

# Kvantemekanik i SRP'en

TORSTEN TRANUM RØMER, Frederiksberg Gymnasium

En gang imellem er der elever fra studieretninger med matematik, fysik og kemi, der i SRP ønsker at skrive om kvantemekanik. Emnet er svært for alle og især for gymnasieelever, der hvis de skal have oplevelsen af at forstå stoffet samt formidle det på et rimeligt niveau, har et meget stort arbejde foran sig. I denne artikel præsenteres en SRP med omdrejningspunkt i kvantemekanikken. Først behandles selve opgaveformuleringen og dernæst bliver en vejledende besvarelse skitseret.

Projektet er møntet på fagene matematik A og fysik A eller B og blev til som en modificeret version af en opgave fra et kursus i kvantemekanik for nanoteknologer på Københavns Universitet. Undervejs i udarbejdelsen rådførte jeg mig med den oprindelige opgaves forfatter, Karsten Flensberg.

## Opgaveformulering

- Redegørelse for grundlæggende begreber inden for den lineære algebra, herunder lineære afbildninger, vektorrum, matrixrepræsentationer af lineære afbildninger, egenvektorer og egenverdier. Redegørelsen skal indeholde både definitioner, sætninger (hvoraf mindst en bevises) og eksempler på udregninger.
- Der ønskes en gennemgang af grundlæggende begreber og sammenhænge inden for kvantemekanik, herunder Hamiltonoperatorer, egenenergi og egentilstande. Hvor det er muligt, skal disse begreber og sammenhænge sættes ind i konteksten af lineær algebra.
- Endeligt ønskes vedlagte opgave løst, og som afslutning skal denne opgave perspektiveres og sættes i sammenhæng med de foregående to punkter.

SRP-projektets kvantemekaniske del ser således ud:

## Spørgsmål A

Vi betragter et system med en elektron, der kan vælge imellem to pladser. Det koster energien  $\varepsilon$  at sidde på hver plads, og der er en energigevinst  $V$  forbundet med, at elektronen hopper mellem pladserne. Systemet kan tegnes således:



Her betyder  $|1\rangle$ , at elektronen befinder sig på plads 1 og  $|2\rangle$ , at elektronen befinder sig på plads 2. Det oplyses, at Hamiltonoperatoren for dette system er:

$$\hat{H} = \varepsilon|1\rangle\langle 1| + \varepsilon|2\rangle\langle 2| - V(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|), \quad V > 0 \quad (1)$$

1. Forklar den fysiske betydning af Hamiltonoperatoren  $H$ .
2. Gør rede for, at egentilstandene for  $\hat{H}$  er

$$|\alpha_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \quad \text{og} \quad |\alpha_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$$

med tilknyttede egenverdier hhv.  $\varepsilon - V$  og  $\varepsilon + V$ .

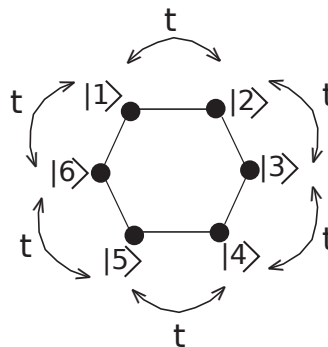
3. Konstruér på baggrund af (1) matricen for Hamiltonoperatoren  $\hat{H}$  og tjek vha. et CAS-værktøj, at denne matrice har de samme egenvektorer, som dem du fandt under pkt. 2

Vink: Nogle CAS-værktøjer kan ikke regne med bogstavmatricer. Er dette tilfældet sæt da  $\varepsilon$  til værdien 1 og  $V$  til værdien 2. Overvej i så fald betydningen for egenvektorer og egenverdier, når dette trick benyttes.

4. Angiv systemets grundtilstand og den tilknyttede grundtilstandsenergi og diskuter i den forbindelse den fysiske betydning af grundtilstanden.

## Spørgsmål B

Inspireret af den simple model, vi lige har behandlet, skal vi se på en anden model, nemlig en model for benzenmolekylet. Benzenmolekylet består af 6 pladser, hvor i alt 6 elektroner (valenselektroner for at være præcis) kan befinde sig. Disse seks pladser benævnes  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle$  og  $|6\rangle$ , og modellen kan illustreres ved følgende tegning.



Hamiltonoperatoren for systemet ser således ud:

$$\hat{H} = -t \cdot (|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 3| + |4\rangle\langle 5| + |5\rangle\langle 4| + |5\rangle\langle 6| + |6\rangle\langle 5| + |6\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 6|)$$

Her er  $t$  den energibesparelse, der er forbundet med at hoppe fra plads til plads. I den model for benzen molekylet, som Hamiltonoperatoren repræsenterer, ses elektronerne altså som kinetiske partikler, hvormed der menes partikler, der minimerer deres energi ved at være i bevægelse.

1. Vis, at matricen for Hamiltonoperatoren er givet ved

$$\hat{H} = t \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad t > 0$$

og kommenter på, hvorfor  $(-1)$ -tallerne står på de givne pladser.

Vink: Lad dig ikke forvirre af de negative fortegn. De skal bare være der, for at Hamilton operatoren indeholder information om, at det er energimæssigt favorabelt for en elektron at hoppe fra plads til plads.

2. Vis at vektorerne

$$|m_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle + |5\rangle + |6\rangle)$$

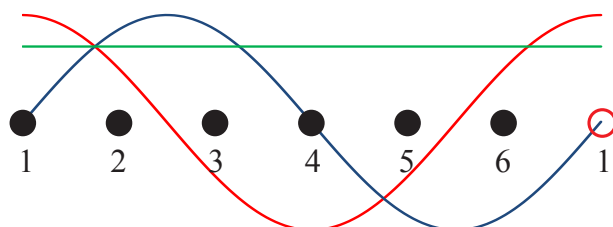
$$|m_1\rangle = \frac{1}{2}(|2\rangle + |3\rangle - |5\rangle - |6\rangle)$$

$$|m_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle - \frac{1}{2}|3\rangle - |4\rangle - \frac{1}{2}|5\rangle + \frac{1}{2}|6\rangle)$$

er egenvektorer for  $\hat{H}$  og bestem de tilknyttede egenverdier.

Vink: Du kan gøre dette enten direkte ud fra  $\hat{H}$  eller ved at omskrive ket-vektorerne til traditionel vektorform i standard basis og gange dem på matricen  $\hat{\mathbf{H}}$ .

3. Diskuter til sidst formen af de tre egenvektorer  $|m_0\rangle$ ,  $|m_1\rangle$  og  $|m_2\rangle$  ud fra figuren herunder.



Figuren viser de tre nederste energitilstande for benzenmolekylet. Da benzenmolekylet indeholder 6 elektroner, vil grundtilstanden derfor være beskrevet ved, at de tre nederste energitilstande hver indeholder to elektroner, idet Pauliprincippet kun tillader en spin-up og en spin-ned elektron i hver energitilstand. Opgaven er slut ♦

### Skitsering af besvarelsen

I det følgende skitseres, hvorledes projektets vedlagte opgave (opgaveformuleringens punkt 3) kan besvares. Der lægges vægt på, hvad der for en gymnasieelev er minimumsviden for at svare fyldestgørende. Opgaveformuleringens to første punkter berøres af pladshensyn ikke.

Den vedlagte opgave kan på trods af sit store omfang besvares vha. en begrænset mængde teknikker. Disse fremgår af boksen på næste side.

### Vejledende besvarelse – Opgave A

A1: Hamiltonoperatoren for et fysisk system udtrykker systemets energitilstande. Egensitstandene for Hamiltonoperatoren og de dertilhørende egenverdier, repræsenterer de mulige energitilstande, systemet kan befinde sig i. I det konkrete tilfælde udtrykker Hamiltonoperatoren altså de mulige energitilstande for to-elektronsystemet.

A2: Lad tilstandene  $|1\rangle$  og  $|2\rangle$  udgøre en orthonormal basis for det todimensionelle Hilbertrum, der beskriver elektronens to mulige placeringer: Plads 1 og plads 2. Ved at lade  $\hat{H}$  virke på tilstanden  $|\alpha_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$  fås

$$\begin{aligned} \hat{H}|\alpha_1\rangle &= \hat{H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\epsilon|1\rangle\langle 1| + \frac{1}{\sqrt{2}}\epsilon|1\rangle\langle 1|2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\epsilon|2\rangle\langle 2|1\rangle + \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{2}}\epsilon|2\rangle\langle 2|2\rangle - V|1\rangle\langle 2|1\rangle - V|1\rangle\langle 2|2\rangle - \\ &\quad V|2\rangle\langle 1|1\rangle - V|2\rangle\langle 1|2\rangle \\ &= \epsilon \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) - V \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \\ &= (\epsilon - V) \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) = (\epsilon - V)|\alpha_1\rangle \end{aligned}$$

Her har vi brugt, at  $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$  og  $\langle 2|1\rangle = \langle 1|2\rangle = 0$  idet  $|1\rangle$  og  $|2\rangle$  jo netop udgør en orthonormal basis.

Tilsvarende fås, at  $\hat{H}|\alpha_2\rangle = \hat{H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle) = (\epsilon + V)|\alpha_2\rangle$ .

Det er hermed vist, at  $|\alpha_1\rangle$  og  $|\alpha_2\rangle$  er egentilstande for  $\hat{H}$  med egenverdierne hhv.  $(\epsilon - V)$  og  $(\epsilon + V)$ .

A3: Da vi har at gøre med et to-dimensionelt rum (Hilbertrum) udspændt af basen  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ , vil matricen for Hamiltonoperatoren blive en  $2 \times 2$  matrix, hvor indgang  $ij$  er fastlagt som  $\hat{H}_{ij} = \langle i|\hat{H}|j\rangle$ . For indgang  $\hat{H}_{11}$  fås:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{11} &= \langle 1|\hat{H}|1\rangle \\ &= \langle 1|(\epsilon|1\rangle\langle 1| + \epsilon|2\rangle\langle 2| - V(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|))|1\rangle \\ &= \langle 1|(\epsilon|1\rangle\langle 1|1\rangle + \epsilon|2\rangle\langle 2|1\rangle - V|1\rangle\langle 2|1\rangle - V|2\rangle\langle 1|1\rangle) \\ &= \epsilon\langle 1|1\rangle\langle 1|1\rangle + \epsilon\langle 1|2\rangle\langle 2|1\rangle - V\langle 1|1\rangle\langle 2|1\rangle - V\langle 1|2\rangle\langle 1|1\rangle \\ &= \epsilon \end{aligned}$$

På tilsvarende vis fås  $\hat{H}_{12} = -V$ ,  $\hat{H}_{21} = -V$  og  $\hat{H}_{22} = \epsilon$  og den samlede matrice ser derfor således ud:

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{pmatrix} \epsilon & -V \\ -V & \epsilon \end{pmatrix}$$

Egenvektorerne for denne matrice kan bestemmes vha. Nspire.

## ”Basiskvant” for gymnasieelever

- For en orthonormal basis gælder følgende deltafunktion

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases}$$

hvor  $\delta_{ij}$  kaldes Kroeneckers deltafunktion. Her er  $\langle i|$  en såkaldt ”bra”, mens  $|j\rangle$  kaldes en ”ket”. Det smarte her er, at bra’er i en  $n$ -dimensionel orthonormal basis kan repræsenteres af vektorer på formen

$$\langle i| = (i_1 \quad i_2 \quad \dots \quad i_{n-1} \quad i_n)$$

mens ket’er er på formen

$$|j\rangle = \begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ \vdots \\ j_{n-1} \\ j_n \end{pmatrix}$$

Det indre produkt  $\langle i|j\rangle$  udføres derfor efter reglerne for normal matrixmultiplikation som en række ganget sammen med en søjle.

- En vektor kaldes normeret når det indre produkt med sig selv er 1. I ”bra-ket”-notation er en vektor  $|i\rangle$  altså normeret når  $\langle i|i\rangle = 1$ .
- Basisvektorerne for en  $n$ -dimensionalt rum (Hilbertrum) er på ket form

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, |n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

hvor der i hver ket er  $n$  pladser. Basis bra’er konstrueres tilsvarende som rækkevektorer.

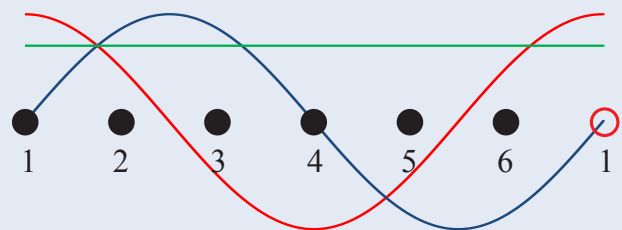
- En given vektor skrives som en linearkombination af basisvektorer og er altså skrevet som en ket på formen :

$$\begin{aligned} |vektor\rangle &= c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \dots + c_{n-1}|n-1\rangle + c_n|n\rangle \\ &= c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + c_{n-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + c_n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Er vektoren normeret gælder det, at  $\sum_{i=1}^n c_i^2 = 1$ , således at kvadratet på hver koefficient kan fortolkes som en sand-

synlighed. Kvantemekanisk kan dette fortolkes som sandsynligheden for at fx en elektron ”befinder sig langs” en given komponent af vektoren.

- De grafiske fremstillinger af egenfunktioner kan når funktionen er normeret, dvs. når det samlede areal mellem grafen og akserne gennem punkterne 1–6 har areal 1, fortolkes som en sandsynlighed. Grafens højde over en bestemt plads kan derfor tolkes som sandsynligheden for at en elektron befinder sig netop på denne plads.



- En operator, fx Hamiltonoperatoren, lader man virke mod højre, og hvis operatoren er repræsenteret ved en  $m \times n$  matrix ganges denne via normal matrixmultiplikation på en  $n$ -dimensional ket ( $n$ -dimensional søjlevektor), der herefter giver en ny  $n$ -dimensional ket. Denne ket er så klar til et indre produkt med en bra af samme dimension ( $n$ -dimensional rækkevektor).

### Eksempel

I ”bra-ket”-notation udføres operatorudregninger meget elegant. Hedder operatoren fx  $\hat{O} = t|2\rangle\langle 1|$ , hvor  $t$  er et tal, virker denne ind på ketten  $|1\rangle$  på følgende måde

$$\hat{O}|1\rangle = t|2\rangle\langle 1|1\rangle = t|2\rangle$$

og altså bliver

$$\langle 2|\hat{O}|1\rangle = \langle 2|t|2\rangle = t\langle 2|2\rangle = t$$

idet konstanter altid passerer uændret igennem det indre produkt.

- Indgang  $ij$  i en matrix, der repræsenterer en operator, er defineret som:

$$H_{ij} = \langle i|H|j\rangle$$

hvor  $\langle i|$  er den  $i$ 'te basis bra og  $|j\rangle$  er den  $j$ 'te basis ket.

Dette giver

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

hvilket netop er formen på  $|\alpha_1\rangle$  og  $|\alpha_2\rangle$  angivet i opgave A2.

De tilhørende egenverdier kan nu findes ved at diagonalisere  $\hat{H}$  i basen  $\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$ , hvilket giver

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} \varepsilon - V & 0 \\ 0 & \varepsilon + V \end{bmatrix}$$

Dette kan desværre ikke gøres på TI-Nspire når indgangene er variable, men man kan slippe omkring problemet ved at sætte fx  $\varepsilon = 2$  og  $V = 1$ , hvilket giver egenverdierne 1 og 3, svarende til hhv.  $\varepsilon - V$  og  $\varepsilon + V$ .

A4: Da et systems grundtilstand er karakteriseret ved det lavest mulige energiniveau, og da ethvert af disse energiniveauer ifølge kvantemekanikkens love er en egentilstand for Hamiltonoperatoren og både  $\varepsilon$  og da  $V$  er positive størrelser, så må systemet bestående af de to elektroner have grundtilstanden

$$|\alpha_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

med tilhørende grundtilstandsenergi  $\varepsilon - V$ .

### Opgave B

B1: Vi har nu at gøre med et seks-dimensionelt Hilbertrum udspændt af basen  $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle, |6\rangle\}$ . Som før er indgang  $ij$

fastlagt ved  $\hat{H}_{ij} = \langle i | \hat{H} | j \rangle$ . Som eksempel fås

$$\begin{aligned} \hat{H}_{11} &= \langle 1 | \hat{H} | 1 \rangle \\ &= \langle 1 | -t \cdot (|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 2| + \\ &\quad |3\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 3| + |4\rangle\langle 5| + |5\rangle\langle 4| + \\ &\quad |5\rangle\langle 6| + |6\rangle\langle 5| + |6\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 6|) | 1 \rangle \\ &= -t \langle 1 | 1 \rangle \langle 2 | 1 \rangle - t \langle 1 | 2 \rangle \langle 1 | 1 \rangle - t \langle 1 | 2 \rangle \langle 3 | 1 \rangle - t \langle 1 | 3 \rangle \langle 2 | 1 \rangle - \\ &\quad t \langle 1 | 3 \rangle \langle 4 | 1 \rangle - t \langle 1 | 4 \rangle \langle 3 | 1 \rangle - t \langle 1 | 4 \rangle \langle 5 | 1 \rangle - t \langle 1 | 5 \rangle \langle 4 | 1 \rangle \\ &\quad - t \langle 1 | 5 \rangle \langle 6 | 1 \rangle - t \langle 1 | 6 \rangle \langle 5 | 1 \rangle - t \langle 1 | 6 \rangle \langle 1 | 1 \rangle - t \langle 1 | 1 \rangle \langle 6 | 1 \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

da alle led er på formen  $\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$  med  $i \neq j$ . Fortsættes sådan for alle 36 indgange fås

$$\hat{\mathbf{H}} = t \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Her står  $(-1)$ -tallerne på præcis de indgange, der svarer til hop mellem to naboplads. Indgang  $\hat{H}_{12}$  svarer til at elektronen hopper fra plads 1 til 2,  $\hat{H}_{23}$  svarer til at elektronen hopper fra plads 2 til 3. At modellen kun tillader elektroner at hoppe til en naboplads, afspejles altså ved at indgange med vær-

dier forskellige fra nul (her  $-1$ ) kun forekommer på formen  $\hat{H}_{i,i+1}$  eller  $\hat{H}_{i+1,i}$ .

$$\text{B2: } |m_0\rangle \text{ omskrives til vektorform i standard basis: } |m_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

og ganges på matricen for  $\hat{\mathbf{H}}$ . Dette giver

$$\hat{\mathbf{H}}|m_0\rangle = \frac{-t}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{-2t}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Skrives dette som  $\hat{\mathbf{H}}|m_0\rangle = -2t|m_0\rangle$  ses det, at  $|m_0\rangle$  har egenverdien  $-2t$ .

Tilsvarende fås for  $|m_1\rangle$  og  $|m_2\rangle$ , at  $\hat{\mathbf{H}}|m_1\rangle = -t|m_1\rangle$  og  $\hat{\mathbf{H}}|m_2\rangle = -t|m_2\rangle$ .

B3: Faktoren  $t$  i Hamiltonoperatoren  $\hat{H}$  udtrykker, at systemet af elektroner sænker sin energi ved, at partiklerne er i bevægelse. Dette kan ikke forstås i et klassisk billede, idet klassiske partikler jo minimerer deres energi ved at være i hvile. For kvantemekaniske partikler som elektronerne i denne opgave gælder Heisenbergs usikkerhedsprincip,  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ , hvoraf det følger, at hvis positionen af partiklerne er meget ubestemt, så kan hastigheden via impulsen være meget bestemt.

Det er altså en nødvendig betingelse for, at en kvantemekanisk partikel kan minimere sin hastighed og dermed energi, at dens position er ubestemt. Derfor vil en kvantemekanisk partikel gerne bevæge sig og være flere steder på en gang. Det er netop dette, vi ser i egenvektoren  $|m_0\rangle$ 's form med et 1-tal på alle pladser. Denne konfiguration af elektronerne svarer til, at begge i gennemsnit befinder sig lige meget på hver plads i benzenmolekylet – eller mere præcist: I gennemsnit lige meget over hele benzenmolekylet – hvilket også illustreres af den grønne graf. Denne elektronkonfiguration giver netop den laveste energi for elektroner, der i modellen med Hamiltonoperator  $\hat{H}$  beskrives som kinetiske. Fortolkes den grønne graf som en sandsynlighedsamplitude, ses det, at der netop er samme sandsynlighed for, at elektronerne befinder på ethvert sted i molekylet (ingen position er foretrukket frem for andre).

Egenvektoren  $|m_1\rangle$  har komponenter langs retningerne  $|2\rangle, |3\rangle, |5\rangle$  og  $|6\rangle$ , hvilket betyder, at her kan de to elektroner ikke befinde sig på pladserne 1 og 4. Dette giver naturligt en højere energi (egenverdi  $-t$ ), idet elektronerne her fordeler sig på mindre plads end i tilfældet  $|m_0\rangle$ . I et termodynamisk billede har elektronkonfigurationen svarende til  $|m_1\rangle$  en lavere entropi end elektronkonfigurationen svarende til  $|m_0\rangle$ , hvilket også kan forklare den højere energi. Grafisk repræsenteres dette ved den blå kurve, hvor det ses, at der ikke er lige stor sandsynlighedsamplitude over alle pladser i molekylet – de tilgængelige pladser  $|2\rangle, |3\rangle, |5\rangle$  og  $|6\rangle$  har samme sandsynlighed (som så hver må være en fjerdedel) mens de ikke tilladte pladser  $|1\rangle$  og  $|4\rangle$ , har sandsynlighed nul.

Egenvektoren  $|m_2\rangle$  har komponenter langs alle retninger og har derfor en sandsynlighedsamplitude over alle pladser, se den røde graf. Bemærk, at amplituden ikke er ens over alle pladser, og at der er en placering mellem plads 2 og 3 samt mellem 5 og 6, der ikke er tilladt. Sandsynlighederne kan udregnes ved at kvadrere koefficienterne til hver komponent. Altså tilknyttes pladserne 1 og 4 hver en sandsynlighed på  $1/3$ , mens pladserne 2,3,5 og 6 får sandsynligheden  $1/12$ . Samlet set en sandsynlighed, der summer til 1.

At egenværdien for  $|m_2\rangle$  er  $-t$  lige som for  $|m_1\rangle$ , kan grafisk forstås ved, at de to grafer (rød og blå) blot er vandrette parallelforskydninger af hinanden. Der er altså den samme elektrontæthed over molekylet, blot forskudt rundt langs molekylet. Dette giver god mening i en model, hvor elektronerne er beskrevet som kinetiske, og hvor benzenmolekylet har en rotationssymmetri (6-folds) omkring en akse gennem centrum og vinkelret på molekylets plan.

At egenværdien for  $|m_2\rangle$  er større end for  $|m_0\rangle$ , selvom alle pladser i begge tilfælde kan være besatte, kan igen forklares ud fra den plads, elektronerne har at fordele sig på. Den totale ligefordeling af elektroner over hele molekylet vil give en la-

vere energi end en konfiguration, hvor alle pladser godt nok er tilgængelige, men hvor elektronernes position er mere bestemt.

Det skal bemærkes, at de tre grafer er fremkommet ved at udtrykke egenvektorerne i en basis af sfærisk harmoniske funktioner og derefter normere hver enkel. Dette er grunden til, at grafernes amplituder kan fortolkes som sandsynligheder. At udføre dette selv ville gøre opgavens omfang for stort for en gymnasieelev, og det er derfor i opgaven blot op til eleven at fortolke de grafiske fremstillinger.

Afslutningsvis skal det nævnes, at eleven løste den her beskrevne molekyleopgave meget tilfredsstillende, og det lykkedes ligeledes at sætte dette i en fornuftig forbindelse med resten af opgaveformuleringen.

Den her beskrevne opgaveformulering befinder sig i grænselandet mellem matematik og fysik. Det vil formentlig også være muligt at dreje en opgave som denne i en mere kemisk retning, så den retter fokus væk fra matematikken og i stedet behandler en kvantemekanisk forklaring på et molekyles kemiske egenskaber.