på tilsvarende måde, idet tilstandene (9.98) som nævnt svarer til, at z-komposanten af det totale spin er reduceret med 1. Middelantallet af spinbølger ved en given temperatur er derfor et udtryk for den relative ændring af magnetiseringen $M(T)$ ved lave temperaturer. Vi har derfor

$$M(T) = M(0)(1 - \frac{1}{Ns}\sum_{\vec{q}} \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\vec{q}}/kT} - 1}) \simeq M(0)(1 - \frac{\Gamma(\frac{3}{2})\zeta(\frac{3}{2})}{4\pi^2 s^{\frac{5}{2}}}(\frac{kT}{J})^{\frac{3}{2}}). \tag{9.108}$$

Denne karakteristiske temperaturafhængighed af magnetiseringen er også i overensstemmelse med eksperimenter.

9.5 Hulrumsstrålingen

Ud fra bestemmelsen af varmekapaciteten af faste stoffer ved lave temperaturer er det en enkel sag at finde middelenergien og varmekapaciteten af hulrumsstrålingen. Vi skal blot erstatte lydhastigheden s i (9.87) med lyshastigheden c og desuden gange højre side med 2/3 for at tage hensyn til, at det elektriske felt i en plan elektromagnetisk bølge står vinkelret på udbredelsesretningen og altså ikke kan være longitudinalt polariseret som gittersvingningerne. Dette vil nu blive nærmere begrundet.

En plan elektromagnetisk bølge er ledsaget af et elektrisk felt $\vec{E}$, der i vor komplekse notation skrives som

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega t}. \tag{9.109}$$

Forskellen mellem (9.109) og (9.65) er, at mens gittervektoren $\vec{R}$ kun antager diskrete værdier, er det elektriske felt $\vec{E}$ defineret overalt i rummet. Bølgevektoren $\vec{k}$ er derfor ikke opadtil begrænset, svarende til en dispersionsrelation, der for alle $\vec{k}$ er givet ved

$$\omega = ck. \tag{9.110}$$

[3]Det gælder, at $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$, mens $\zeta(5/2) = 1,341$.

Herved kommer hulrumsstrålingen til at svare til den situation, vi har beskrevet ovenfor i forbindelse med bestemmelsen af faste stoffers varmefylde ved lave temperaturer, hvor q-integrationen blev udstrakt til uendelig, jvf. (9.84). Mens denne fremgangsmåde for faste stoffer repræsenterer en tilnærmelse, hvis gyldighed er begrænset til lave temperaturer, er den eksakt for hulrumsstrålingen, hvis dispersionsrelation altid er givet ved (9.110), uanset hvor kort bølgelængden er. Som nævnt er der imidlertid kun to lineært uafhængige polarisationsvektorer for det elektriske felt. Årsagen til dette er, at det elektriske felt i det tomme rum skal være divergensfrit. Fra Coulombs lov ved vi, at det statiske elektriske felt omkring en punktladning q er givet ved

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r^3}\vec{r}, \tag{9.111}$$

hvor $\vec{r}$ er stedvektoren regnet fra den betragtede punktladning. Dette felt er tydeligvis ikke divergensfrit, da fladeintegralet af $\vec{E}$ over en kugleskal med centrum i punktladningen er forskelligt fra nul. Når der ikke er punktladninger tilstede, gælder det imidlertid at divergensen er nul,

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0. \tag{9.112}$$

Heraf ses umiddelbart ved indsættelse af (9.109), at $\vec{E}$ står vinkelret på $\vec{k}$.

Vi er nu i stand til at angive frekvensfordelingen for det elektromagnetiske felt ved at forestille os strålingen indelukket i et volumen V under benyttelse af periodiske grænsebetingelser. Herved bliver antallet $g(\omega)d\omega$ af svingninger med angulær frekvens mellem ω og $\omega + d\omega$ givet ved (jvf. (9.82))

$$g(\omega)d\omega = 2\frac{V}{(2\pi)^3}4\pi k^2 dk = \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3}d\omega, \tag{9.113}$$

hvoraf middelenergien $\bar{E}$ bestemmes som

$$\bar{E} = \int_0^\infty d\omega g(\omega)\hbar\omega \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \tag{9.114}$$

Ved sammenligning med (9.84) ses (9.114) at være identisk med denne på nær faktoren 2/3 og erstatningen af lydhastigheden s med lyshastigheden c.

9.5.1 Universets baggrundsstråling

Det bemærkelsesværdige ved Planckformlen (9.76) er, at det alene er temperaturen, der bestemmer fordelingen på frekvenser. Vigtigheden af denne opdagelse og den naturkonstant $\hbar$, som den gav anledning til at indføre, kan vanskeligt overvurderes. For at vise dens betydning på et helt andet felt, nemlig kosmologien, skal vi afslutningsvis omtale opdagelsen af universets baggrundsstråling.

Opdagelsen af baggrundsstrålingen fra universet er et eksempel på, hvorledes en uventet iagttagelse, der først tilskrives almindelig støj og uvedkommende effekter, efter kort tid fører til dybtgående ændringer i opfattelsen af vor omverden. Radioteleskoper havde i årtier været uvurderlige kilder til oplysning om universets struktur og udvikling, idet galakser ikke blot udsender synligt lys, men også stråling på radiobølgefrekvenser. I 1964 besluttede to amerikanske radioastronomer, Arno Penzias og Robert Wilson, at anvende et radioteleskop, der tidligere havde været brugt til at opfange radiosignaler fra satelitter, til at måle radiobølger fra Mælkevejen. Antennen havde usædvanlig stor følsomhed og var særlig velegnet til at opfange radiobølger, der var ensartet fordelt i retning, og samtidig undgå at modtage signaler fra de mange forskelligartede radiokilder på jorden. Ved at undersøge udstrålingen uden for Mælkevejens plan observerede Penzias og Wilson en ekstra radiostøj, som de umiddelbart hverken kunne identificere eller eliminere, idet den var uafhængig af retning og årstid. Den observerede stråling viste sig i løbet af kort tid at have vidtrækkende kosmologisk betydning som et signal fra det 'Big Bang', hvormed verdensrummets udvikling menes at være begyndt.

Ved senere målinger af baggrundsstrålingen på forskellige bølgelængder blev det klart, at strålingens energi er fordelt ganske som strålingen fra et sort legeme, (9.114). Penzias' og Wilsons oprindelige måling blev foretaget ved bølgelængden 7,35 cm, i det klassiske område, hvor $\hbar\omega$ er meget mindre end kT. De seneste sattelitmålinger fra januar 1990 viser, at baggrundsstrålingen med meget god tilnærmelse svarer til stråling, der er i ligevægt, og hvis temperatur er $2,735 \pm 0,06$ K. Ved temperaturer på 3 K er bølgelængder på omkring 1 mm dominerende, som man kan se af (9.114) ved at bestemme integrandens maksimum. I universets nuværende fase viser denne temperatur, at den oprindelige stråling hidrørende fra 'Big Bang' er afkølet fra meget høje temperaturer til 3 K. Observationen af en strålingstemperatur

på 3 K gør det muligt at regne tilbage til universets tidlige historie med resultater, der stemmer overens med andre, heraf uafhængige observationer.

9.6 Opgaver

OPGAVE 9.1

Elektroner kan bevæge sig på overfladen af flydende helium. Et sådant system af elektroner kan med god tilnærmelse beskrives som en ideal gas, der bevæger sig i to dimensioner. Gassen, der består af N elektroner med masse m, tænkes indeholdt i et kvadrat, hvis sidelængde er L. Sammenhængen mellem en elektrons energi ϵ og bølgevektor (k_x, k_y) er

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2). \tag{9.115}$$

a) Bestem Fermienergien, udtrykt ved de opgivne konstanter, og find dens værdi i tilfældet $N/L^2 = 10^{10}\text{cm}^{-2}$.

b) Find grundtilstandsenergien for elektronsystemet og sammenlign med (9.6).

OPGAVE 9.2

I 1907 viste Einstein, hvorledes Plancks kvantehypotese kunne forklare, at de faste stoffers varmefylde aftog med faldende temperatur. Einstein benyttede en simplificeret model for gittersvingningerne, idet han antog, at alle atomer i et fast stof oscillerer med samme angulære frekvens ω_0. I denne opgave skal vi udføre Einsteins beregning og sammenligne udtrykket for varmekapaciteten i Einstein-modellen med resultatet (9.90-91) i Debye-modellen.

a) Benyt udtrykket (9.76) for middelenergien af en enkelt oscillator til at finde varmekapaciteten af en krystal bestående af N atomer i Einstein-modellen. Tegn resultatet som funktion af den dimensionsløse parameter T/Θ_E, hvor $\Theta_\text{E} = \hbar\omega_0/k$ og sammenlign med figur 9.5.

b) Find ved høje temperaturer et tilnærmet udtryk for forskellen mellem varmekapaciteten (9.80) i den klassiske grænse og resultatet (9.90-91) (hjælp: opfat Θ_D/T som en lille størrelse og benyt rækkeudviklingen af (9.91) i denne størrelse).

c) Bestem det til b) svarende udtryk i Einstein-modellen. Hvilken sammenhæng skal der være mellem Θ_E og Θ_D, hvis de to udtryk skal stemme overens?

d) I Einstein-modellen er tæthedsfunktionen $g(\omega)$ (jvf. (9.114)) en deltafunktion, $g = A\delta(\omega - \omega_0)$, hvor A er en konstant. Udtryk A ved antallet af atomer N.

OPGAVE 9.3

Benyt lommeregneren til at bestemme funktionen $\epsilon(k)$ (indtast ϵ og find k som arccos). Tegn resultatet som funktion af k i intervallet $-\pi < k \leq \pi$ for forskellige værdier af I (f. eks. 0,1, 0,5, 1, 3, 10, 100).

OPGAVE 9.4

a) Benyt modellen i eksempel 10 til at beregne konstant-energi kurver i to dimensioner (jvf. fig. 9.2) for forskellige energier og forskellige værdier af den dimensionsløse parameter I.

b) Det antages, at der i et bestemt stof er to frit bevægelige elektroner per gitterion (svarende til et grundstof fra anden hovedgruppe i det periodiske system). Forklar kvalitativt ved hjælp af resultatet af a), hvorfor det pågældende stof må forventes at være metallisk snarere end isolerende.

10 Kvantevæsker og superledere

Når almindelige væsker afkøles, størkner de og bliver til faste stoffer. Vand fryser til is ved 273 K, mens flydende kvælstof størkner ved 63 K. Den eneste kendte væske, der ikke størkner ved afkøling, er flydende helium. Dette er en konsekvens af den kvantemekaniske nulpunktsbevægelse i forening med de svage kræfter mellem heliumatomerne, når de er langt fra hinanden.

Da heliumatomet er så let, kræver det meget lave temperaturer, nogle få kelvin, at få bragt luftformigt helium på væskeform. Heliumatomet kan have massetal tre eller fire. Det naturligt forekommende heliumatom, der betegnes ved ^{4}He, har massetal fire, idet kernen rummer to protoner og to neutroner. Den anden isotop er ^{3}He, der kan frembringes ved kernereaktioner, men i øvrigt også forekommer i naturen. ^{3}He-isotopens kerne indeholder to protoner, men kun én neutron. På grund af forskellen i atomernes masse har ^{3}He-væsken et lavere kogepunkt, nemlig 3,2 K, end ^{4}He-væske, der koger ved 4,2 K. For begge væsker gælder det, at kogepunkterne er meget lave. Man udnytter derfor disse væsker til at holde andre stoffer nedkølede ved de respektive kogepunkters temperaturer.

Siden århundredets begyndelse har man været i stand til at fortætte heliumgas til væske. Ved yderligere afkøling af væsken opdagede man det overraskende træk, at ingen af de to heliumvæsker størkner, men forbliver flydende ved de lavest opnåelige temperaturer. Kun hvis væsken udsættes for høje tryk, mere end 25 atmosfærer, kan helium antage en fast, krystallinsk tilstandsform.

Årsagen til, at heliumvæske ikke størkner ved afkøling til selv så lave temperaturer som 10^{-5} K, skal søges i den kvantemekaniske nulpunktsbevægelse. Ved det absolutte temperaturnulpunkt ligger atomerne ikke stille. De bevæger sig i overensstemmelse med de usikkerhedsrelationer, der er omtalt i kapitel 3. Hvis et atom bevæger sig inden for et område, hvis udstrækning er a, må middelværdien af dets kinetiske energi være af størrelsesordenen $\hbar^2/Ma^2$, hvor M er atomets masse. Jo mindre massen er, jo større er derfor nulpunktsenergien. I et fast stof er atomerne begrænsede til at bevæge sig inden for et område, hvis udstrækning er sammenlignelig med atomafstanden eller ca. 10^{-10}m. Netop for helium er den tilhørende nulpunktsenergi så stor, svarende til en temperatur på omkring 10 K, at det

ud fra en energimæssig betragtning er mest fordelagtigt for stoffet at forblive på væskeform.

Denne forklaring rejser imidlertid et nyt problem: hvorfor størkner flydende brint, da brintatomet jo er fire gange lettere end heliumatomet? Forklaringen på dette er, at det på grund af brintmolekylets mangel på kuglesymmetri er lettere for molekylerne at danne en fast tilstandsform, da brintmolekylerne ikke er så let bevægelige mellem hinanden som de kugleformede heliumatomer. Hvis brintmolekylerne sønderdeles, så hvert molekyle bliver til to atomer, vil den resulterende atomare brint udvise træk, der minder om væsken ^{4}He. I det følgende skal vi kun beskæftige os med ^{3}He og ^{4}He, hvis atomer adskiller sig ved at være henholdsvis fermioner og bosoner, idet atomkernen i det første tilfælde har halvtalligt, i det sidste heltalligt spin. At atomart brint i et magnetfelt kan beskrives som en fortyndet gas af bosoner kræver en mere indgående forklaring, og vi skal i denne sammenhæng nøjes med at nævne dette system som ét, der for tiden er genstand for betydelig interesse i lavtemperaturfysikken.

10.1 Superfluiditet

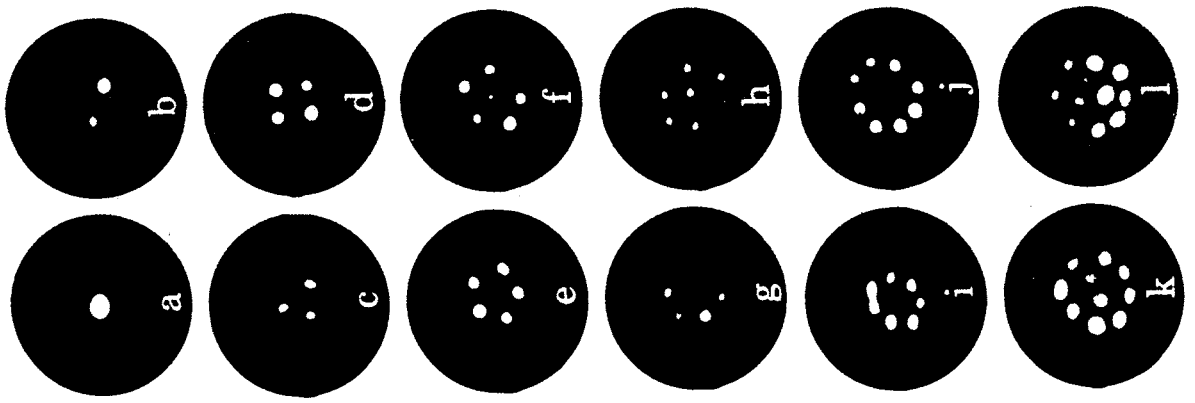
Strømning i sædvanlige væsker som vand eller spiseolie har egenskaber, der kan beskrives ved de klassiske hydrodynamiske ligninger. F. eks. yder væskerne modstand, hvis man forsøger at presse dem gennem snævre rør. Sådanne væsker har en viskositet, der modvirker, at der opstår hastighedsforskelle mellem naboområder i væsken. På samme måde er det viskositeten, der er ansvarlig for, at vand ikke strømmer ud gennem siderne af en porøs lerskål. Selv om der er ganske fine porer i lerskålen, hindrer gnidningsprocesserne, at vandet strømmer ud gennem lerskålens sider. Køler vi imidlertid ^{4}He ned til en temperatur, der ligger under 2,2 K, bliver det pludseligt muligt for væsken at strømme ud gennem selv meget fine porer. Tænker vi os at have flydende helium i en porøs lerskål, vil der ikke ske nogen udstrømning, så længe temperaturen er større end 2,2 K, men når temperaturen sænkes under denne, vil væsken pludselig sprøjte ud gennem porerne. Man siger, at væsken er blevet superflydende.

Viskositeten af den superflydende væske er ikke blot lille, den synes at være præcis nul, så godt det er lykkedes at måle den. Det vil sige, at helium kan strømme helt uden gnidning i den superflydende tilstandsform. Dette medfører en anden overraskende konsekvens: hvis et glasbæger fyldes med heliumvæske og køles ned under 2,2 K, vil den superflydende væske

ganske vist ikke kunne gennemtrænge glasbeholderen, der ikke er porøs. Men helium vil derimod kunne 'kravle' op ad glassets inderside og ned ad dets yderside, når væsken er i den superflydende tilstandsform. Der dannes en tynd film på glassets inder- og yderside, og resultatet er, at glasset tømmes for væske alene på grund af tyngdekraften. Principielt adskiller denne effekt sig ikke fra andre af tyngdekraftens mere velkendte konsekvenser. Det overraskende ved bægerets tømning er den mangel på gnidning, som muliggør en sådan krybende væskebevægelse.

Undersøger man nøjere de gnidningsfri bevægelser, viser det sig, at superflydende helium i virkeligheden er mere kompliceret end først antaget. Mens den superflydende væske uden påviselig gnidning kan strømme ud gennem et lillebitte hul (med en diameter, der kan være så lille som 10^{-6}m), vil andre forsøg udvise gnidningseffekter. Lad os som eksempel tage et forsøg, hvor en flad dåseformet beholder med superflydende heliumvæske roteres om en akse gennem dåsens midte. Forsøget viser, at bevægelsen af superflydende helium i dette tilfælde medfører gnidning i væsken. Resultaterne af de to slags eksperimenter kan kun forenes, hvis vi antager, at superflydende helium består af to væsker, en supervæske, der strømmer uden gnidning, og en normalvæske, hvis bevægelse er ledsaget af gnidning. Forholdet mellem mængden af normal- og supervæske afhænger af temperaturen. Lige under de 2,2 K, hvor helium bliver superflydende, vil næsten al væsken udgøres af normalvæsken, mens det omvendte er tilfældet ved meget lave temperaturer, nær det absolutte nulpunkt, hvor praktisk taget ethvert spor af normalvæsken er forsvundet.

Ved at undersøge varmestrømme i superflydende helium konstaterer man et andet overraskende træk: den normale væske medfører entropi og bidrager altså til varmetransporten, mens supervæsken ikke gør det. Det er som om at supervæsken repræsenterer en fuldkommen, ordnet bevægelse af heliumatomerne. Bevægelsen af normalvæsken er derimod ledsaget af både gnidning og transport af entropi. De to slags væsker er ikke rumligt adskilte og kan gensidigt omdannes til hinanden ved at temperaturen ændres. Når man taler om, at superflydende helium består af to sådanne væsker, er det blot en begrebsmæssig hjælp til at beskrive den superflydende tilstandsform. De to væsker gennemtrænger hinanden på en måde, der ikke svarer til sædvanlige væskeblandinger. Det viser sig, at supervæskens bevægelse kan beskrives ved en art makroskopisk kvantetilstand, altså ved en kvantetilstand, der ikke blot



Figur 10.1: Hvirvelkvanter

karakteriserer en enkelt partikel, men skildrer bevægelsen af alle de ca. 10^{23} atomer, der er indeholdt i en kubikcentimeter flydende helium.

For at gøre dette klart og for indtil videre at lade normalvæsken ude af betragtning tænker vi os en cylinderformet beholder med superflydende helium kølet ned til meget lave temperaturer, f. eks. 50 mK, så vi i praksis kan se bort fra normalvæskens tilstedeværelse. Vi lader så cylinderen rotere om sin længdeakse for at se, om rotationen af væsken giver anledning til en ændring af overfladens form. Som det er kendt fra centrifugering, vil overfladen af en almindelig væske som vand ændre form i et roterende kar. Jo hurtigere vandkarret roterer, jo mere vil vandoverfladen krumme. Hvis det roterende kar indeholder superflydende helium, og karret bringes i langsom rotation, vil væskeoverfladen imidlertid være helt upåvirket, stik imod hvad vi kender fra almindelige væsker. Når rotationshastigheden øges, vil der ved en bestemt hastighed dannes én strømhvirvel inde i væsken. Øges hastigheden yderligere dannes to, dernæst tre strømhvirvler. Det er muligt at fotografere disse strømhvirvler[1], som vist i fig. 10.1. Det bemærkelsesværdige ved hvirvlerne er, at de er kvantiserede. Kvantiseringen ytrer sig i, at hvirvlernes styrke, som defineres nedenfor, er et helt multiplum af et hvirvelkvantum.

Hvirvelbevægelse i væsker er velkendt fra omrøring i en fyldt tekop, der indeholder teblade, eller ved udløb fra et badekar. Idet væskedelenes hastighed v antages at have samme størrelse overalt på en cirkel med centrum i strømhvirvlens akse og radius R, kan vi indføre et mål for for hvirvelstyrken ved at gange hastigheden med omkredsen $2\pi R$. Hvirvelstyrken Γ er altså

[1]E. J. Yarmchuk, M. V. Gordon and R. E. Packard, Phys. Rev. Lett. **43, 214, 1979.**

defineret ved

$$\Gamma = 2\pi Rv. \tag{10.1}$$

Det viser sig, at så længe vi kan se bort fra gnidningsprocesser, vil hvirvelstyrken være uafhængig af cirklens radius.

Forsøget med roterende supervæske (fig. 10.1) viser, at Γ er kvantiseret i enheder af Plancks konstant h divideret med massen M af et ^{4}He-atom,

$$\Gamma = n\frac{h}{M}. \tag{10.2}$$

I praksis ses kun $n = 1$. Hver enkelt hvirvel bærer elementarkvantet for hvirvelstyrke, selv om der i princippet intet er i vejen for, at de seks hvirvler, der er vist på fig. 10.1(f) kunne erstattes med én for hvilken $\Gamma = 6h/M$. Ved at fotografere strømhvirvlerne kan man direkte regne sig frem til størrelsen af Plancks konstant. Har vi f. eks. otte hvirvler svarende til omdrejningsfrekvensen 0,45 s^{-1}, kan h findes af den beregnede sammenhæng mellem omdrejningsfrekvensen, hvirvelkvantet og hvirvlernes målte position. På denne måde kan $\hbar$ bestemmes visuelt med en nøjagtighed på nogle få procent.

^{4}He-atomer er bosoner, da kernespinnet er nul, og de to elektroner befinder sig i en singlet tilstand med totalt spin s lig med nul (kapitel 8). For identiske bosoner skal bølgefunktionen være symmetrisk over for ombytning af to vilkårlige partikler. Derfor er der ikke noget symmetrikrav, der forhindrer alle bosonerne i at være anbragt i samme énpartikelkvantetilstand. Hvis bosonerne ikke vekselvirker, må den laveste energiegentilstand, systemets grundtilstand, fremkomme som en simpel produktbølgefunktion

$$\Psi = \psi_0(1)\psi_0(2)\cdots\psi_0(N), \tag{10.3}$$

idet antallet af bosoner er N, og ψ_0 angiver grundtilstandsbølgefunktionen for bevægelsen af en enkelt boson i det volumen, der indeholder de N bosoner. Da ^{4}He-atomer i deres egenskab af bosoner kan besætte samme énpartikelkvantetilstand, er det nærliggende at knytte forekomsten af superfluiditet til denne kvantetilstand. Er alle partiklerne anbragt i samme kvantetilstand, må væsken kunne bevæge sig ordnet, uden gnidning og uden at medføre entropi. Ydermere kan vi forstå, at forholdet mellem normal- og supervæske i det superflydende

helium afhænger af temperaturen, idet befolkningen af de højereliggende énpartikeltilstande ved endelige temperaturer identificeres med normalvæsken.

Kalder vi antallet af partikler, der besætter tilstanden ψ_0, for N_0, må N_0 være lig med N ved det absolutte temperaturnulpunkt, forudsat at vi ser bort fra vekselvirkningen mellem atomerne. Systemets energi er da NE_0, hvor E_0 er energien hørende til tilstanden ψ_0. Ved høje temperaturer kan vi anvende resultaterne af den klassiske statistiske mekanik til at indse, at middelenergien er $3NkT/2$. Overgangen mellem disse to grænsetilfælde, $T = 0$ K og $T \to \infty$, sker ved, at besætningen af ψ_0 gradvist mindskes. Forholdet N_0/N kan udregnes som funktion af temperaturen ved anvendelse af statistisk mekanik. Det viser sig, at det falder som funktion af temperaturen fra 1 ved $T = 0$ K til 0 ved en bestemt temperatur T_λ. Over T_λ er forholdet nul i den termodynamiske grænse, $N \to \infty$. Udregner man på tilsvarende måde varmefylden, viser det sig, at dens afledede med hensyn til temperaturen er diskontinuert ved $T = T_\lambda$, et resultat, der afspejler at der i denne simple model optræder en faseovergang, der kaldes Bose-kondensation, ved temperaturen T_λ. Den beregnede værdi af T_λ er givet ved

$$kT_\lambda = 3,3\frac{\hbar^2}{M}(\frac{N}{V})^{\frac{2}{3}}. \tag{10.4}$$

Indsætter vi i (10.4) værdierne for partikeltætheden N/V i flydende ^{4}He sammen med de øvrige konstanter fås $T_\lambda = 3,2$ K, et resultat, der ikke er langt fra den observerede overgangstemperatur på 2,2 K. Resultatet (10.4) kunne - på nær den numeriske konstant - være udledt ved en dimensionsanalyse som i afsnit 1.5, idet det er den eneste energi, der kan dannes ud fra konstanterne $\hbar$, M og partikeltætheden N/V. På nær en numerisk konstant er (10.4) det samme udtryk som Fermienergien (9.4) for en elektrongas. Forskellen i størrelsen af den tilhørende karakteristiske temperatur skyldes primært den store forskel mellem elektronens og heliumatomets masse.

Den simple model, som vi har indført for at beskrive superflydende ^{4}He, har altså haft en vis succes. Den har givet os en forståelse af årsagen til den samtidige tilstedeværelse af super- og normalvæske, og den har endda kvantitativt kunnet gøre rede for størrelsen af temperaturen T_λ. Det sidste er imidlertid noget af et tilfælde. Ydermere viser det sig, når man måler varmekapaciteten som funktion af temperaturen, at den ikke udviser et knæk som forudsagt af modellen, men en divergens. der afhænger logaritmisk af $|T - T_\lambda|$. Den eksperi-

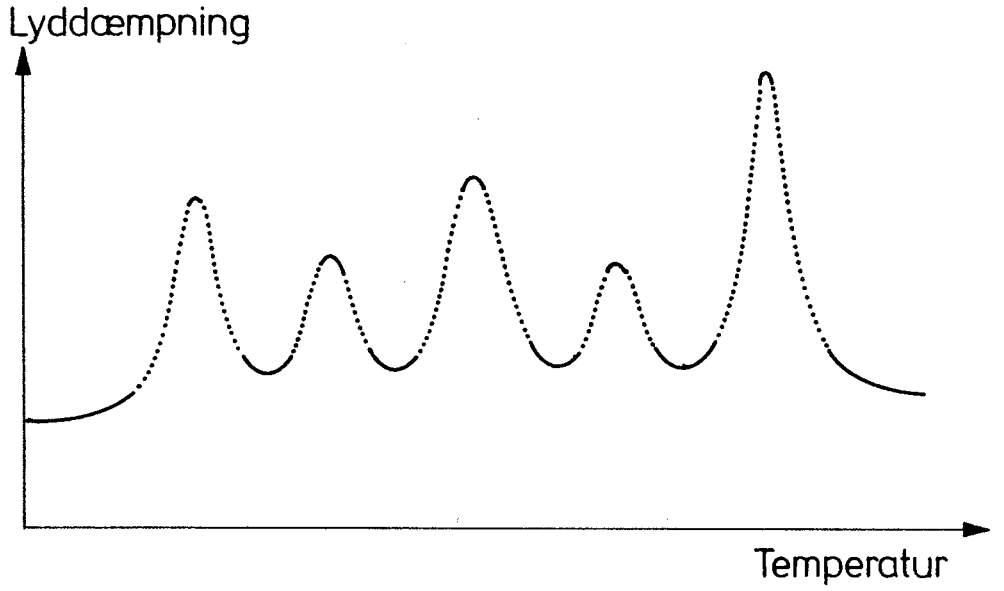
mentelt bestemte varmefyldekurve ligner det græske bogstav λ, hvad der har givet navnet λ-punktet til overgangstemperaturen T_λ. Ligesom den eksperimentelt iagttagne varmefylde adskiller sig betydeligt fra modellens, viser målinger af neutronspredning, at forholdet N_0/N ikke nærmer sig 1 ved lave temperaturer, men i stedet en værdi på ca. $0,1$. Flydende ^{4}He kan hverken kvantitativt eller kvalitativt opfattes som en ideal gas af bosoner, men de ovenstående betragtninger antyder lidt af baggrunden for, at superfluiditet kan beskrives som et makroskopisk kvantefænomen.

Det er nærliggende at sammenligne kvantevæsken ^{4}He med den væske, der udgøres af ^{3}He-atomer, og som også kan være superflydende. Kogepunkternes temperaturer er ikke meget forskellige for de to væsker, 4,2 K for ^{4}He og 3,2 K for ^{3}He, men de temperaturer, hvor væskerne bliver superflydende, er vidt forskellige. ^{3}He på væskeform bliver superflydende ved 2,5 mK, altså en temperatur, der er godt en tusindedel af den temperatur, hvor ^{4}He-væsken bliver superflydende. Superfluiditeten af ^{4}He-væske har været kendt i mere end 50 år, mens superfluiditeten af ^{3}He-væske først blev opdaget i 1972. Den store forskel mellem overgangstemperaturerne for de to væsker skyldes, at ^{3}He-atomet er en fermion, mens ^{4}He-atomet er en boson. Det er derfor ikke uden videre muligt for ^{3}He-atomerne at besætte en fælles kvantetilstand. Hvis de er imidlertid er parvist korrelerede, kan bølgefunktionen for de to spin-1/2 partikler være en singlet (svarende til $s = 0$) eller en triplet (svarende til $s = 1$), jvf. (7.69-70), og parrene kan dermed opfattes som en art bosoner. Det viser sig, at pardannelsen i ^{3}He foregår i en triplet tilstand. For at parbølgefunktionen kan besidde den krævede symmetri over for ombytning af de to fermioner, må den tilhørende rumlige bølgefunktion have ulige paritet. De eksperimentelle iagttagelser af ^{3}He-væskens usædvanlige egenskaber under overgangstemperaturen gør det muligt at slutte, at kvantetallet l for den relative banebevægelse er 1, så at den rumlige del af parbølgefunktionen skifter fortegn ved ombytning af de to fermioner. Det er i princippet også muligt for ^{3}He-atomerne at danne par, for hvilke spinfunktionen er en singlet. Dette kræver imidlertid, at l er lige. Pardannelse i en tilstand med $l = 0$ (en relativ s-tilstand) er meget ugunstig set ud fra en energimæssig betragtning, da atomernes indbyrdes frastødning ved korte afstande i så fald gør sig stærkt gældende. Målinger af blandt andet kernemagnetisk resonans viser desuden éntydigt, at parbølgefunktionen er en spin triplet.

I det ovenstående har vi indført en bølgefunktion for et par bestående af to ^{3}He-atomer, som om vi kan betragte parrets bevægelse uafhængigt af de andre ^{3}He-atomer. Dette er imidlertid langt fra tilfældet. Selve tendensen til at danne par skyldes en kollektiv effekt, der involverer alle væskens partikler. Der er altså ikke tale om, at ^{3}He-atomerne danner molekyler, hvis bevægelse enkeltvis kan opfattes som værende uafhængig af de andres. Det viser sig tværtimod, at afstanden mellem to atomer, der er korrelerede, er ca. 100 gange så stor som den gennemsnitlige afstand mellem atomerne i væsken.

Mange forskellige eksperimenter viser direkte eller indirekte pardannelsen i ^{3}He-væsken. Et af de mest slående forsøg består i at sende en lydbølge med en bestemt frekvens igennem væsken og måle lydens dæmpning som funktion af temperaturen. Så længe temperaturen er højere end overgangstemperaturen mellem den normale og superflydende tilstandsform aftager dæmpningen jævnt med temperaturen. Køler man ned under overgangstemperaturen, vil dæmpningen fortsat aftage, indtil den ved en bestemt temperatur pludselig øges voldsomt for derefter igen at falde ned til det sædvanlige niveau ved yderligere afkøling. Størrelsen af den temperatur, hvor dæmpningen øges voldsomt, er bestemt af, at den korrelerede bevægelse af parrene kan foregå i tilstande med forskellig energi hørende til forskellige impulsmomentkvantetal. Den laveste tilstand er en $j = 0$ tilstand, der svarer til at det samlede impulsmoment hidrørende fra både spin og banebevægelse er nul. Det er imidlertid også muligt for parrene at bevæge sig med et samlet impulsmoment svarende til $j = 2$, idet kvantetallet s for parrets spin og kvantetallet l for den relative banebevægelse begge er 1. Som vi har set i kapitel 7, medfører dette, at det totale impulsmomentkvantetal j kan antage værdierne 0, 1 eller 2. Tilstande med $j = 2$ er karakteriseret ved en energi, der er større end energien hørende til $j = 0$. Den kraftige forøgelse af dæmpningen sker ved den temperatur, hvor forskellen mellem de to energier netop er $\hbar\omega$, hvor ω er lydbølgens angulære frekvens. Energien $\hbar\omega$ afhænger naturligvis ikke af temperaturen. Derimod bliver energiforskellen mellem tilstandene hørende til $j = 2$ og $j = 0$ større, jo flere par, der er anbragt i en fælles kvantetilstand, og derfor større, jo lavere temperaturen er. Tilpasningen mellem energiforskellen og $\hbar\omega$ kan derfor kun tilvejebringes ved én bestemt temperatur.

En endnu mere dramatisk illustration af de makroskopiske kvantefænomener fås ved at anbringe væsken i et magnetfelt vinkelret på lydbølgens udbredelsesretning og måle dæmpningens



Figur 10.2: Lyddæmpning i et magnetfelt

temperaturafhængighed.[2] Herved deles det skarpe maksimum for dæmpningen op i fem toppe svarende til hver af de tilhørende værdier af kvantetallet m, $m = -2, -1, 0, 1, 2$ (fig. 10.2). Afstanden mellem toppene øges med voksende magnetfelt, men drejes magnetfeltet ind i bølgens udbredelsesretning smelter de fem toppe igen sammen til én.

Superfluiditeten af kvantevæsken ^{3}He har mange træk til fælles med superledningen i metaller. Metalelektroner er fermioner og kan, som vi skal omtale i det følgende afsnit, også danne par. Den væsentligste forskel mellem på den ene side ^{3}He og på den anden side hovedparten af de kendte superledende materialer er imidlertid, at elektronparrene i disse udgør en singlet.

10.2 Superledning

En lang række metaller mister ved afkøling til lave temperaturer deres elektriske modstand. Ved disse temperaturer gælder Ohms lov altså ikke. Ledningsevnen er uendelig, og man har iagttaget at permanente strømme kan løbe rundt i en ringformet leder i årevis, uden at der optræder spændingsforskelle i ringen. Sådanne vedvarende strømme kan blandt andet bruges til at frembringe stabile magnetfelter. Blandt grundstofferne har niobium den højeste

[2]O. Avenel, E. Varoquaux and H. Ebisawa, Phys. Rev. Lett. **45**, 1952, 1980.

overgangstemperatur, nemlig 9,2 K. Indtil 1986 var den højeste kendte overgangstemperatur for legeringer 23 K, men siden er der sket et gennembrud i udforskningen af superledende materialer med høje overgangstemperaturer. Det har vist sig, at superledning kan forekomme i blandinger af f.eks. Ba, Y, Cu og O ved temperaturer, der er så høje som 90 K. For tiden er den højeste almindeligt accepterede overgangstemperatur målt til at være 125 K, men ingen tør i dag spå om, hvor den øvre grænse ligger.

Superledning blev første gang observeret af Kamerlingh Onnes i Leiden i 1911 under forsøg med afkøling af kviksølv. Iagttagelsen af fænomenet beroede på noget af en tilfældighed, idet Kamerlingh Onnes på det tidspunkt var interesseret i at undersøge egenskaberne af helium på væskeform. Den målte modstand som funktion af temperaturen viste klart, at der var tale om et helt nyt fænomen. Ikke blot faldt modstanden til en værdi, der i praksis var nul inden for målenøjagtigheden, men det temperaturområde, hvorover ændringen skete, var også meget snævert, og kunne - som senere målinger viste - indsnævres betydeligt ved forbedring af forsøgsomstændighederne.

Der er åbenbart tale om en faseovergang fra en normalt ledende til en superledende tilstandsform. Faseovergangen er nært beslægtet med overgangen til den superflydende tilstandsform i kvantevæsken ^{3}He. F. eks. observerer man i begge tilfælde, at varmekapaciteten er diskontinuert ved faseovergangen. Ved overgangen til den superledende fase i metaller springer elektronernes bidrag til varmekapaciteten til en værdi, der er 2-3 gange så stor som værdien i normaltilstanden lige over overgangstemperaturen. Som funktion af temperaturen varierer elektronernes varmefyldebidrag lineært i normaltilstanden (jvf. kapitel 9), mens det i den superledende fase ved temperaturer langt under overgangstemperaturen T_c aftager eksponentielt med aftagende temperatur. En tilsvarende temperaturafhængighed kan iagttages i kvantevæsken ^{3}He. Selvom værdien af elektronbidraget til varmefylden lige over T_c kan være meget forskellig for de forskellige superledende metaller, er forholdet mellem springet i varmefylden ved T_c og selve varmefylden lige over denne temperatur stort set det samme, 1,4 for Al, 1,7 for In og 1,6 for Sn. For Pb har man målt den største afvigelse, idet forholdet i dette tilfælde er 2,7, mens forholdet i ^{3}He varierer fra 1,4 ved lave tryk til omkring 2 ved 34 atmosfærer, hvor væsken bliver fast. Dette antyder, at vi har at gøre med et universelt fænomen, og var en del af baggrunden for den teori for superledning, som i 1957 blev fremsat

af de amerikanske fysikere Bardeen, Cooper og Schrieffer (BCS). Deres teori, som hurtigt blev teorien for superledning, gav en værdi på 1,43 for det omtalte forhold, og det har siden været muligt at forklare også de målte afvigelser fra denne værdi ved generalisationer af BCS-teorien. Hvorvidt de nye superledende materialer kan beskrives inden for rammerne af denne teori er indtil videre et åbent spørgsmål. BCS-teorien viser, hvorledes man på konsistent måde kan beskrive den superledende tilstandsform ved de parkorrelationer, der er omtalt ovenfor. Parkorrelationerne skyldes, at der udover Coulombkræfterne også virker tiltrækkende kræfter mellem elektronerne hidrørende fra udveksling af fononer, med det resultat, at systemets grundtilstand udgøres af par, hvis bølgefunktion er en spin-singlet.

Et andet karakteristisk træk ved superledere er deres magnetiske egenskaber. Normale metaller udviser, når de anbringes i et ydre magnetfelt, en svag magnetisering, der er rettet langs det ydre felt. Superledere får derimod en så stor magnetisering modsat rettet det ydre felt, at feltlinjerne for den magnetiske induktion $\vec{B}$ slet ikke går igennem det indre af superlederen. Dette fænomen kaldes Meissner-effekten og indtræder også, hvis vi køler et normalt metal i et ydre magnetfelt ned til så lave temperaturer, at metallet bliver superledende. Når en vedvarende strøm løber rundt i en ring, kan man observere, at den magnetiske flux gennem det indre af ringen er kvantiseret i enheder af $h/2e$. Ifølge Meissner-effekten kan fluxen ikke gå gennem selve ringen, men nok igennem dens indre. På samme måde som kravet om éntydighed af bølgefunktionen (7.10) førte til kvantisering af impulsmomentets komposant langs en given akse, viser det sig, at éntydigheden af parbølgefunktionen medfører kvantisering af fluxen Φ ifølge

$$\Phi = n\frac{h}{2e},\ n = 1, 2, \cdots. \tag{10.5}$$

At den målte fluxkvantisering er i overensstemmelse med (10.5) og altså involverer $2e$ og ikke e, er en direkte demonstration af parkorrelationernes betydning for forekomsten af superledning.

11 Atomets kerne

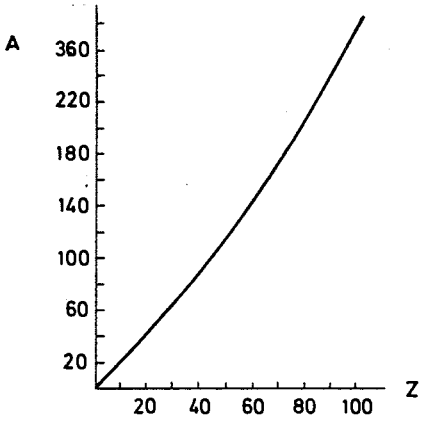
Vi omtalte i kapitel 1, hvorledes den engelske fysiker Ernest Rutherford i begyndelsen af århundredet havde vist, at den overvejende del af atomets masse er samlet i en positivt ladet kerne. Atomkernens struktur og dynamik spiller normalt ingen rolle, når vi som i de foregående kapitler ønsker at beskrive kemiske processer, atomers lysudsendelse eller metallers og halvlederes karakteristiske egenskaber. I sådanne sammenhænge er det tilstrækkeligt at behandle kernen som et matematisk punkt, hvori atomets masse er samlet. Den naturlige radioaktivitet afspejler, at kernen ikke er strukturløs, ligesom udnyttelsen af atomenergi (der burde betegnes som kerneenergi) viser, at kernens rolle ikke altid kan være så passiv, som de forudgående kapitler antyder.

Når man i mange sammenhænge kan se bort fra kernens struktur og dynamik, skyldes det, at de energier, der er involveret i kerneprocesser, er langt større end dem, der karakteriserer atomare processer. Tilsvarende er de karakteristiske afstande langt mindre. I kapitel 1 så vi ved at tage udgangspunkt i den elektrostatiske tiltrækning mellem elektron og proton, at atomernes karakteristiske udstrækning er 10^{-10} m. Atomkernens radius er derimod af størrelsesordenen 10^{-15} m. Selv om det også i kernen er vigtigt at tage hensyn til de elektrostatiske kræfter, må der virke andre kræfter foruden de frastødende Coulombkræfter mellem de positivt ladede protoner. Ellers kunne kernen ikke være stabil.

11.1 Kernekræfter

Den simpleste atomkerne er brintkernen, der blot består af en enkelt proton. Den næstsimpleste er deuteriumkernen, der har samme elektriske ladning som brintkernen. Deuterium er en isotop af brint, idet kernens ladning er den samme som brintkernens (nemlig elementarladningen e), mens dens masse er omtrent dobbelt så stor. Årsagen til denne forskel er, at kernen foruden protonen også indeholder en neutron.

Neutronen blev opdaget af den engelske fysiker James Chadwick (1891-1974) i 1932 ved et eksperiment, hvor beryllium-kerner blev bombarderet med α-partikler med det resultat, at der blev dannet neutrale partikler. Siden begyndelsen af tyverne havde man haft formodninger om, at atomets kerne foruden protoner også indeholder neutrale partikler. Kernernes masse og



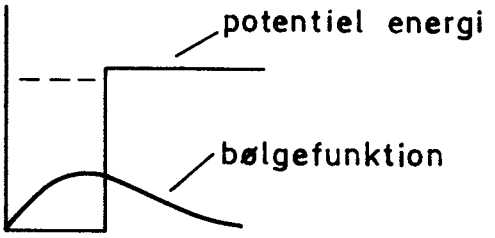
Figur 11.1: Massetal som funktion af kerneladning

ladning havde nemlig vist sig ikke at være proportionale. På fig. 11.1 viser vi sammenhængen mellem kernernes massetal[1] A og ladningstallet Z. Massetallet A udtrykker kernens masse i enheden 1 u ($= 1,660571 \cdot 10^{-27}$ kg), der er defineret som en tolvtedel af den hyppigst forekommende kulstofisotops masse. Ladningstallet Z angiver kerneladningen i enheder af elementarladningen e. Antallet af protoner i kernen er således Z. For de lette kerner er forholdet A/Z tæt på 2, men for tunge kerner som uran er forholdet helt oppe på 2,6.

Eksistensen af neutronen gav nøglen til forståelsen af kernernes stabilitet. Samtidig blev Chadwicks opdagelse, som blev belønnet med Nobelprisen i 1935, indledningen til en periode, hvor elektron og proton ikke længere kunne anses for at være stoffets elementære byggestene, men hvor antallet af såkaldt elementære partikler i løbet af få årtier voksede til flere hundrede.

Brintisotopen deuterium indgår i tungt vand i stedet for almindeligt brint og spiller desuden en vigtig rolle ved fusionsprocesser. I dette afsnit skal vi diskutere årsagen til, at deuteriumkernen er stabil og omtale de kræfter, der holder en neutral og en ladet partikel sammen. Man kan undersøge vekselvirkningen mellem neutron og proton ved spredningsforsøg, hvor neutron og proton sendes mod hinanden med store energier. Som en simpel model for, hvorledes neutron og proton påvirker hinanden, kan vi benytte den potentielle energi afbildet på fig. 11.2, hvor variablen r angiver afstanden mellem proton og neutron. Af fig. 11.2 fremgår, at neutronen og protonen ikke vekselvirker, når de er mere end $2 \cdot 10^{-15}$ m fra hinanden. Den potentielle energi er en 'brønd': først når afstanden mellem proton og neutron er mindre end $2 \cdot 10^{-15}$ m, mærker de hinandens tiltrækning. Ud fra en klassisk

[1] Massetallet er fremkommet som en vægtet middelværdi af massetallene af de naturligt forekommende isotoper.



Figur 11.2: Potentiel energi og bølgefunktion i deuterium

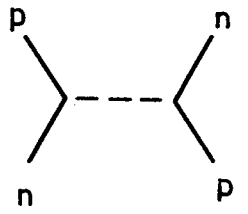
fysisk betragtning ville bindingsenergien (den energi, der skal tilføres for at fjerne proton og neutron fra hinanden) være lig med brøndens dybde, svarende til energien 35 MeV (i kernefysikken måles energier ofte i MeV, der er en forkortelse for en million elektronvolt eller $1,6 \cdot 10^{-13}$ joule). I virkeligheden er bindingsenergien langt mindre, ca. 2 MeV. Forklaringen på denne forskel er, at det ifølge kvantemekanikken koster kinetisk energi at lokalisere partiklerne til et område af udstrækningen a, nemlig ca. $\hbar^2/Ma^2$. Denne energi ses at være af størrelsesordenen 10 MeV, når vi for M indsætter massen af en proton (eller neutron) og benytter, at $a = 2 \cdot 10^{-15}$ m. For at bestemme den laveste energiegentilstand, er det derfor nødvendigt at løse Schrödingerligningen for partiklernes relative bevægelse. Resultatet er skitseret på fig. 11.2, hvor den laveste energiværdi E_g er angivet ved en stiplet linje. Det fremgår, at brønden kun lige akkurat er dyb nok til at kunne binde proton og neutron sammen. Havde brøndens dybde været halv så stor (med uændret udstrækning), ville deuteriumkernen ikke være stabil. Dette illustrerer nødvendigheden af at tage hensyn til kvantemekanikken ved diskussionen af kernernes struktur.

Hvad er årsagen til, at neutronen og protonen tiltrækker hinanden, når de kommer tæt på hinanden? For at belyse dette vil vi først se, hvilken masse, der sammen med naturkonstanterne $\hbar$ og c kan resultere i en længde af denne størrelsesorden.

For en partikel med masse M, der bevæger sig frit uden påvirkning af kræfter, kan vi ikke danne en karakteristisk længde, med mindre vi foruden Plancks konstant $\hbar$ også inddrager lyshastigheden c . Da Plancks konstant har dimension af impuls gange længde, ses størrelsen

$$\frac{\hbar}{Mc} \tag{11.1}$$

at være en længde, i øvrigt den eneste længde, der kan dannes ud fra de tre opgivne størrelser. Hvis denne længde skal være $2 \cdot 10^{-15}$ m, skal M åbenbart være $1,6 \cdot 10^{-28}$ kg eller ca. ti gange så lille som en proton.



Figur 11.3: Udveksling af pion

Den partikel, hvis masse skulle bestemme kernekræfternes rækkevidde, er altså betydeligt lettere end en proton, men meget tungere end en elektron. En sådan partikel blev rent faktisk opdaget i 1946. I dag kaldes den en pion, men tidligere blev den betegnet som en pi-meson. Dens masse er ca. en syvendedel af protonens. Kernekræfterne skyldes udveksling af en pion mellem nukleoner, der er fællesbetegnelsen for protoner og neutroner. Processen, der er vist på fig 11.3, er analog til den udveksling af fononer, der i metaller fører til en tiltrækning mellem to elektroner (kapitel 10).

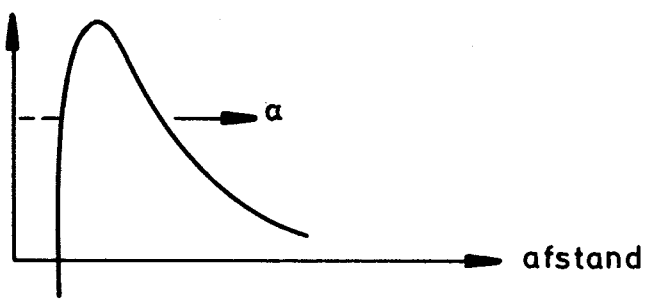
11.2 Kernestabilitet

Den på fig. 11.1 viste sammenhæng mellem massetal og ladningstal repræsenterer en forenkling, da vi ikke har taget hensyn til, at et bestemt grundstof kan optræde som flere forskellige isotoper. Heraf er nogle radioaktive og henfalder under udsendelse af α- β- eller γ-stråling. For et givet Z kan der være flere forskellige værdier af A, der svarer til stabile kerner. Disse kerner indeholder altså det samme antal protoner, men et vekslende antal neutroner. Det er let at forstå, at en kerne med bestemt massetal ikke kan indeholde lutter protoner. Disse frastøder nemlig hinanden på grund af, at de har samme ladning. Tænkte man sig at repræsentere atomkernen ved en ladet kugle (totalladning $Q = Ze$, radius R), kan man benytte elektricitetslæren til at beregne kuglens elektrostatiske energi. Det følger af en dimensionsbetragtning, at energien må være proportional med $Q^2/\epsilon_0 R$. Man finder ved at bestemme det elektriske felt i og uden for kuglen, at den numeriske faktor er 3/5, således at kuglens elektrostatiske energi er $3Q^2/5\epsilon_0 R$. Hvis protonerne kun var påvirkede af den elektrostatiske frastødning, ville de blive slynget fra hinanden øjeblikkeligt, hvis man forsøgte at samle dem i en kerne. I virkeligheden tiltrækker protoner også hinanden, når de er tilstrækkeligt nær ved hinanden. Inden

for afstande, der er af størrelsesordenen 10^{-15} m, vil nukleoner - protoner eller neutroner - tiltrække hinanden, som diskuteret i forrige afsnit. Da neutroner er elektrisk neutrale, vil de ikke bidrage til frastødningen, og kernen vil derfor kunne holde sammen, hvis der er et tilstrækkeligt antal neutroner til stede.

Ifølge dette argument skulle det kunne betale sig at have mange neutroner og få protoner. Men vi ved, at der kun er ganske få stabile isotoper, og at forholdet mellem kernens massetal og ladningstal ligger på mellem 2 og 2,7. Der må altså ikke være for mange neutroner til stede. Forklaringen på dette er, at neutronen er ustabil. Uden for kernen har den fri neutron en middellevetid på 15 minutter. Den henfalder til en elektron og en proton samt en neutrino, en elementarpartikel, der ligesom de andre tre er en fermion, men i modsætning til disse har massen nul. Inden for kernen kan neutronen derimod godt være stabil, fordi det koster ekstra energi at henfalde, hvis kernen indeholder et tilstrækkeligt antal protoner. Årsagen til denne ekstra energi skal søges i, at både neutroner og protoner er fermioner. Det karakteristiske for fermioner er, at der kun kan anbringes én i hver kvantetilstand. Man kan forestille sig kernen fremkomme på den måde, at neutroner og protoner hver for sig fylder de lavestliggende énpartikeltilstande op, ganske som elektronerne fylder énelektrontilstandene op igennem det periodiske system. Er der tilstrækkeligt mange protoner til stede, vil der ikke være plads til den proton, som er neutronens henfaldsprodukt, uden at det koster ekstra energi.

Selv om vi har begrundet, at der hverken må være for mange eller for få neutroner, er det ud fra det foregående ikke klart, hvorfor meget tunge kerner er ustabile. Når man i det periodiske system er nået til grundstoffet uran med 92 protoner i kernen, er alle isotoper af de efterfølgende grundstoffer radioaktive. Det er lykkedes kunstigt at fremstille grundstoffer med over hundrede protoner. Til gengæld er middellevetiden kort: for den kerne, der indeholder 106 protoner og 157 neutroner, er middellevetiden kun 1 s. Forklaringen på dette er, at den elektrostatiske frastødning dominerer energien af de meget tunge kerner. Bidraget til energien er jo proportionalt med $Z^2e_0^2/R$, hvor Ze er kernens samlede ladning, og $e_0^2 = e^2/4\pi\epsilon_0$. Da kernens radius er proportional med massetallet A i potensen 1/3, og dermed med tilnærmelse (jvf. fig. 11.1) til ladningstallet Z i potensen 1/3, $R \propto Z^{1/3}$, vil frastødningens bidrag til kernens energi alt i alt være proportional med $Z^{5/3}$. I modsætning til dette vil kernekræfternes bidrag vokse proportionalt med A (og dermed proportionalt med Z). Det er nemlig kun de



Figur 11.4: Potentiel energi for α-partikel

nukleoner, der er hinandens naboer, der vekselvirker. Kernekræfternes rækkevidde er kort (af størrelsesordenen 10^{-15} m), mens den elektrostatiske kraft har en 'uendelig' rækkevidde: frastødningen mellem alle protonerne bidrager til kernens elektrostatiske energi.

Da den elektrostatiske energi ($\propto Z^{5/3}$) vokser kraftigere end kernekræfternes bidrag ($\propto Z$) vil det, når kernen er tilstrækkelig stor, energimæssigt set kunne betale sig, at kernen går i to stykker. Den elektrostatiske energi af en kugle med Z protoner er jo mere end dobbelt så stor som den elektrostatiske energi af en kugle med $Z/2$ protoner,

$$E_Z - 2E_{Z/2} = (1 - 2^{-2/3})E_Z = 0,37E_Z. \tag{11.2}$$

Det kan derfor betale sig rent energimæssigt for en meget stor kerne at deles i to halvdele. Som vi videre skal omtale nedenfor, udgør denne elektrostatiske energiforskel en væsentlig del af den kerneenergi, der fås ved fission (spaltning) af tunge atomkerner.

11.2.1 Radioaktivitet

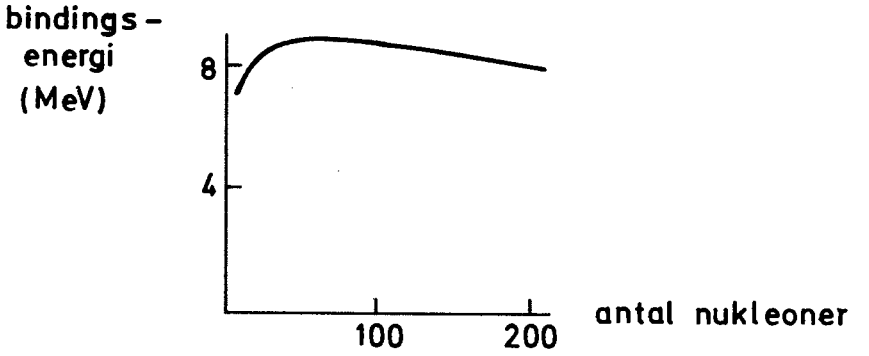
Man kender tre slags radioaktive henfald, der betegnes som α, β og γ-henfald. Som nævnt i det indledende kapitel er α-partikler identiske med ^{4}He-atomets kerne, der består af to neutroner og to protoner. Et α-henfald består i, at heliumkernen slynges ud af den oprindelige kerne, hvis ladningstal derved bliver reduceret med to, mens massetallet også formindskes, svarende til at i alt fire nukleoner er forsvundet. Da både kernen og α-partiklen er positivt ladede, må den potentielle energi hidrørende fra deres vekselvirkning se ud nogenlunde som på fig. 11.4. Når α-partiklen er meget tæt på kernen, bevirker kernekræfterne en tiltrækning. Ved større afstande er det den elektrostatiske frastødning, der dominerer. Hvis vi anskuer problemet ud

fra den klassiske fysik, vil en partikel inden for barrieren aldrig kunne slippe ud, hvis dens energi er mindre end barrierens højde. Ifølge kvantemekanikken er der derimod en endelig sandsynlighed for, at partiklen kan komme uden for barrieren, forudsat at det er muligt for partiklen uden for barrieren at bevæge sig med samme energi som indenfor. Hvis man antager, at bølgefunktionen til et vist tidspunkt beskriver en partikel, der med sikkerhed befinder sig inde i kernen, vil bølgefunktionen udvikle sig i tiden på en sådan måde, at der til et senere tidspunkt er en endelig sandsynlighed for at iagttage partiklen udenfor. Denne tunneleffekt er en ren kvantemekanisk effekt og optræder i mange andre sammenhænge, som vi har set i kapitel 5. Sandsynligheden for et α-henfald afhænger meget stærkt af barrierens højde. Dette er årsagen til, at levetiderne for de forskellige radioaktive grundstoffer udviser så store variationer.

Mens α-henfald består i, at kernen afgiver fire nukleoner og dermed ændrer sin masse betydeligt, er den masseændring, der ledsager β-processer langt mindre. En β-proces består i, at en af kernens neutroner omdannes til en proton og en elektron, således at kernens ladningstal øges med 1 som resultat af processen. De kræfter, der er ansvarlige for β-henfald, er af en helt anden natur end de elektrostatiske kræfter og de stærke kernekræfter. Vi skal omtale dem nærmere i det afsluttende kapitel. Den ved β-henfaldet dannede elektron udsendes fra kernen, da den i modsætning til protonen ikke mærker de stærke kernekræfter. Endelig består de radioaktive γ-processer i, at kernen udsender et elektromagnetisk energikvantum, en foton. Dette kan ske, hvis kernen ikke befinder sig i den lavest mulige energitilstand, ganske som der udsendes en foton fra brintatomet, når der sker en overgang fra én tilstand med bestemt energi til en anden med lavere energi.

11.2.2 Fission og fusion

Fission er et eksempel på en proces, hvor kernen deles i to. I det forudgående har vi begrundet, at kerner med meget store ladningstal er ustabile, fordi den elektrostatiske energi knyttet til protonernes indbyrdes frastødning vokser så kraftigt med Z (som nævnt er den proportional med $Z^{5/3}$). Fissionen, dvs. sønderdelingen, af den uranisotop, hvis massetal er 235 og ladningstal er 92, frembringes ved, at kernen optager en neutron og derefter går i to næsten lige store stykker under udsendelse af neutroner. Processen omdanner noget af urankernens



Figur 11.5: Bindingsenergi per nukleon

bindingsenergi til kinetisk energi af de partikler, der resulterer af processen og dermed - i sidste instans - til varme. At det er betydelige energimængder, der er involveret - langt større end typiske atomare energier - kan indses ved at vurdere størrelsesordenen af energiforskellen (11.2) mellem den elektrostatiske energi af en kerne med ladningstal Z og to kerner med et ladningstal, der er halvt så stort. Da kerneradius er af størrelsesordenen 10^{-15} m, ca. 10^5 gange mindre end atomernes karakteristiske udstrækning, må den elektrostatiske energi (der er omvendt proportional med R) være mindst 5 størrelsesordener større end de karakteristiske atomare energier, der er nogle få elektronvolt. Når man desuden tager hensyn til størrelsen af ladningstallet Z, kan man forstå, at den energi, der frigøres ved en fissionsproces, typisk er omkring 200 MeV.

Hvis man afbilder bindingsenergien af en enkelt nukleon som funktion af kernens ladningstal får man kurven skitseret på fig. 11.5. Det fremgår af denne, at der ikke blot kan vindes energi ved, at en tung kerne sønderdeles (fission), men at der også kan vindes energi ved sammensmeltning af to lette kerner (fusion). Fusionsprocesser er solens energikilde. For at fusion kan forløbe ved sammensmeltning af f. eks. to deuteriumkerner, må kernernes bevægelsesenergi være tilstrækkelig høj til, at den elektrostatiske frastødning mellem de to kerner kan overvindes. I princippet er det muligt for kernerne at trænge igennem barrieren ved tunneleffekt, men sandsynligheden for, at dette sker, er ekstremt lille, med mindre deuteriumkernerne selv har en stor energi. Fusionsprocesser søges derfor fremkaldt ved at gå til meget høje temperaturer. Dette kræver brug af magnetfelter som 'flasker'. Almindelige beholdere vil ikke kunne eksistere ved de meget høje temperaturer, der er nødvendige for at fusionsprocesserne kan foregå.

11.3 De fire kræfter

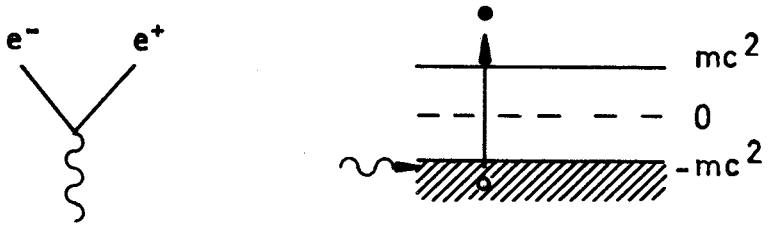
To naturkræfter har været kendt af menneskene siden oldtiden, de elektromagnetiske kræfter og tyngdekraften. De elektromagnetiske kræfter bestemmer, som vi har set i de tidligere kapitler, strukturen af atomer, molekyler og de faste stoffer, der omgiver os. Tyngdekraften er den dominerende kraft over lange afstande mellem elektrisk neutrale legemer som planeterne og solen. Trods dens betydning for vor dagligdag er tyngdekraften en meget svag kraft i sammenligning med de elektromagnetiske kræfter. Hvis vi foruden den elektrostatiske tiltrækning mellem elektronen og protonen i brintatomet tog hensyn til tiltrækningen hidrørende fra tyngdekraften mellem elektron og proton, ville vi finde en relativ korrektion til energierne af størrelsesordenen 10^{-39}.

I dette århundrede har studiet af atomets kerne vist, at der foruden de nævnte kræfter eksisterer endnu to: de stærke og de svage kræfter. Atomkernens neutroner og protoner bliver holdt sammen af de stærke kernekræfter, mens neutronens henfald til en proton og en elektron samt en neutrino er bestemt af de svage kræfter.

I dette afsnit skal vi omtale nogle egenskaber ved disse fire kræfter. Som vi skal se, er der en nær forbindelse mellem kræfter og partikler, idet man opfatter kræfterne som hidrørende fra udveksling af visse partikler mellem andre partikler. Vi har tidligere været inde på dette billede i kapitel 10 i forbindelse med omtalen af elektroner og fononer. Den vekselvirkning, der i metaller giver anledning til superledning, fremkommer ved udveksling af en fonon imellem to elektroner. Tilsvarende så vi ovenfor (afsnit 11.1), at den stærke kernekraft kunne fortolkes som hidrørende fra udveksling af pioner mellem nukleoner.

11.3.1 De elektromagnetiske kræfter

Et elektromagnetisk felt består af fotoner. Fotonen er en partikel, der til forskel fra andre partikler som elektron og proton har massen nul. Desuden er fotonen en boson i modsætning til elektron og proton, der er fermioner. Der kan derfor anbringes mange fotoner i samme kvantetilstand, hvorved det bliver muligt at gå fra den kvantefysiske beskrivelse af det elektromagnetiske felt til den klassiske elektrodynamik. Fotonen kan omdannes til andre partikler. F. eks. kan en meget energirig foton (forudsat at dens energi $h\nu$ overstiger $2mc^2$, hvor m



Figur 11.6: Dannelse af elektron-positron par

er elektronmassen) omdannes til en elektron samt elektronens antipartikel, positronen, der har samme masse som elektronen. At der til enhver partikel hører en antipartikel, er en konsekvens af relativitetsprincippet. Den engelske fysiker P. A. M. Dirac viste i 1930, at antipartikler måtte eksistere som en konsekvens af kravet om relativistisk invarians af kvanteteorien. Diracs relativistiske teori for elektronen fører til eksistensen af løsninger med negativ energi, idet negative energitilstande danner et kontinuum, der begynder ved energien $-mc^2$ og går til minus uendelig (jvf. afsnit 1.7.5). For at give teorien mening måtte Dirac antage, at disse negative energitilstande var besat med elektroner. Det tomme rum udgøres i dette billede af en uendelig sø af elektroner, der fylder tilstandene med negativ energi op. En positron fremkommer ved, at én af disse elektroner fjernes fra denne sø, således at der fremkommer en elektron og et 'hul', en positivt ladet partikel. Med andre ord, et lyskvant med en energi $h\nu$, der overstiger $2mc^2$, kan skabe en positivt ladet partikel ved at tilføre en af elektronerne i søen så meget energi, at den frigøres og efterlader et hul i den uendelige sø af negativt ladede partikler. En foton kan altså omdannes til et partikel-hul par, en elektron og en positron. Processen er illustreret ved et såkaldt Feynman-diagram på fig 11.6. Eksistensen af elektronens positivt ladede antipartikel, positronen, blev påvist i den kosmiske stråling af amerikaneren Carl David Anderson i 1932.

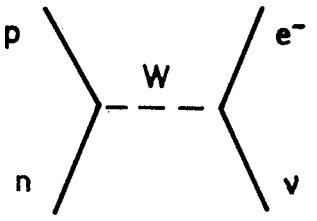
Teorien for de elektromagnetiske kræfter, den såkaldte kvanteelektrodynamik, kan bygges op ved konsekvent at opfatte vekselvirkningen mellem ladede partikler som hidrørende fra udveksling af fotoner. Hermed er der givet bestemte regler for, hvorledes bidraget fra de forskellige mulige processer beregnes. På grund af eksistensen af en lille parameter, finstrukturkonstanten α, der blev indført i ligning (1.35), er det muligt systematisk at bestemme, hvorledes de forskellige processer bidrager til målelige størrelser. Som eksempel kan vi nævne

det såkaldte Lamb-shift, der er betegnelsen for energiforskellen mellem to bestemte tilstande i brintatomet. De to tilstande hører begge til kvantetallet $n = 2$ i brintatomet og har ifølge Diracs relativistiske teori den samme energi. Ifølge kvanteelektrodynamikken, der tager hensyn til processer som den, der er vist på fig. 11.6, er der imidlertid forskel på de to energier. Den beregnede energiforskel ΔE kan udtrykkes som $\Delta E = h\nu$, hvor frekvensen ν teoretisk er fundet til $\nu = 1057,91$ MHz. Den samme værdi - med tilsvarende nøjagtighed - er bestemt eksperimentelt. Kvanteelektrodynamikken er altså en uhyre nøjagtig teori. Alle dens forudsigelser til dato har kunnet bekræftes med en præcision, der kan involvere otte betydende cifre.

11.3.2 De stærke kræfter

Som nævnt i forrige kapitel har de stærke kernekræfter en kort rækkevidde, så kort, at kernekræfterne mellem protoner og neutroner (under ét nukleoner) kun kommer i spil, når nukleonernes indbyrdes afstand er af størrelsesordenen 10^{-15} m. Som nævnt kan man opfatte den stærke kraft som hidrørende fra, at to nukleoner udveksler en pion, på samme måde som kræfterne i elektrodynamikken hidrører fra udveksling af fotoner. I modsætning til kvanteelektrodynamikken er der imidlertid ikke nogen lille parameter, der karakteriserer denne vekselvirkning. Indfører man en koblingskonstant g i analogi med størrelsen e_0 i kvanteelektrodynamikken, viser det sig, at $g^2/\hbar c$, der svarer til finstrukturkonstanten, bliver af størrelsesordenen 1. Der eksisterer derfor ingen systematisk måde at behandle de mange forskellige mulige processer på.

Selv om man ikke er i stand til at regne fysiske størrelser nøjagtigt ud, er man kommet langt med hensyn til klassifikationen af de partikler, der vekselvirker stærkt. Ved hjælp af kvark-modellen er det blevet muligt at beskrive de mange hundrede elementarpartikler, der er kendt i dag, ved hjælp af nogle få elementære bestanddele. F. eks. består protonen og neutronen hver af tre kvarker (i forskellige kvantetilstande), mens pionen består af to, en kvark og dens antipartikel. Kvarkerne er fermioner. Forskellige kvarktilstande angives ved et kvantetal, der betegnes som 'flavor'. Tre af de mulige værdier af dette kvantetal betegnes som u (up), d (down) og s (strange), de resterende som b (bottom), c (charm) og t (top). Kvarkerne holdes sammen ved, at de udveksler gluoner, der er 'color'kvanter, idet kvarkerne



Figur 11.7: Udveksling af vektorboson

foruden 'flavor'-kvantetallet også har et 'color'-kvantetal med tre værdier, rød, blå og gul. Mesoner er kvark-antikvark par, mens baryoner (f. eks. proton og neutron) er sammensat af tre kvarker. Kvarkerne har ladning: u-kvarkens ladning er 2/3 gange elementarladningen, mens d- og s-kvarkens ladninger begge er $-1/3$ gange elementarladningen. Protonen består således af uud, neutronen af udd. Kvantekromodynamikken - teorien for de stærke vekselvirkninger - er bygget op som en analogi til kvanteelektrodynamikken. Et af dens mål er at beregne masserne af de kendte baryoner og mesoner (under ét hadroner). I modsætning til kvanteelektrodynamikken kræver dette meget komplicerede numeriske beregninger på grund af, at teorien ikke rummer en lille parameter svarende til finstrukturkonstanten.

Kvarkerne har aldrig været observeret eksperimentelt, da de i modsætning til andre partikler vekselvirker stærkere, jo længere de er væk fra hinanden. De indirekte beviser for deres eksistens er dog så overbevisende, at kvark-modellen, der stammer fra 1964, i dag er universelt accepteret.

11.3.3 De svage kræfter

De svage kræfter blev omtalt tidligere i dette kapitel i forbindelse med diskussionen af neutronens henfald. Vi kan opfatte denne proces som én, hvori der er involveret fire fermioner, nemlig neutron, proton, elektron og neutrino. Vekselvirkningen er illustreret på fig. 11.7. Den stiplede linje antyder, at vekselvirkningen foregår ved, at fermionerne udveksler en partikel, der betegnes som en vektorboson. Eksistensen af vektorbosoner blev påvist i 1983 ved eksperimenter udført på det europæiske kerneforskningscenter CERN af et stort hold af europæiske forskere. For deres afgørende bidrag til denne opdagelse modtog Carlo Rubbia og Simon Van der Meer Nobelprisen i 1984. Der er fundet tre vektorbosoner W^+, W^- og Z^0,

hvis masser svarer til energier på mellem 80 og 90 GeV. Der er altså tale om partikler, der er flere hundrede gange tungere end pionen, og vekselvirkningens rækkevidde er tilsvarende kortere, jvf. (11.1).

I slutningen af tresserne og begyndelsen af halvfjerdserne lykkedes det Abdus Salam, Steven Weinberg og Sheldon Glashow at nå frem til en forenet beskrivelse af de svage vekselvirkninger med de elektromagnetiske. Teorien forudsagde eksistensen af vektorbosoner med de senere fundne masser og blev i 1979 belønnet med Nobelprisen, flere år før teorien nåede sin endelige bekræftelse gennem den eksperimentelle påvisning af vektorbosonernes eksistens. Foreningen af de elektromagnetiske kræfter med de svage er søgt videreført i det, der i dag betegnes som standardmodellen for de elektromagnetiske, svage og stærke vekselvirkninger. Denne model implicerer, at de tre kræfter var én i de første brøkdele af sekunder i verdensrummets udviklingshistorie. Der er derfor i det sidste tiår kommet en nær forbindelse mellem kosmologien og partikelfysikken.

11.3.4 Tyngdekræfterne

Ønsket om at forene de fire kræfter har i de seneste år givet anledning til udviklingen af de såkaldte strengteorier, der i princippet er teorier 'om alt'. Vanskeligheden ved disse teorier er imidlertid, at det ikke synes muligt at efterprøve dem eksperimentelt. For at give en forståelse af, hvori problemet ligger, skal vi minde om den karakteristiske energi, der kan dannes ud fra Plancks konstant $\hbar$, gravitationskonstanten G og lyshastigheden c. Denne Planck-energi er som vist i afsnit 1.5.5 givet ved

$$\sqrt{\frac{\hbar c^5}{G}}. \tag{11.3}$$

Når naturkonstanternes værdi indsættes i dette udtryk, fremkommer en energi, der er ca. 10^{15} så stor som de højeste energier, der kan opnås med eksisterende eller planlagte partikelacceleratorer. Strengteorierne involverer Planck-energien som en karakteristisk skala, men dens størrelse i forhold til de energier, der er til rådighed i laboratoriet, gør det imidlertid meget vanskeligt, måske umuligt, at efterprøve sådanne teorier eksperimentelt.

12 Opgaver

Dette kapitel indeholder syv opgaver med løsning (A-G) samt et antal opgaver, hvis sværhedsgrad svarer nogenlunde til opgaverne ved skriftlig eksamen. Desuden rummer kapitlet eksamensopgaver fra sommer 89, vinter 89-90 og sommer 90.

12.1 Opgaver med løsning

Opgave A.

En partikel med masse m bevæger sig i én dimension. Den potentielle energi er givet ved

$$V(x) = V_1 \text{ for } x < 0; \quad V(x) = 0 \text{ for } 0 < x < a; \quad V(x) = V_2 \text{ for } x > a, \tag{12.1}$$

hvor V_1 og V_2 er positive konstanter. Det antages, at V_1 er større end eller lig med V_2.

1) Opstil Schrödingerligningen til bestemmelse af de stationære tilstande. Angiv to karakteristiske dimensionsløse parametre, der kan dannes ud fra de opgivne størrelser.

I det følgende skal vi udelukkende diskutere eventuelle bundne tilstande, d.v.s. løsninger, for hvilke den tilhørende energi E er mindre end V_2 (og dermed også V_1).

2) Angiv en transcendent ligning til bestemmelse af energien af de bundne tilstande. Diskuter specialtilfældene a) $V_1 = V_2 = \infty$ og b) $V_1 = \infty$, og find i tilfælde b) en betingelse for, at der forekommer en bunden tilstand.

Besvarelse

1) Idet bølgefunktionen hørende til en stationær tilstand skrives på formen

$$\psi = u(x)e^{-iEt/\hbar}, \tag{12.2}$$

skal u tilfredsstille den tidsuafhængige Schrödingerligning

$$\frac{-\hbar^2}{2m}u'' + (V_1 - E)u = 0 \tag{12.3}$$

for $x < 0$,

$$\frac{-\hbar^2}{2m}u'' - Eu = 0 \tag{12.4}$$

for $0 < x < a$, og

$$\frac{-\hbar^2}{2m}u'' + (V_2 - E)u = 0 \tag{12.5}$$

for $x > a$. Med $'$ angives den afledede af funktionen med hensyn til x.

Som dimensionsløse parametre kan vælges

$$v_1 = \frac{2mV_1a^2}{\hbar^2} \tag{12.6}$$

og

$$v_2 = \frac{2mV_2a^2}{\hbar^2}, \tag{12.7}$$

men også andre valg er mulige, f. eks. $v_1 - v_2$ og v_2. Til angivelse af løsningerne under spørgsmål b) indfører vi forkortelserne

$$\kappa_1 = \sqrt{2mV_1/\hbar^2 - k^2} \tag{12.8}$$

og

$$\kappa_2 = \sqrt{2mV_2/\hbar^2 - k^2}, \tag{12.9}$$

hvor $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

b) I området $x < 0$ er løsningen

$$u(x) = Ae^{\kappa_1 x}, \tag{12.10}$$

hvor A er en arbitrær konstant, idet $e^{-\kappa_1 x}$ divergerer for $x \to -\infty$. I området $0 < x < a$ er løsningen

$$u(x) = B\cos kx + C\sin kx, \tag{12.11}$$

hvor B og C er arbitrære konstanter. Endelig er løsningen i området $x > a$ givet ved

$$u(x) = De^{-\kappa_2 x}, \tag{12.12}$$

hvor D er en arbitrær konstant.

Kontinuiteten af u og u' i punktet $x = 0$ giver

$$A = B \tag{12.13}$$

og

$$\kappa_1 A = kC, \tag{12.14}$$

mens kontinuiteten af u og u' i punktet $x = a$ giver

$$B\cos ka + C\sin ka = De^{-\kappa_2 a} \tag{12.15}$$

og

$$-kB\sin ka + kC\cos ka = -\kappa_2 De^{-\kappa_2 a}. \tag{12.16}$$

Ved eliminering af B og C fås da

$$A(\cos ka + \frac{\kappa_1}{k}\sin ka) - De^{-\kappa_2 a} = 0 \tag{12.17}$$

og

$$A(\kappa_1\cos ka - k\sin ka) + \kappa_2 De^{-\kappa_2 a} = 0. \tag{12.18}$$

Ved at eliminere A og D i (12.17-18) fås den søgte transcendente ligning

$$\frac{\kappa_2}{k} = \frac{k\tan ka - \kappa_1}{k + \kappa_1\tan ka}. \tag{12.19}$$

Vi diskuterer nu løsningerne til (12.19) i de to tilfælde a) $v_1 = v_2 = \infty$ og b) $v_1 = \infty$. I tilfælde a) ses (12.19) at medføre $\sin ka = 0$ i overensstemmelse med (4.42). I tilfælde b) fås, at

$$\frac{\kappa_2}{k} = -\cot ka. \tag{12.20}$$

Det skal derfor gælde, at $ka > \pi/2$ og dermed $v_2 > \pi^2/4$, for at der eksisterer en bunden tilstand.

Øvelse. Vis, at (12.19) for $V_1 = V_2$ er i overensstemmelse med (5.10) og den tilsvarende ligning for de ulige løsninger.

Opgave B.

En partikel med masse m bevæger sig i én dimension. Den potentielle energi er givet ved

$$V(x) = \infty \text{ for } x < 0; \quad V(x) = 0 \text{ for } 0 < x < a; \quad V(x) = \infty \text{ for } x > a. \tag{12.21}$$

Vi antager, at partiklen indtil et vist tidspunkt $t = 0$ befinder sig i grundtilstanden hørende til den Hamiltonoperator, hvori den potentielle energi (12.21) indgår. Til tiden $t = 0$ ændres den potentielle energi til

$$V(x) = \infty \text{ for } x < 0; \quad V(x) = 0 \text{ for } 0 < x < 2a; \quad V(x) = \infty \text{ for } x > 2a, \tag{12.22}$$

idet det antages, at ændringen sker så hurtigt, at partiklens bølgefunktion umiddelbart efter tidspunktet $t = 0$ er givet ved grundtilstandsbølgefunktionen hørende til (12.21).

a) Find sandsynligheden p_1 for, at en måling af partiklens energi til et tidspunkt $t > 0$ giver grundtilstandsenergien hørende til (12.22). Bestem tilsvarende sandsynligheden p_2 for, at en måling af partiklens energi giver den næstlaveste energiegenværdi hørende til (12.22). Hvad er sandsynligheden for, at målingen giver et resultat, der er større end den næstlaveste energiegenværdi?

Besvarelse

Grundtilstandsbølgefunktionen hørende til (12.21) er

$$u_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\pi x/a) \tag{12.23}$$

for $0 < x < a$ (ellers nul). Tilsvarende er grundtilstandsbølgefunktionen hørende til (12.22) givet ved

$$v_1(x) = \sqrt{\frac{2}{2a}} \sin(\pi x/2a), \tag{12.24}$$

for $0 < x < 2a$ (ellers nul). Bølgefunktionen svarende til den næstlaveste energiegenværdi hørende til (12.22) er

$$v_2(x) = \sqrt{\frac{2}{2a}} \sin(\pi x/a) \tag{12.25}$$

for $0 < x < 2a$ (ellers nul).

Vi søger absolutkvadratet på koefficienterne a_n i udviklingen

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n v_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \tag{12.26}$$

hvor E_n angiver energiegenværdierne hørende til Hamiltonoperatoren svarende til (12.22). For at bestemme sandsynlighederne skal vi blot finde a_n. Da $\psi(x,0)$ er givet ved $u_1(x)$, er a_n bestemt ved (jvf. (3.20))

$$a_n = \int_0^{2a} dx v_n^*(x) u_1(x) = \int_0^{2a} dx v_n^*(x) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\pi x/a) \Theta(a-x), \tag{12.27}$$

hvor $\Theta(y)$ er 0 for $y < 0$ og 1 for $y > 0$.

Heraf ses, at

$$a_1 = \int_0^a dx v_1(x) u_1(x) \tag{12.28}$$

Tilsvarende er

$$a_2 = \int_0^a dx v_2(x) u_1(x). \tag{12.29}$$

Integralerne er elementære og resulterer i $a_1 = 4\sqrt{2}/3\pi$ og $a_2 = 1/\sqrt{2}$. Heraf fås

$$p_1 = a_1^2 = \frac{32}{9\pi^2} = 0,3603 \tag{12.30}$$

og

$$p_2 = a_2^2 = \frac{1}{2}. \tag{12.31}$$

Sandsynligheden for at måle en energi, der er større end den næstlaveste egenværdi, er $(1 - p_1 - p_2)$ eller 0,1397.

Opgave C.

En partikel bevæger sig i et centralfelt beskrevet ved Hamiltonoperatoren H_0. Desuden påvirkes partiklen af en perturbation H', således at den totale Hamiltonoperator er

$$H = H_0 + H', \tag{12.32}$$

hvor det om H' gælder, at

$$H' = aL_x^2 + bL_y^2 + cL_z^2. \tag{12.33}$$

I udtrykket (12.33) er (L_x, L_y, L_z) operatoren for partiklens baneimpulsmoment divideret med $\hbar$, mens a, b og c er konstanter.

a) Find hvorledes en tre gange udartet p-tilstand spalter op som følge af perturbationen H'.

Besvarelse

Vi udtrykker perturbationen i en basis bestående af tilstande $|lm\rangle$ givet ved $|11\rangle$, $|10\rangle$ og $|1-1\rangle$, idet

$$L_x = (L_+ + L_-)/2 \tag{12.34}$$

mens

$$L_y = (L_+ - L_-)/2i. \tag{12.35}$$

Ifølge (7.51-52) er

$$L_+^2|1-1\rangle = 2|11\rangle, \tag{12.36}$$

og

$$L_-^2|11\rangle = 2|1-1\rangle. \tag{12.37}$$

Tilsvarende gælder det, at

$$L_+L_-|10\rangle = 2|10\rangle, \tag{12.38}$$

og

$$L_+L_-|11\rangle = 2|11\rangle. \tag{12.39}$$

Idet

$$L_x^2 = (L_+^2 + L_-^2 + L_+L_- + L_-L_+)/4 \tag{12.40}$$

og

$$L_y^2 = -(L_+^2 + L_-^2 - L_+L_- - L_-L_+)/4 \tag{12.41}$$

bliver perturbationsmatricen derfor givet ved

$$\begin{pmatrix} \alpha & 0 & \gamma \\ 0 & \beta & 0 \\ \gamma & 0 & \alpha \end{pmatrix} \tag{12.42}$$

hvor $\alpha = c + (a+b)/2$, $\beta = a + b$ og $\gamma = (a-b)/2$. Egenværdierne for matricen (12.42) er $(a+b)$, $(a+c)$ og $(b+c)$, der således angiver ændringerne af det oprindeligt tre gange udartede energiniveau. Hvis $a = b = c$, fås som ventet, at perturbationen ikke splitter energiniveauet, men blot forskyder dette med $2a = 1(1+1)a$.

Opgave D.

Find reflektionskoefficienten R og transmissionskoefficenten T for barrieren givet ved

$$V(x) = 0 \text{ for } x < 0; \quad V(x) = V_0 \text{ for } x > 0, \tag{12.43}$$

hvor V_0 er en positiv konstant, som funktion af partikelenergien $E = \hbar^2 k^2/2m$.

Besvarelse

Vi undersøger først tilfældet $k < k_0$, hvor k_0 er en positiv konstant givet ved

$$V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}. \tag{12.44}$$

Det er endvidere praktisk at indføre κ_1 ved definitionen

$$\kappa_1 = \sqrt{k_0^2 - k^2} \tag{12.45}$$

I området $x < 0$ er løsningen til den stationære Schrödingerligning

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \tag{12.46}$$

mens løsningen i området $x > 0$ er givet ved

$$u(x) = Ce^{-\kappa_1 x}, \tag{12.47}$$

jvf. opgave A ovenfor.

Det ses straks, at $T = 0$, da strømmen hørende til (12.47) er nul. Heraf følger, at $R = 1$. Dette kan også ses eksplicit af betingelserne

$$A + B = C, \tag{12.48}$$

der udtrykker, at bølgefunktionen er kontinuert i $x = 0$, og

$$ik(A - B) = -\kappa_1 C, \tag{12.49}$$

der tilsvarende udtrykker kontinuiteten af den afledede. Tilsammen medfører de to kontinuitetsbetingelser, at

$$\frac{B}{A} = \frac{ik + \kappa_1}{ik - \kappa_1}, \tag{12.50}$$

hvoraf det ses, at $|B|^2/|A|^2 = 1$.

Vi skal nu behandle tilfældet $k > k_0$. De ovenfor fundne løsninger kan anvendes ved blot at indføre substitutionen $\kappa_1 = -ik_1$, med

$$k_1 = \sqrt{k^2 - k_0^2}. \tag{12.51}$$

Herved fås

$$R = |\frac{i(k-k_1)}{i(k+k_1)}|^2 = 1 - \frac{4kk_1}{(k+k_1)^2}. \tag{12.52}$$

Resultatet (12.52) viser størrelsen og energiafhængigheden af såvel R som $T = 1 - R$, idet k_1 er givet ved (12.51), mens $k^2 = 2mE/\hbar^2$. For energier, der opfylder betingelsen $E - V_0 \ll V_0$, er transmissionskoefficienten åbenbart proportional med $\sqrt{E - V_0}$.

Opgave E.

En partikel med masse m bevæger sig i én dimension under indflydelse af den potentielle energi

$$V(x) = 0 \text{ for } |x| < \frac{a}{2}, \quad V(x) = V_0 \text{ for } |x| > \frac{a}{2} \quad , \tag{12.53}$$

hvor V_0 er en positiv konstant. Det antages, at V_0 er så lille i forhold til $\hbar^2/ma^2$, at der kun findes én bunden tilstand, hvis energi betegnes med E.

a) Beregn sandsynligheden p for ved en måling at finde partiklen uden for det klassisk tilgængelige område, når det vides, at partiklen befinder sig i en egentilstand for energi-operatoren svarende til den lavest mulige energi. Det oplyses, at $V_0 = 0,01 \cdot \hbar^2/2ma^2$.

Besvarelse

Bølgefunktionen for partiklen er givet ved (5.7-10). For at bestemme den ønskede sandsynlighed vil vi først finde normeringskonstanterne A, B og C. Kontinuiteten af u medfører, at

$$A = B = e^{\kappa a/2} \cos(ka/2) C. \tag{12.54}$$

Desuden skal bølgefunktionen være normeret, d.v.s.

$$2|C|^2 \int_0^{a/2} dx \cos^2(kx) + 2|A|^2 \int_{a/2}^{\infty} dx e^{-2\kappa x} = 1. \tag{12.55}$$

Ved at udføre integralerne fås

$$|C|^2 a(\frac{1}{2} + \frac{\sin ka}{2ka}) + |A|^2 \frac{1}{\kappa} e^{-\kappa a} = 1. \tag{12.56}$$

Den ønskede sandsynlighed er da

$$p = 2|A|^2 \int_{a/2}^{\infty} dx e^{-2\kappa x} = |A|^2 \frac{1}{\kappa} e^{-\kappa a}. \tag{12.57}$$

Ved brug af (12.54) i (12.56) fås, at sandsynligheden er

$$p = |A|^2 \frac{1}{\kappa} e^{-\kappa a} = \frac{1}{1 + f(k)}, \tag{12.58}$$

hvor

$$f(k) = \frac{ka \sin(ka/2)}{2\cos^3(ka/2)}(1 + (ka)^{-1} \sin ka), \tag{12.59}$$

idet κ kan udtrykkes ved k ifølge (5.10). For at bestemme værdien af f med det opgivne parametervalg benytter vi, at ka er lille, således at rækkeudviklingen $f(k) \simeq k^2a^2/2$ kan anvendes. Herved fås, at f med tilnærmelse er

$$f = \frac{1}{2} k_0^2 a^2, \tag{12.60}$$

idet vi har indført k_0 ved definitionen

$$V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}. \tag{12.61}$$

Da $k_0^2 a^2 = 0,01$ ifølge det opgivne, bliver sandsynligheden altså $p = 0,995$.

Øvelse. Find, hvor meget p ændrer sig ved, at man tager hensyn til næste led i rækkeudviklingen af (12.59).

Opgave F.

En partikel med masse m bevæger sig i et centralfelt givet ved den potentielle energi

$$V(r) = -V_0 e^{-r/a}, \tag{12.62}$$

hvor V_0 er en positiv konstant.

a) Find middelværdien af energien i en tilstand givet ved

$$\psi = Ae^{-r/\alpha}, \tag{12.63}$$

hvor A er en normeringskonstant, som funktion af parameteren α. Begrund, at der eksisterer mindst én bunden tilstand, når $V_0 \gg \hbar^2/ma^2$.

Besvarelse

Operatoren for den kinetiske energi er i polære koordinater givet ved

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2}) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}. \tag{12.64}$$

Hvis den forelagte tilstand er kuglesymmetrisk som (12.63), giver kvadratet på impulsmomentet intet bidrag til middelværdien af den kinetiske energi. Vi får derfor, at middelværdien $< T >$ af den kinetiske energi er

$$< T >= |A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \int_0^\infty dr r^2 e^{-r/\alpha}(\frac{2}{r\alpha} - \frac{1}{\alpha^2})e^{-r/\alpha} \tag{12.65}$$

Middelværdien af den potentielle energi er

$$< V >= |A|^2 V_0 4\pi \int_0^\infty dr r^2 e^{-2r/\alpha} e^{-r/a}. \tag{12.66}$$

Heraf fås, at middelværdien $< H >=< T > + < V >$ af Hamiltonoperatoren er

$$< H >= \frac{\hbar^2}{2m\alpha^2} - \frac{8V_0 a^3}{(\alpha + 2a)^3}, \tag{12.67}$$

idet normeringen af ψ medfører, at

$$|A|^2 = \frac{1}{\pi\alpha^3}. \tag{12.68}$$

Hvis $V_0 \gg \hbar^2/ma^2$ bliver $< H >$ negativ, hvis $\alpha = a$. Ifølge variationsmetoden er den tilhørende værdi af $< H >$ en øvre grænse for energien i grundtilstanden. Der eksisterer derfor mindst én bunden tilstand.

Øvelse. Diskuter tilfældet $V_0 \ll \hbar^2/ma^2$ og skitser $< H >$ for forskellige værdier af forholdet $V_0 ma^2/\hbar^2$.

Opgave G.

En partikel med masse m bevæger sig i én dimension. Den potentielle energi $V(x)$ er givet ved

$$V(x) = V_0(e^{-2x/a} - 2e^{-x/a}), \tag{12.69}$$

hvor V_0 og a er positive konstanter.

a) Vis, at $V(x)$ i området omkring $x = 0$ kan tilnærmes ved et harmonisk oscillatorpotential og find ved hjælp af denne approksimation et tilnærmet udtryk for den laveste og næstlaveste energiegenværdi. Benyt en rækkeudvikling af $V(x)$ omkring $x = 0$ til at finde et kriterium for approksimationens gyldighed.

Besvarelse

I området omkring $x = 0$ kan $V(x)$ approksimeres ved

$$V(x) \simeq -V_0 + V_0\frac{x^2}{a^2}, \tag{12.70}$$

idet

$$e^x \simeq 1 + x + \frac{x^2}{2} \tag{12.71}$$

for $|x| \ll 1$. Kraftkonstanten K hørende til det harmoniske oscillatorpotential er derfor $K = 2V_0/a^2$, og grundtilstandsenergien bliver med tilnærmelse givet ved

$$-V_0 + \frac{1}{2}\hbar\sqrt{2V_0/ma^2}, \tag{12.72}$$

mens den næstlaveste energiegenværdi er

$$-V_0 + \frac{3}{2}\hbar\sqrt{2V_0/ma^2}. \tag{12.73}$$

Approksimationens gyldighed for grundtilstandsenergien kan undersøges ved at finde middelværdien (i grundtilstanden for den harmoniske oscillator) af korrektionsleddet, der er proportionalt med

$$V_0x^3/a^3. \tag{12.74}$$

På nær en numerisk konstant (bestem denne!) hidrører dette korrektionsled fra rækkeudviklingen af $V(x)$ til og med tredje orden. Da bølgefunktionens karakteristiske udstrækning er $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ med $\omega = \sqrt{K/m}$, fås kriteriet

$$\hbar\omega \gg V_0\frac{x_0^3}{a^3} \tag{12.75}$$

eller

$$\hbar^{1/2} \ll (a^2 m V_0)^{1/4}. \tag{12.76}$$

Dette kriterium er imidlertid for strengt. Det er nok, at

$$\hbar \ll (a^2 m V_0)^{1/2}. \tag{12.77}$$

Grunden til dette er, at kriteriet (12.76) ikke tager hensyn til, at middelværdien af x^3 er nul i en energiegentilstand for den harmoniske oscillator. Derfor skal man sammenligne middelværdien af fjerdeordensleddet i rækkeudviklingen med $\hbar\omega$ med resultatet (12.77).

12.2 Opgaver uden løsning

OPGAVE 12.1

I denne opgave betragter vi en partikel med masse m, der bevæger sig i et tredimensionalt harmonisk oscillatorpotential givet ved $V = Kr^2/2$, hvor K er en positiv konstant.

a) Find værdien af det laveste og næstlaveste energiniveau, udtrykt ved de opgivne konstanter. Hvad er udartningsgraden af de to niveauer? Angiv bølgefunktioner hørende til de to energiniveauer (det er ikke nødvendigt at normere disse).

b) Angiv de under a) omtalte energiegentilstande ved brug af Diracs bra-ket notation og forklar betydningen af de anvendte kvantetal. Opskriv en 4×4 diagonal matrix, der har de under a) omtalte egenværdier, og angiv tilhørende normerede egenvektorer (som søjlevektorer).

c) Det antages nu, at partiklens bevægelse i det harmoniske oscillatorpotential perturberes, svarende til at der tilføjes den potentielle energi V' til Hamiltonoperatoren. Udtrykt i polære koordinater er V' givet ved $V'(r, \theta, \phi) = Ar^4 \sin^4\theta \sin^4\phi$, hvor A er en konstant. Benyt første ordens perturbationsteori til at finde ændringen af systemets grundtilstandsenergi. Hvorledes påvirkes det næstlaveste energiniveau af perturbationen?

OPGAVE 12.2

En elektron bevæger sig i et centralfelt, om hvilket det vides, at alle egenværdier for Hamiltonoperatoren svarer til bundne tilstande samt at alle egenværdier E_{nl} er forskellige. Der ses bort fra elektronens spin. Det oplyses, at

$$\int_0^\infty dr r^4 R_{21}^2 = 5a_0^2,$$

hvor a_0 er Bohr-radius og R_{21} er $2p$-tilstandens normerede radialbølgefunktion.

Systemet perturberes af en ydre kraft svarende til perturbationsenergien

$$U = 10^{-3} \frac{z^2}{a_0^2} \text{ eV}.$$

a) Vis, at U er ombyttelig med L_z.

b) Benyt første ordens perturbationsteori til at beregne hvorledes $2p$-niveauet spalter op på grund af perturbationen U. Angiv såvel energier som tilhørende bølgefunktioner for de fundne niveauer.

OPGAVE 12.3

En partikel med masse m bevæger sig i to dimensioner. Hamiltonoperatoren er

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}K(x^2 + y^2) + A(x - y)^2,$$

hvor K og A er positive konstanter.

a) I dette spørgsmål ses der bort fra leddet $A(x - y)^2$ i Hamiltonoperatoren. Angiv energierne hørende til de tre laveste niveauer samt niveauernes udartningsgrad.

b) I dette og det følgende spørgsmål behandles $A(x - y)^2$ som en perturbation. Find grundtilstandsenergien til første orden i A.

c) Benyt første ordens perturbationsteori til at bestemme, hvorledes leddet $A(x - y)^2$ påvirker det næstlaveste energiniveau. Angiv såvel energier som tilhørende uperturberede bølgefunktioner.

d) Vis, at energiegenværdierne hørende til Hamiltonoperatoren H kan bestemmes eksakt ved en passende valgt koordinattransformation, og angiv egenværdierne svarende til de tilnærmede energier fundet i b) og c).

OPGAVE 12.4

I denne opgave betragter vi et brintatom, der er påvirket af et ydre elektrisk felt, hvis feltstyrke kan regnes for konstant. Opgaven går ud på at benytte variationsmetoden til at bestemme, hvorledes grundtilstandsenergien $E_g(\mathcal{E})$ afhænger af den elektriske feltstyrke $\mathcal{E}$.

Vi ser i det følgende bort fra kernens medbevægelse. Hamiltonoperatoren er

$$H = H_0 + e\mathcal{E}z,$$

hvor

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e_0^2}{r}.$$

a) For små feltstyrker er E_g givet ved rækkeudviklingen

$$E_g = E_g(0) + k\mathcal{E}^2,$$

hvor k er en konstant. Benyt første ordens perturbationsteori til at begrunde, at rækken ikke indeholder et led, der er proportionalt med $\mathcal{E}$.

De følgende spørgsmål går ud på at foretage en tilnærmet bestemmelse af k.

b) Vis, at middelværdien af zH_0z er nul i grundtilstanden hørende til Hamiltonoperatoren H_0 (hjælp: udnyt identiteten

$$ABA = \frac{1}{2}(A^2B + BA^2 - [A,[A,B]])$$

for operatorerne A og B).

c) Vi skal nu finde et tilnærmet udtryk for E_g ved at benytte variationsmetoden med prøvefunktionen

$$\Phi = (1 + \lambda z)e^{-r/a_0},$$

hvor a_0 er Bohr-radius. Begrund, at $\lambda = 0$, når feltstyrken er nul. Udregn for $\mathcal{E} \neq 0$ en øvre grænse på grundtilstandsenergien til og med anden orden i $\mathcal{E}$ ved at udnytte resultatet anført i b). Er den således bestemte værdi af k større end eller mindre end den eksakte? Vurder størrelsen af korrektionen til den uperturberede grundtilstandsenergi i tilfældet $\mathcal{E} = 1$ kV/cm.

OPGAVE 12.5

En partikel med masse m bevæger sig i én dimension. Den potentielle energi er givet ved

$$V(x) = -V_0 \frac{1}{\cosh^2(x/a)}, \tag{12.78}$$

hvor V_0 er en positiv konstant.

a) Skitser potentialet og vis, at det for små værdier af x kan tilnærmes ved et harmonisk oscillatorpotential. Angiv bølgefunktionen hørende til grundtilstanden for den harmoniske oscillator og sammenlign bølgefunktionens karakteristiske udstrækning med a. Benyt de opgivne konstanter og $\hbar$ til at angive en betingelse for, at den foretagne tilnærmelse giver en rimelig nøjagtig beskrivelse af de laveste energiniveauer.

b) Vis, at forskellen mellem potentialet (12.78) og det harmoniske oscillatorpotential er proportional med x^4 for små værdier af x og bestem koefficienten til x^4-leddet.

c) Benyt første ordens perturbationsteori til at finde partiklens energi i grundtilstanden, idet det i spørgsmål b) bestemte x^4-led opfattes som en perturbation på Hamiltonoperatoren hørende til den harmoniske oscillator. Hvad er kriteriet for perturbationsregningens gyldighed?

d) Det antages, at V_0 har en sådan størrelse, at der forekommer fire bundne tilstande, alle med forskellig energi. Forklar kvalitativt, hvad der sker med disse bundne tilstande, hvis V_0 gradvist gøres mindre, mens de øvrige parametre holdes fast, og illustrer forklaringen med et par tegninger af energiniveauernes beliggenhed. Skitser energiafhængigheden af tilstandstætheden for energier i den kontinuerte del af spektret i grænsen $E \gg V_0$ (hjælp: det kan antages, at den potentielle energi helt kan negligeres i denne grænse).

OPGAVE 12.6

En partikel med masse m er indespærret i en kugle med radius a svarende til, at den potentielle energi er givet ved

$$V(r) = 0 \text{ for } 0 \leq r \leq a, \quad V(r) = \infty \text{ for } a \leq r < \infty.$$

a) Begrund, at løsningen ψ til Schrödingerligningen kan separeres i polære koordinater, $\psi = R_{El}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ og opstil en ligning til bestemmelse af funktionen $u = rR$. Angiv grænsebetingelserne på u i punkterne $r = 0$ og $r = a$.

b) Find partiklens bølgefunktion og energi i grundtilstanden. Tegn den radiale funktion R hørende til grundtilstanden.

c) Kuglen udvides nu pludseligt, så den får den dobbelte radius. Udvidelsen sker så hurtigt, at bølgefunktionen ikke ændrer sig under denne. Hvad er sandsynligheden for, at en måling af partiklens energi giver den laveste egenværdi for Hamiltonoperatoren hørende til den nye kugle?

OPGAVE 12.7

En partikel med masse m bevæger sig i to dimensioner i en potentialbrønd givet ved

$$V(x, y) = 0 \text{ for } 0 \leq x \leq L, \ 0 \leq y \leq L,$$

mens den potentielle energi er uendelig stor uden for dette område.

a) Find bølgefunktioner og energier for de stationære tilstande. Angiv energi og udartningsgrad for de tre laveste niveauer,

b) Til en vis tid $t = 0$ opgives partiklen at være i en tilstand karakteriseret ved en bestemt bølgefunktion ψ. Det oplyses om denne, at der er sandsynlighed 1/3 for at en måling af partiklens energi giver den lavest mulige værdi, mens der er sandsynlighed 2/3 for at observere en fire gange så stor værdi regnet fra bunden af brønden. Hvad fortæller disse oplysninger om bølgefunktionen? Vis, at den til ψ knyttede sandsynlighedstæthed er periodisk i tiden og bestem perioden.

c) Vi betragter nu den situation, at partiklen i potentialbrønden udsættes for en perturbation svarende til, at der til Hamiltonoperatoren tilføjes leddet $H' = ax^2y^2$, hvor a er en positiv konstant. Benyt dimensionsanalyse til at finde et udtryk for første ordens ændringen af energiniveauerne hidrørende fra H' (på nær numeriske konstanter). Skitser på en tegning, hvorledes grundtilstandsenergien ændres på grund af perturbationen (det er ikke nødvendigt at regne energikorrektionen ud, blot dens fortegn og størrelsesorden fremgår af figuren). Diskuter kvalitativt, hvorledes det næstlaveste og tredjelaveste niveau påvirkes af perturbationen.

OPGAVE 12.8

En partikel med masse m bevæger sig i potentialet

$$V(x) = \infty \text{ for } x < 0; \quad V(x) = \frac{K}{2}(x - x_0)^2 \text{ for } x > 0,$$

hvor K og x_0 er positive konstanter. Opgaven går ud på at undersøge, hvorledes grundtilstandsenergien $E_g = E_g(x_0)$ afhænger af x_0.

a) Find $E_g(0)$ og skitser den tilhørende bølgefunktion.

b) Angiv grænseværdien af E_g for x_0 gående mod uendelig. Formuler en betingelse (ved hjælp af de opgivne konstanter og $\hbar$) for, at E_g er nær ved $E_g(\infty)$.

c) Benyt første ordens perturbationsregning til at finde hældningen af funktionen $E_g(x_0)$ i punktet $x_0 = 0$, idet leddet $-Kxx_0$ behandles som en perturbation, mens der kan ses bort fra $Kx_0^2/2$ (hvorfor?). Skitser på dette grundlag $E_g(x_0)$ som funktion af x_0.

c) Fortsæt $V(x)$ for negative x symmetrisk omkring $x = 0$, således at $V(-x) = V(x)$, hvor $x > 0$. Diskuter hvorledes grundtilstandsenergien afhænger af x_0 og sammenlign med eksempel 9.

OPGAVE 12.9

I denne opgave skal vi undersøge hvorledes bevægelsen af en elektron (masse m, ladning $-e$) i et centralfelt kan påvirkes af et såkaldt krystalfelt, der ikke har sfærisk symmetri.

Elektronens Hamiltonoperator antages at være givet ved

$$H = H_0 + H',$$

hvor

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r),$$

Her er $V(r)$ den potentielle energi svarende til bevægelse i et centralfelt. Krystalfeltet er beskrevet ved perturbationen H' givet ved

$$H' = A(L_x^2 + L_y^2 - 2L_z^2).$$

hvor A er en konstant, mens L_x, L_y og L_z angiver komponenterne af elektronens baneimpulsmoment.

Vi betragter nu et uperturberet niveau med energi E_0 hørende til Hamiltonoperatoren H_0. Niveauet er desuden karakteriseret ved, at impulsmomentkvantetallet l er 2, svarende til en d-tilstand (der ses bort fra spin).

a) Undersøg, om H er ombyttelig med hver af de tre komponenter af impulsmomentet. Er H ombyttelig med kvadratet på impulsmomentet?

b) Find, hvorledes niveauet med den uperturberede energi E_0 spalter op under indflydelse af perturbationen H' (det antages, at forskellen i energi mellem det betragtede niveau og de øvrige centralfeltniveauer er så stor, at vi helt kan se bort fra disse). Angiv udartningsgraden af de opspaltede niveauer.

c) Vi antager nu, at elektronen foruden krystalfeltet er påvirket af et homogent magnetfelt (magnetisk induktion B) i z-aksens retning. Find de fra magnetfeltet hidrørende ændringer af de i b) bestemte niveauer (der tages kun hensyn til led af første orden i B).

OPGAVE 12.10 (EKSAMEN SOMMER 89)

En partikel med masse m bevæger sig i et todimensionalt harmonisk oscillatorpotential $V(x,y)$ givet ved

$$V(x,y) = \frac{1}{2}K_1x^2 + \frac{1}{2}K_2y^2.$$

hvor K_1 og K_2 er positive konstanter.

a) Vis, at Schrödingerligningen kan separeres i koordinaterne x og y. Angiv Hamilton-operatorens egenværdier og de tilhørende egenfunktioner.

b) Angiv energier og udartningsgrad af de tre laveste niveauer for hvert af de to tilfælde i) $K_1 = 2K_2$ og ii) $K_1 = K_2$.

I resten af opgaven betragter vi udelukkende tilfældet $K_1 = K_2 = K$, hvor K er en positiv konstant.

c) Det antages nu, at partiklen yderligere påvirkes af en perturbation H'. Benyt første ordens perturbationsteori til at finde ændringen af partiklens grundtilstandsenergi i hvert af de to tilfælde i) $H' = ax^2y^2$ og ii) $H' = bx^3y^3$, hvor a og b er positive konstanter. Angiv på en tegning, hvorledes det laveste energiniveau påvirkes af perturbationen i hvert af de to tilfælde.

d) Benyt førsteordens perturbationsteori til at finde, hvorledes perturbationen påvirker det næstlaveste energiniveau i hvert af de to tilfælde i) $H' = ax^2y^2$ og ii) $H' = bx^3y^3$. Det er tilstrækkeligt at angive energiændringerne på nær numeriske konstanter (hvis du har god tid, kan du regne disse ud senere). Angiv på en tegning, hvorledes det næstlaveste energiniveau påvirkes af perturbationen i hvert af de to tilfælde.

e) Kan dimensionsanalyse og symmetribetragtninger benyttes som hjælp til at besvare spørgsmål c) og d)? I bekræftende fald, forklar hvordan.

OPGAVE 12.11 (EKSAMEN SOMMER 89)

I denne opgave skal vi undersøge bevægelsen af en elektron i et centralfelt. Bemærk, at spørgsmålene b) og c) er helt uafhængige af a).

Der ses i spørgsmål a) bort fra elektronens spin, og det antages, at elektronen befinder sig i en tilstand, der er egentilstand for kvadratet på elektronens baneimpulsmoment, $\vec{L}^2$. Det oplyses om denne tilstand, at egenværdien for $\vec{L}^2$ er $12\hbar^2$, samt at bølgefunktionens ϕ-afhængighed er givet ved $\cos 3\phi$, hvor ϕ er den sædvanlige azimuthalvinkel svarende til en polarakse langs z-aksen.

a) Hvad er sandsynligheden for, at en måling af impulsmomentets z-komposant giver resultatet $3\hbar$? Hvad er sandsynligheden for, at en måling af impulsmomentets z-komposant giver resultatet 0?

I de to følgende spørgsmål tages der hensyn til elektronens spin $\vec{S}$, og det antages som under a), at elektronen befinder sig i en tilstand, der er egentilstand for såvel Hamiltonoperatoren som kvadratet på elektronens baneimpulsmoment, $\vec{L}^2$. Elektronen vides at befinde sig i en p-tilstand svarende til, at kvantetallet l er 1. Med $|m_l \;\; m_s\rangle$ angives en normeret tilstand, der er egentilstand for L_z med egenværdi $m_l\hbar$ og egentilstand for S_z med egenværdi $m_s\hbar$. Det oplyses, at tilstandene

$$-\sqrt{2/3}|-1 \;\; \tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3}|0 \;\; -\tfrac{1}{2}\rangle \tag{12.79}$$

samt

$$\sqrt{2/3}|1 \;\; -\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{1/3}|0 \;\; \tfrac{1}{2}\rangle \tag{12.80}$$

er egentilstande for $\vec{J}^2$ hørende til samme egenværdi. Her angiver $\vec{J}$ som sædvanlig det totale impulsmoment, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

b) Vis at egentilstandene (12.79) og (12.80) er normerede og bestem egenværdien for $\vec{J}^2$ ved at virke med $\vec{J}^2$ på en af tilstandene. Begrund, at tilstandene (12.79) og (12.80) også er egentilstande for operatoren $\vec{L} \cdot \vec{S}$.

Det antages til slut, at elektronen ud over centralfeltet er påvirket af et ydre magnetfelt, samt at spin-bane koblingen er så stærk, at der kan ses bort fra alle andre tilstande end (12.79) og (12.80). For at tage hensyn til det ydre magnetfelt $\vec{B} = (0, 0, B)$ skal der til Hamiltonoperatoren føjes leddet

$$H' = \mu_B(L_z + 2S_z)B/\hbar, \tag{12.81}$$

hvor μ_B er Bohr-magnetonen.

c) Angiv matricen for H' i den basis, der udgøres af tilstandene (12.79) og (12.80). Diskuter den fysiske betydning af matricens egenværdier.

OPGAVE 12.12 (EKSAMEN JANUAR 1990)

En partikel med masse m bevæger sig i én dimension. Den potentielle energi er

$$V(x) = bx^6, \tag{12.82}$$

hvor b er en positiv konstant. Benyt en dimensionsbetragtning til at finde et udtryk for grundtilstandsenergien (på nær en numerisk konstant).

OPGAVE 12.13 (EKSAMEN JANUAR 1990)

I denne opgave skal vi undersøge bevægelsen af en partikel med masse M i et tredimensionalt harmonisk oscillatorpotential givet ved

$$V(r) = \frac{1}{2}Kr^2, \tag{12.83}$$

hvor r er længden af partiklens stedvektor $\vec{r}$ regnet fra det punkt, hvor den potentielle energi er mindst mulig, mens K er den positive kraftkonstant. Partiklen vides at befinde sig i en tilstand beskrevet ved den normerede bølgefunktion $\psi(\vec{r}, t)$ givet ved

$$\psi = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}\sqrt{3a^3}} e^{-r^2/2a^2}(e^{-3i\omega t/2} + a^{-1}r\cos\theta e^{-5i\omega t/2}). \tag{12.84}$$

Her er θ som sædvanlig polarvinklen (z-aksen er polarakse), og $a = \sqrt{\hbar/M\omega}$ med $\omega = \sqrt{K/M}$.

a) Undersøg, om ψ er en egentilstand for følgende operatorer: i) Hamiltonoperatoren H, ii) kvadratet på baneimpulsmomentvektoren, $\vec{L}^2$, og iii) z-komponenten af partiklens baneimpulsmoment, L_z, og anfør i bekræftende fald den tilhørende egenværdi. Er H, $\vec{L}^2$ og L_z indbyrdes ombyttelige?

b) Find de mulige resultater af en måling af partiklens energi, og bestem sandsynlighederne for at måle disse.

OPGAVE 12.14 (EKSAMEN JANUAR 1990)

En partikel med masse m bevæger sig i tre dimensioner. Den potentielle energi $V(x,y,z)$ er givet ved

$$V(x,y,z) = 0, \quad \text{hvis } 0 < x < L_1,\ 0 < y < L_2,\ 0 < z < L_3;$$
$$V(x,y,z) = \infty \quad \text{ellers.} \tag{12.85}$$

a) Først betragtes det tilfælde, hvor $L_1 = L_2 = L_3 = L$. Bestem energierne hørende til de tre laveste energiniveauer, udtrykt ved de opgivne konstanter, og angiv for hvert niveau udartningsgrad og tilhørende bølgefunktioner. Udregn størrelsen af de tre energier i tilfældet $L = 10^{-10}$ m, når partiklen er en elektron.

b) Vi betragter nu det tilfælde, hvor $L_2 = L_3 = L$, mens $L_1 = 0,99L$. Bestem energierne hørende til de tre laveste energiniveauer, udtrykt ved de opgivne konstanter, og angiv for hvert niveau udartningsgrad og tilhørende bølgefunktioner. Udregn størrelsen af de tre energier i tilfældet $L = 10^{-10}$ m, når partiklen er en elektron.

I resten af opgaven betragter vi udelukkende tilfældet $L_1 = L_2 = L_3 = L$.

c) Det antages, at partiklen yderligere påvirkes af en perturbation H'. Benyt første ordens perturbationsteori til at finde ændringen af partiklens grundtilstandsenergi, når $H' = ax$, hvor a er en positiv konstant. Find tilsvarende ændringen af det næstlaveste energiniveau. Angiv på en tegning, hvorledes de to energiniveauer påvirkes af perturbationen.

OPGAVE 12.15 (EKSAMEN SOMMER 1990)

En partikel med masse m bevæger sig i én dimension. Den potentielle energi er givet ved

$$V(x) = -\frac{ax^2}{\sinh^2(x/b)}, \tag{12.86}$$

hvor a og b er positive konstanter.

a) Skitser potentialet og vis, at det for små værdier af x kan tilnærmes ved et harmonisk oscillatorpotential. Angiv energien hørende til grundtilstanden for den harmoniske oscillator.

b) Benyt de opgivne konstanter og $\hbar$ til at formulere en betingelse for gyldigheden af den under a) foretagne tilnærmede bestemmelse af grundtilstandens energi for potentialet givet ved (12.86).

OPGAVE 12.16 (EKSAMEN SOMMER 1990)

En partikel med masse m bevæger sig i et todimensionalt harmonisk oscillatorpotential $V(x,y)$ givet ved

$$V(x,y) = \frac{1}{2}K_1x^2 + \frac{1}{2}K_2y^2,$$

hvor K_1 og K_2 er positive konstanter. Partiklens Hamiltonoperator H_0 er altså $H_0 = (p_x^2 + p_y^2)/2m + V(x,y)$.

Tilstandsvektoren $|n_1n_2\rangle$ angiver en (normeret) egentilstand for antalsoperatorerne $a_1^\dagger a_1$ og $a_2^\dagger a_2$, med egenværdi henholdsvis n_1 og n_2. Her er annihilationsoperatorerne a_1 og a_2 som sædvanlig defineret ved

$$a_1 = \sqrt{\frac{m\omega_1}{2\hbar}}(x + i\frac{p_x}{m\omega_1}) \tag{12.87}$$

og

$$a_2 = \sqrt{\frac{m\omega_2}{2\hbar}}(y + i\frac{p_y}{m\omega_2}), \tag{12.88}$$

hvor $\omega_1 = \sqrt{K_1/m}$ og $\omega_2 = \sqrt{K_2/m}$.

a) Begrund, at Hamiltonoperatoren H_0 kan skrives på formen

$$H_0 = \hbar\omega_1(a_1^\dagger a_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_2(a_2^\dagger a_2 + \frac{1}{2}) \tag{12.89}$$

og angiv energier, tilstandsvektorer og udartningsgrad for de tre laveste energiniveauer i hvert af de to tilfælde i) $K_1 = K_2 = K$ og ii) $K_1 = 4K_2 = 4K$.

b) I dette spørgsmål betragter vi tilfældet $K_1 = K_2 = K$. Vi antager, at oscillatoren er påvirket af en perturbation H' givet ved

$$H' = B(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1), \tag{12.90}$$

hvor B er en positiv konstant. Benyt førsteordens perturbationsteori til at finde ændringen af i) grundtilstandsenergien og ii) det næstlaveste energiniveau, til første orden i B.

c) I dette spørgsmål betragter vi tilfældet $K_1 = 4K_2 = 4K$. Vi antager som i spørgsmål b), at oscillatoren er påvirket af perturbationen givet ved (12.90). Benyt førsteordens perturbationsteori til at finde ændringen af det tredjelaveste energiniveau, til første orden i B.

d) Vi betragter nu igen tilfældet $K_1 = K_2 = K$. Angiv to lineært uafhængige, ortonormerede tilstandsvektorer, der er egentilstande for såvel H' som H_0, idet det skal gælde, at

egenværdierne for H_0 hørende til de to tilstandsvektorer er ens, lig med $2\hbar\sqrt{K/m}$. Angiv egenværdierne for H' hørende til de to tilstandsvektorer.

OPGAVE 12.17 (EKSAMEN SOMMER 1990)

En partikel med masse m bevæger sig i et centralfelt givet ved den potentielle energi

$$V(r) = -V_0 e^{-r/a}, \tag{12.91}$$

hvor V_0 og a er positive konstanter.

Det oplyses, at partiklen befinder sig i tilstanden beskrevet ved bølgefunktionen

$$\psi = Cre^{-r/\beta}\sin\theta\cos\phi, \tag{12.92}$$

hvor r, θ og ϕ betegner de sædvanlige polære koordinater, mens β er en positiv konstant. Konstanten C er en normeringskonstant.

a) Hvad er sandsynligheden for, at en måling af z-komposanten af partiklens baneimpulsmoment, L_z, resulterer i værdien $\hbar$? Hvad er sandsynligheden for, at en måling af L_z resulterer i værdien $2\hbar$?

b) Bestem middelværdierne $< \vec{L}^2 >$ og $< L_z >$ samt fluktuationerne $< \vec{L}^4 > - < \vec{L}^2 >^2$ og $< L_z^2 > - < L_z >^2$ i den forelagte tilstand (12.92). Undersøg om ψ er en egenfunktion for paritetsoperatoren og angiv i bekræftende fald egenværdien.

c) Find middelværdien af energien i tilstanden (12.92). Resultatet angives som funktion af parameteren β og konstanterne $\hbar, m, V_0$ og a.

d) Det antages i dette spørgsmål, at $\epsilon = \hbar^2/ma^2V_0 \ll 1$. Vis, at den under c) bestemte middelværdi kan antage negative værdier, og skitser middelværdien divideret med V_0 som funktion af β/a.

Litteraturfortegnelse

Der findes et væld af lærebøger i kvantemekanik. Denne fortegnelse er begrænset til fire, der hver på deres måde er blevet klassikere.

1. P. A. M. Dirac: 'Principles of Quantum Mechanics', 4th edition, Oxford University Press 1958 (324 sider).

Førsteudgaven af denne bog er fra 1930. Den er skrevet af en af kvanteteoriens fædre og har været en fortsat kilde til inspiration for senere generationer af fysikere. Den er ikke en lærebog i sædvanlig forstand. Blandt andet indeholder den hverken opgaver eller eksempler. Det bedste udbytte af Diracs bog fås, efter at man på anden måde har erhvervet sig en vis indsigt i kvantemekanik.

2. L. D. Landau og E. M. Lifshitz: 'Quantum Mechanics', 3rd edition, Pergamon Press 1977 (673 sider).

Bogen er tredje bind af Landau og Lifshitz "Course of Theoretical Physics", der er en samlet indføring i den teoretiske fysik uden sidestykke. Selvom det er et fåtal af fysikstuderende, der som lærebøger udelukkende har benyttet "Course of Theoretical Physics", har utallige fysikere på et eller andet tidspunkt hentet resultater fra seriens i alt ti bind. "Quantum Mechanics" er i så henseende en guldgrube, ikke mindst hvad angår kvanteteoriens anvendelser på atomer og molekyler. Dens kortfattede sprogbrug og sammentrængte argumentation kan virke afskrækkende på begynderen. Til gengæld har bogen et væld af delvist gennemarbejdede eksempler, der egner sig godt til selvstudium.

3. L. I. Schiff: 'Quantum Mechanics', McGraw Hill 1964, 1969 [International Student Edition] (544 sider).

Førsteudgaven kom i 1948, men Schiffs klassiker har formået at bevare sin popularitet hos både eksperimentalfysikere og teoretikere verden over. Den er fortrinlig som opslagsværk og samtidig tilstrækkelig detaljeret til at kunne benyttes som elementær lærebog. Dens klare opbygning og præcise sprogbrug har dannet forbillede for senere lærebogsforfattere.

4. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu og F. Laloe: 'Quantum Mechanics', vol. I og II, Wiley 1977 (1524 sider).

Dette tobindsværk adskiller sig fra de tre foregående ikke alene ved sit fysiske volumen, men også ved en større detaljerigdom, ikke mindst hvad angår den matematiske bevisførelse. De to bind indeholder talrige eksempler og opgaver.

Index

ammoniakmolekylet 234

analytisk mekanik 69

annihilationsoperator 57, 91

aksialsymmetri 185

baggrundsstråling 280

barrieretransmission 157

bevægelseskonstant 78, 79

'Big Bang' 280

bindingsenergi 32

Blochs sætning 257

Bohr-radius 13

Bose-kondensation 289

bosoner 29, 226

bra 86

brintatomet 18, 30, 201

bundne tilstande 154

bølgefunktion 21

båndstruktur 163, 256

centralfelt 200

Clebsch-Gordan koefficienter 199

cyklisk koordinat 75

cyklotronfrekvens 35, 173

cylinderkoordinater 186

Debyetemperatur 273

deltafunktion 114

dimensionsanalyse 12, 30

Dirac-ligningen 62, 207

dispersionsrelation 263

egenværdi 27, 82, 102

Ehrenfests sætning 137

Fermibølgetal 251

Fermienergi 251

Fermihastighed 251

fermioner 29, 226

finstrukturkonstant 32

flageolet 17

fluktuationskvadrat 120

fononer 249, 265

forventningsværdi 113, 151

Fourier-transformation 115

fluxkvantum 178, 294

forskydningsoperator 240

fri elektrongas 150

g-faktor 34, 194, 208

gauge 173, 178, 209

gauge-transformation 174, 241

Gaussfunktion 115

generaliseret koordinat 73

generaliseret impuls 75

gitteratomer 249

gittersvingninger 261

gittervarmefylde 267

gravitation 39, 253

grupper 240

grænsebetingelser 55, 142

Guarnerius 16
gyromagnetisk forhold 34
Hall-effekt 181
Hamiltonfunktion 76
    for partikel i magnetfelt 175
Hamiltons ligninger 76
harmonisk oscillator 35, 56
    todimensional 79, 121
Heisenbergs usikkerhedsrelationer 22, 121, 130, 142
heliumatomet 226, 230
Hermite-polynomium 108
^{3}He-væske 284
^{4}He-væske 284
Hilbert rum 101, 106
H^--ionen 230
H_2^+-ionen 239
H_2-molekylet 239
hulrumsstråling 278
hvide dværge 253
hvirvelkvanter 287
identiske partikler 28, 225
impulsmoment 34, 42, 184
    addition 196
    kvantetal 193
    ombytningsrelationer 189
indre produkt
    for harmonisk oscillator 106
kemisk binding 239
ket 86
kanonisk fordeling 268
klassisk grænse 137
    for harmonisk oscillator 139
kontinuitetsligning 157
kuglefunktion 188, 190
kvadratisk integrabilitet 106, 111, 155
kvantebrønd 161
kvante-Hall-effekt 180
kvantevæsker 284
kvarkstruktur 200
kommutator 81
Lagrange-funktion 71
    for partikel i magnetfelt 173
Lagrange-ligningerne 72
Laguerre-polynomier 201
laseren 49
Legendre-transformation 76
lyd 254, 291
lyddæmpning 291
lydhastighed 255, 264
magnetisk moment 34
magnetisering 278
maseren 234
middelværdi 113, 120, 151
molekylspektre 37
molekylstråleepitaksi 161
norm 102
normalsvingning 74, 262
normering 110
observable 150

operator 27, 82
hermitesk 102
symmetrisk 102
unitær 218
paritet 27, 218
paritetsoperator 27, 219
Pauli-matricer 63, 83, 123, 195, 208, 220
Pauliprincippet 250, 251
periodisk potential 256
periodiske grænsebetingelser 111, 145, 148, 257, 258, 263
periodiske system, det 42
permutation 225
permutationsoperator 226
perturbationsteori 131
første orden 222, 232
anden orden 247
tidsafhængig 165
plan bølge 111
Planckfordeling 270
Planck-længde 39
Plancks konstant 9
Poissonfordeling 141
Poisson-parentes 77
polarisation 267, 272, 279
potensrækkemetoden 106, 126
potentialbrønd 154
radialfunktion 200, 204
reduceret masse 201, 217, 236
relativistiske effekter 33, 61, 207
rotation 243
sandsynlighedsamplituder 101, 112, 151
sandsynlighedsstrøm 156
Schrödingerligningen 53, 135
singlet 198, 290
skabelsesoperator 91
spin 45, 194, 207
og permutationssymmetri 226
sammensætning af spin 196
spin-bane kobling 205
stationær tilstand 135
superfluiditet 285
superledning 249, 292
superpositionsprincippet 17, 21, 138
tilstandstæthed 56, 146
translation 240
transmissionskoefficient 160
triplet 198, 290
tunneleffekt 154, 234
udartning 123, 177
usikkerhedsrelationer 22, 121, 142
variationsmetoden 134, 135
varmekapacitet 253, 270, 293
vektorrum 101
virkning 71
Zeeman-effekt 205