

Moderna fizika I  
zapiski po predavanjih  
prof. dr. Simona Širce

Jaka Korošak

Physics student, FMF, University of Ljubljana

11-5-2022

# Kazalo

<b>1</b>	<b>Posebna teorija relativnosti</b>	<b>1</b>
1.1	Galilejska invarianca . . . . .	1
1.1.1	Inercialni opazovalni sistemi . . . . .	2
1.2	Einsteinovi postulati relativnosti . . . . .	3
1.2.1	Dogodki in opazovalci . . . . .	3
1.2.2	Relativnost sočasnosti . . . . .	4
1.2.3	Dilatacija časa . . . . .	5
1.2.4	Kontrakcija (krčenje) dolžin . . . . .	7
1.3	Lorentzova transformacija . . . . .	7
1.3.1	Relativistična transformacija hitrosti . . . . .	8
1.3.2	Transformacija pospeškov . . . . .	10
1.3.3	Relativistični Dopplerjev pojav . . . . .	10
1.4	Prostor-čas . . . . .	11
1.4.1	Relativistične invariante . . . . .	12
1.5	Dogodki in vzročnost (kavzalnost) . . . . .	13
1.5.1	Sile in kavzalnost . . . . .	15
1.6	Relativistična gibalna količina in energija . . . . .	16
1.6.1	Relativistična transformacija GK in E . . . . .	21
1.6.2	Enačba gibanja . . . . .	24
1.7	Gibanje delca v EM . . . . .	25
1.7.1	Transformacija električnega in magnetnega polja . . . . .	27
1.8	Sistemi delcev . . . . .	28
1.8.1	Razpoložljiva energija . . . . .	29
1.8.2	Razpadi delcev . . . . .	30
<b>2</b>	<b>Kvantna fizika</b>	<b>32</b>
2.1	Sevanje črnega telesa . . . . .	32
2.2	Planckov zakon . . . . .	33
2.3	Fotoelektrični pojav . . . . .	35
2.4	Rentgensko sevanje (žarki $X$ ) . . . . .	37
2.5	Comptonov pojav . . . . .	38
2.6	Atomski spektri . . . . .	40
2.6.1	Bohrov model vodikovega atoma . . . . .	40
2.7	de Brogliejeva hipoteza . . . . .	42
2.8	Opis valvovanja delcev . . . . .	44
2.8.1	Superpozicija valov . . . . .	45
2.8.2	Gaussov valovni paket . . . . .	46
2.9	Načelo nedoločenosti . . . . .	46
2.9.1	Sipanje delcev na reži . . . . .	48
2.9.2	Nedoločenost energije in časa . . . . .	48
2.10	Interferenčni poskus z delci . . . . .	49
<b>3</b>	<b>Kvantna mehanika v 1d</b>	<b>51</b>
3.1	Schrödingerjeva enačba . . . . .	51
3.2	Verjetnostna interpretacija $\Psi(x, t)$ . . . . .	53

3.3	Stacionarna stanja . . . . .	55
3.4	Neskončna potencialna jama . . . . .	57
3.5	Lastnosti lastnih funkcij . . . . .	59
3.6	Linearni harmonski oscilator . . . . .	60
3.7	Pričakovane vrednosti . . . . .	64
3.7.1	Stacionarna stanja . . . . .	66
3.7.2	Meritev energije . . . . .	66
3.8	Kvalitativne slike valovnih funkcij vezanih stanj . . . . .	68
3.8.1	Ukrivljenost valovne funkcije . . . . .	68
3.8.2	Poljubni potenciali $V(x)$ . . . . .	70
3.9	Odboj na potencialni stopnici . . . . .	72
3.10	Potencialna plast in tunelski pojav . . . . .	75
<b>4</b>	<b>Kvantna mehanika v 3d</b>	<b>78</b>
4.1	Neskončna jama v 3d . . . . .	79
4.2	Harmonski oscilator v 3d . . . . .	79
4.3	Nedoločenost in komutatorji operatorjev . . . . .	80
4.4	Kvantizacija vrtilne količine . . . . .	81
4.4.1	Rotator . . . . .	82
4.4.2	Lastne funkcije in lastne vrednosti $\hat{L}_z$ . . . . .	84
4.4.3	Lastne funkcije in lastne vrednosti $\hat{L}^2$ . . . . .	84
<b>5</b>	<b>Enoelektronski atom</b>	<b>87</b>
5.1	Sevalni spekter vodika . . . . .	92
5.2	Tirni magnetni moment . . . . .	93
5.3	Spin elektrona . . . . .	95
5.4	Magnetna resonanca - seminar . . . . .	99
5.5	Miselni poskus s spinom $\frac{1}{2}$ (gedankenexperimente) . . . . .	100
5.6	Seštevanje vrtilnih količin . . . . .	102
5.6.1	Seštevanje poljubnih vrtilnih količin . . . . .	104
5.7	Sklopitev spin-tir . . . . .	107
5.7.1	Izpeljava prispevka $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ k energiji . . . . .	107
5.8	Relativistični popravek h kinetična energiji . . . . .	110
5.9	Zeemaov pojav . . . . .	111
5.10	Sevanje atomov . . . . .	115
5.11	Izbirna pravila . . . . .	117
5.12	Spin fotona . . . . .	120
5.13	Širina spektralnih črt . . . . .	120
<b>6</b>	<b>Večeelektronski atomi</b>	<b>123</b>
6.1	Paulijevo izključitveno načelo . . . . .	126
6.2	Vrtilna količina atomov . . . . .	127
6.3	Ortohelij in parahelij . . . . .	128
6.4	Spektri sevanja atomov . . . . .	129
6.5	Rentgenski spektri (drugič) . . . . .	130
6.5.1	Absorpcija rentgenskih žarkov . . . . .	132

<b>7</b>	<b>Molekule</b>	<b>133</b>
7.1	Kovalentna vez: $H_2 = p + p + e^- + e^-$ . . . . .	136
7.2	Ionska vez . . . . .	138
7.3	Van der Waalsova interakcija . . . . .	140
7.4	Vzbujena stanja in spektri molekul . . . . .	141
7.4.1	Spektri (dvoatomnih) molekul . . . . .	142

Zapiski so nastali po predavanjih predmeta Moderna fizika I, prof. dr. Simona Širce, v drugem letniku univerzitetnega programa fizika na FMF UL. Zapiske sem pretipkal v L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X in jih opremil z TikZ diagrami. Profesor ni sodeloval pri nastanku zapiskov. O morebitnih napakah v besedilu mi pišite.

E-pošta: [jaka.korosak@student.fmf.uni-lj.si](mailto:jaka.korosak@student.fmf.uni-lj.si)  
Ostali zapiski: [jakakorosak.com/notes](http://jakakorosak.com/notes)

# 1 Posebna teorija relativnosti

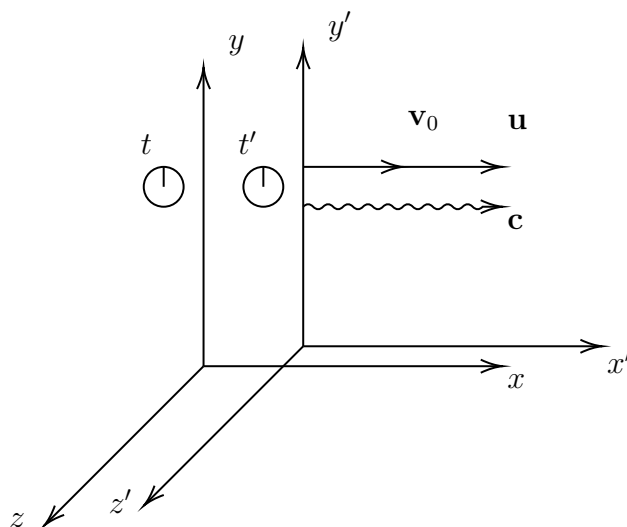
Najprej bomo govorili o posebni teoriji relativnosti, ki napram splošni, ne vsebuje gravitacije. V izhodišču poglavja je vprašanje veljavnosti fizikalnih zakonov za različne opazovalce, zlasti kadar se eden od njiju giblje glede na drugega.

## 1.1 Galilejska invarianca

Iz klasične fizike vemo, da veljajo Galilejeve transformacije, na primer za zvok:

- hitrost zvoka za opazovalca, ki miruje glede na zrak (sredstvo po katerem se širi), je enaka  $c$
- za opazovalca, ki se giblje s hitrostjo  $\mathbf{v}_0$  v smeri širjenja zvoka, pa je hitrost širjenja valovanja  $\mathbf{u} = \mathbf{c} - \mathbf{v}_0$  (relativna hitrost sledi iz preproste aditivne operacije)

Splošneje: sistem  $S$  in sistem  $S'$ , ki se giblje glede na  $S$  vzdolž osi  $x$  s hitrostjo  $\mathbf{v}_0$ .



- $S$  in  $S'$  se prekrivata ob  $t = t' = 0$  in tudi kasneje  $t = t'$ . To je “absolutni čas” in naša vsakdanja izkušnja!
- Za izmerjene krajevne koordinate velja

$$x' = x - v_0 t, \quad y' = y, \quad z' = z$$

Obratna transformacija je seveda

$$t = t', \quad x = x' + v_0 t, \quad y = y', \quad z = z'$$

Ker privzamemo  $t' = t$ , je

$$\dot{x}' = \dot{x} - v_0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{x}' = \ddot{x}$$

II. Newtonov zakon ( $F = m\ddot{x}$ ) torej velja v obeh opazovalnih sistemih natanko v isti obliki, i.e.  $F' = m\ddot{x}' = m\ddot{x} = F$ , če predpostavimo, da je masa konstantna.

To je galilejska invarianca: Osnovni zakoni fizike so enaki v vseh sistemih, ki se drug na drugega gibljejo nepospešeno.

Na težave naletimo v elektrodinamiki. Maxwelllove enačbe in enačba za Lorentzovo silo, niso invariantne na Galilejeve transformacije.

**Zgled:** Predstavljamo si točkast izvor  $EM$  valovanja, ki ob času  $t = 0$  izseva blisk  $EM$  valov, ki se širi radialno navzven (krogelna simetrija) s hitrostjo  $c$ . Motnja se širi v skladu z zvezo  $x^2 + y^2 + z^2 = c^2 t^2$  ali  $-c^2 t^2 + x^2 + y^2 + z^2 = 0$ , "ugotovljeno" v sistemu  $S = (t, x, y, z)$ . V sistemu  $S' = (t', x', y', z') = (t, x - v_0 t, y, z)$  pa "ugotovimo"

$$\begin{aligned} -c^2 t'^2 + x'^2 + y'^2 + z'^2 &= -c^2 t^2 + (x - v_0 t)^2 + y^2 + z^2 \\ &= -c^2 t^2 + x^2 + y^2 + z^2 + v_0 t(v_0 t - 2x) \\ &\neq 0 \end{aligned}$$

Pri svetlobi se napovedujejo težave. Zvočno valovanje se širi kot longitudinalna motnja v sredstvu, ki ima neko gostoto, stisljivost in s tem povezano hitrost širjenja. Veljajo Galilejeve transformacije, za svetlobo pa ne. Porodi se vprašanje o sredstvu za širjenje svetlobe, ki so mu sprva rekli eter.

### 1.1.1 Inercialni opazovalni sistemi

Inercialni sistem je koordinatni sistem, v katerem določimo lego (koordinate) in ure, s katerimi merimo čas, poleg tega pa mora biti nepospešen. V posebni teoriji relativnosti še zahtevamo, da smo dovolj daleč od teles z veliko maso. Ure moramo razmestiti po koordinatnem sistemu in jih umeriti oziroma sinhronizirati. Naprimer v sistemih  $S$  in  $S'$  (hitrost  $v_0$ ) glavni uri v izhodiščih umerimo pri  $t = t' = 0$ . Svetlobni eter bi moral imeti neverjetne lastnosti:

- Prazen prostor bi moral izpolnjevati z neprisotno napetostjo (tension), da bi bila svetlobna hitrost povsod  $c_0$  (kot v vakuumu)  $\rightarrow$  podobno kot napeta struna: po nenapeti se ne širi nič.
- Moral bi imeti  $\infty$  togost (stiffness) in biti nestisljiv, tako da ne bi bile možne longitudinalne motnje, obenem pa ne bi smel pomeniti nobene ovire gibanja običajnih (makroskopskih, snovnih teles)

$\Rightarrow$  Eter je tako mehansko sredstvo za širjenje svetlobe brez mehanskih lastnosti v navzoči snovi (danes vemo, da je to  $\approx$ ). Implicira, da motnje v sredstvu potujejo skozi sredstvo. S tem bi eter lahko predstavljal absolutni koordinatni sistem v katerem bi se  $EM$  valovi gibal s hitrostjo  $c_0$ . Michelsonov (in Morleyjev) poskus je ovrgel obstoj etra kot absolutnega koordinatnega sistema.

## 1.2 Einsteinovi postulati relativnosti

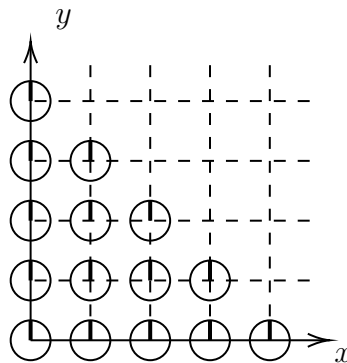
Einsteinovi postulati (načela) relativnosti (1905)

Na Einsteina MM eksperiment ni bistveno vplival, saj je bil že prepričan, da pojmi absolutnega gibanja niso relevantni. Največji konflikt je videl med mehaniko in elektromagnetizmom: če se svetloba giblje s hitrostjo  $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ , kot so hotele Maxwellove enačbe, in če naj bi veljala ekvivalenca med vsemi inercialnimi opazovalnimi sistemi pride do protislovja. Einsteinova postulata:

1. Fizikalni zakoni imajo enako obliko v vseh inercialnih sistemih.
  2. Hitrost svetlobe (v vakuumu) je v vseh inercialnih sistemih enaka  $c$ .
1.  $\Rightarrow$  ne moremo ugotoviti absolutnega gibanja/mirovanja, le relativno  
 2.  $\Rightarrow$  ta točka je nasprotna vsem našim dosedanjim izkušnjam

### 1.2.1 Dogodki in opazovalci

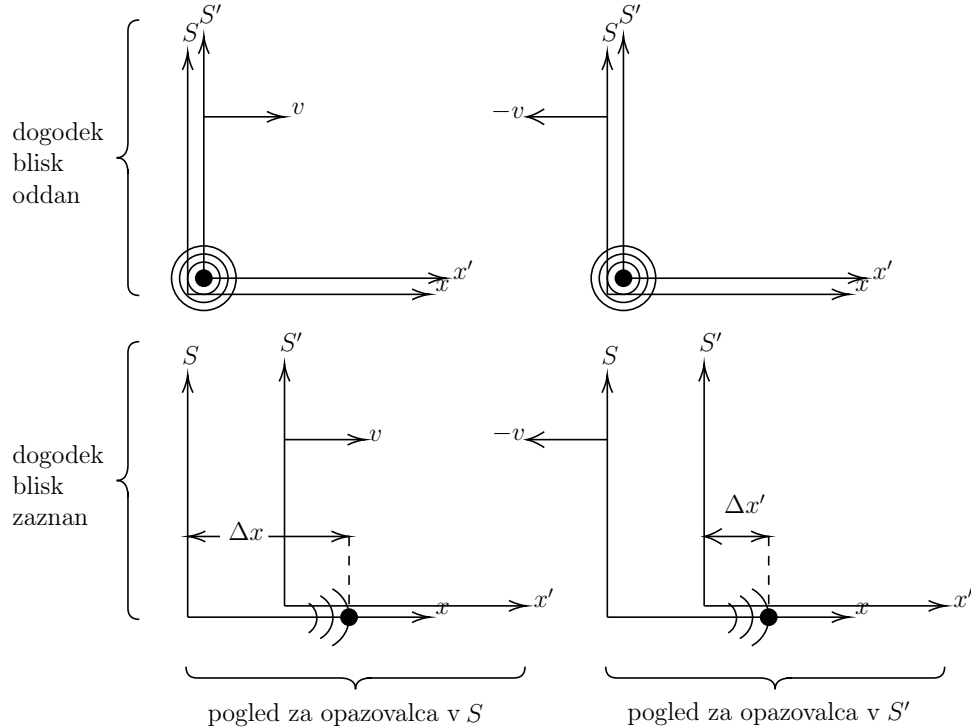
Dogodek je nekaj kar se zgodi: udar strele, trk dveh delcev, rojstvo, eksplozija supernove. Vsak dogodek se zgodi ob nekem času na nekem kraju, vendar je neodvisen od inercialnega sistema, v katerem se ga bomo odločili opisati. Dogodek ne pripada nobenemu (privilegiranemu) sistemu. Dogodke opazujejo opazovalci, človek, merilni inštrument. Ti morajo odčitati vse ure postavljene na mesta mreže, kjer se kaj zgodi.





### Prvi zgled:

$S, S'$  poravnamo ob  $t = t' = 0$ .  $S'$  se giblje v smeri osi  $x$  s hitrostjo  $v$ . V izhodišču  $S'$  je oddajnik svetlobnih bliskov, detektor svetlobe je na fiksnem mestu v  $S$ .



Opazovalec v sistemu  $S$  zazna blisk na razdalji  $\Delta x$  ob času  $\Delta t$ , prav tako merjenem v  $S$ . Opazovalec,  $S'$  izmeri blisk na razdalji  $\Delta x'$  v svojem sistemu, in sicer ob svojem času  $\Delta t'$ . Če naj bo svetlobna hitrost enaka za  $S$  in  $S'$ , mora veljati

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{c} \text{ v } S \quad \text{in} \quad \Delta t' = \frac{\Delta x'}{c} \text{ v } S'$$

kjer je  $\Delta x' < \Delta x$  (očitno iz slike) in zato  $\Delta t' < \Delta t$ .

⇒ Če želita opazovalca v  $S$  in  $S'$  pristati na postulat, da je  $c$  konstantna za oba, morata ugotoviti, da se ne strinjata niti glede meritve časovnih niti glede meritve krajevnih intervalov.

$\Delta x' \neq \Delta x$  in  $\Delta t' \neq \Delta t$ , zato da je lahko  $c' = c$

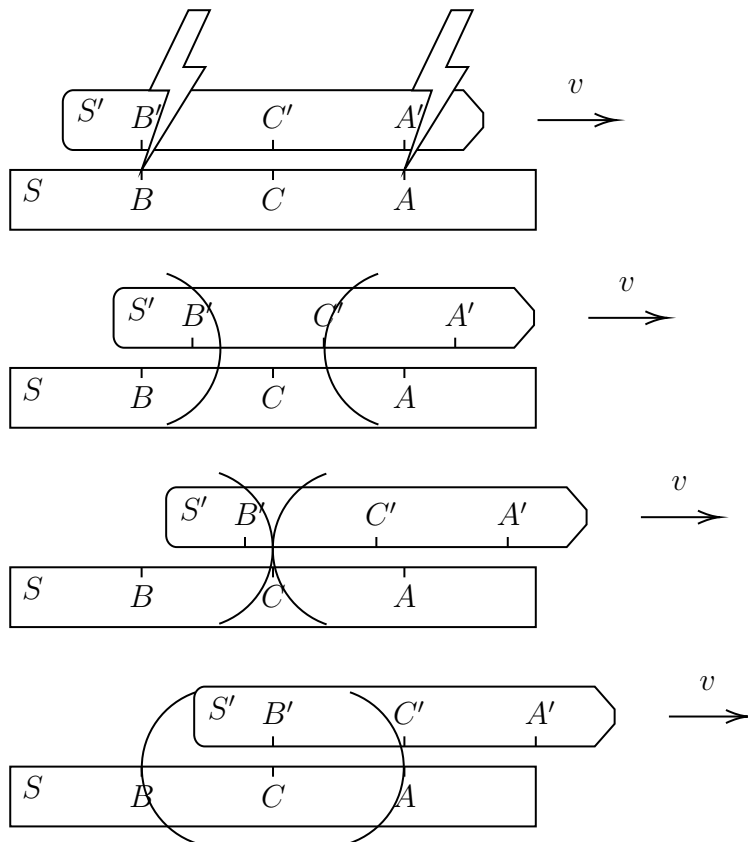
⇒ Čas ni absolutna spremenljivka (količina), ki bi tekla enako za vse opazovalce.

Zvezo med količinami bodo dale Lorentzove transformacije

### 1.2.2 Relativnost sočasnosti

Pokazali bi radi, da dva dogodka, ki sta sočasna v  $S$  nista sočasna v  $S'$ .

Drugi zgled: izvirni Einsteinov zgled z vlakom.



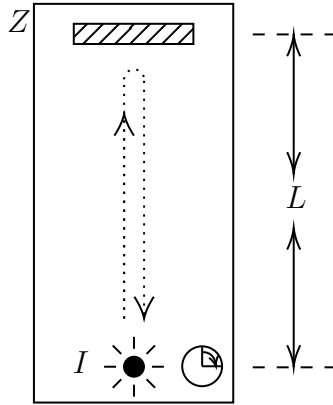
Slika 1: Izvirni Einsteinov zgled z vlakom

- Vlak miruje v  $S'$ , peron miruje v  $S$ .
- Strela trešči v sprednji in zadnji konec vlaka sočasno v  $S$  (prva slika), zato opazovalec  $C$  na sredi med  $A$  in  $B$  oba bliska vidi istočasno (tretja slika).
- Mislimo si, da je strela tako močno vsekala, da so znamenja ostala tudi na peronu.
- Kaj vidi  $C'$ , ki je na sredi vlaka (merjen v  $S$ )? Svetlobni blisk s sprednjega konca vlaka je do njega prišel prej kot z zadnjega, saj ga ta šele lovi. Tistega iz  $A'$  zaznal kot na drugi sliki, tistega s  $C'$  pa kot na četrti sliki.

$\Rightarrow$  Kar je bilo sočasno za  $S$ , ni sočasno za  $S'$ .

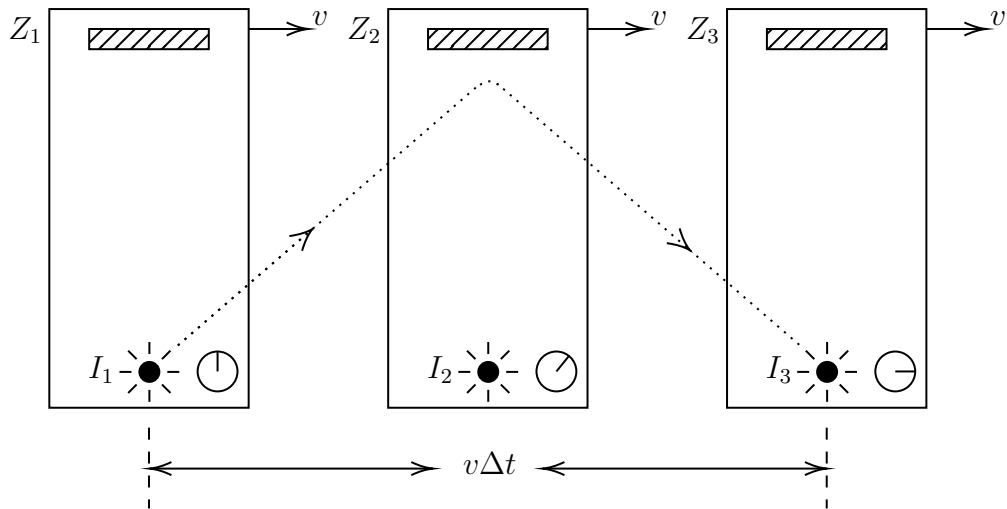
### 1.2.3 Dilatacija časa

Oglejmo si, kaj se zgodi s krakom  $MM$  interferometra, pravokotnim na smer gibanja. Idealizacija: tog okvir v katerem imamo svetlobni izvir  $I$ , ob njemu montiramo uro in zrcalo  $Z$  na razdalji  $L$  od izvira:



- Svetlobni blisk potuje do zrcala in nazaj in zato porabi  $\Delta t = \frac{2L}{c}$ , toliko pokaze tudi ura.
- NB izmerili smo časovni interval med dvema dogodkoma: izsevanjem bliska in njegovo detekcijo. Tak interval imenujemo PROPER TIME INTERVAL (lastni časovni interval)).
- Ura je ob obeh dogodkih na istem mestu (signal je odšel in prišel k isti uri).

Dogodka z vidika opazovalca, ki se giblje glede na levo s hitrostjo  $v$ . V njegovem sistemu se aparat giblje v desno s hitrostjo  $v$ :



Denimo, da je čas od odboja in vrnitve žarka v tem sistemu  $\Delta t'$ , ta čas se je sistem premaknil za  $v\Delta t'$  (oziroma aparatura je mimo njega opravila razdaljo  $v\Delta t'$ ). Razdalja med  $I_1$  in  $I_3$  mora biti  $v\Delta t'$ , razdalja med  $I_1$  in  $Z_2$  mora biti  $\sqrt{L^2 + \left(\frac{v\Delta t'}{2}\right)^2}$  in celotna pot žarka enaka  $2\sqrt{L^2 + \left(\frac{v\Delta t'}{2}\right)^2}$ . Toda tudi za ta sistem, ki je inercialen (= se giblje s konstantno hitrostjo) mora biti svetlobna hitrost enaka  $c$ , torej

$$c\Delta t' = 2\sqrt{L^2 + \left(\frac{v\Delta t'}{2}\right)^2}$$

Od tod dobimo

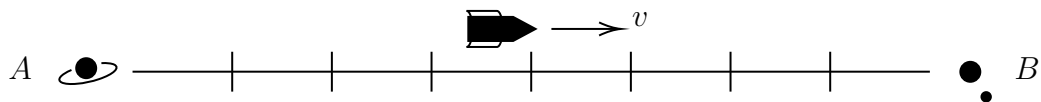
$$\Delta t' = \frac{\frac{2L}{c}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{\Delta t}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Oziroma

$$\Delta t_{\text{lastni}} = \underbrace{\Delta t_{\text{nelastni}}}_{\text{Strnad temu pravi koordinatni čas}} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Merili smo torej dva dogodka, izsevanje bliska in njegov sprejem v detektorju. Toda v drugem primeru se je sprejem zgodil na drugem mestu, torej ga nismo mogli izmeriti z isto uro. V tem primeru smo izmerili nelasten (improper) časovni interval. Časovni interval med dvema dogodkoma, kakršnega izmerita opazovalca je torej odvisen od njune relativne hitrosti. To je dilatacija časa.

### 1.2.4 Kontrakcija (krčenje) dolžin



V vesoljskem sistemu za pot  $A \rightarrow B$  potrebuje  $\frac{L}{v}$  časa. To je koordinatni čas. Ura na vesoljski ladji je ista pri  $A$  in  $B$ , ter meri lastni čas  $\frac{L}{v} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$ . Pilot vidi, da se mu markerji bližajo z  $-v$ . Preprost izračun

$$\begin{aligned} L' &= \left( \begin{array}{c} \text{hitrost} \\ \text{vanja markerjev} \end{array} \text{ približe} \right) \cdot (\text{njegov čas}) \\ &= v \frac{L}{v} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \\ L' &= L \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \end{aligned}$$

## 1.3 Lorentzeva transformacija

Potrebujemo relativistično transformacijo, ki bo pri  $v$ , primerljiva s  $c$ , nadomestila Galilejevo. Radi bi povezali dognanje v sistemu  $S = \{t, x, y, z\}$  z dogajanjem v  $S' = \{t, x, y, z\}$ . Radi bi linearne transformacije. Poskusimo:

$$\begin{aligned} x' &= \gamma(x - vt), & \text{kjer } \gamma &= \gamma(v) \neq \gamma(x), \gamma(y) \\ x &= \gamma(x' + vt'), & \text{biti mora } \lim_{v \rightarrow 0} \gamma(v) &= 1 \\ \Rightarrow x' &= \gamma(\gamma(x' + vt') - vt) = \gamma^2 x' + \gamma^2 vt' - \gamma vt \\ \text{Izrazimo } t: & t = \gamma t' + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma v} x' = \gamma \left( t' + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2 v} x' \right) \end{aligned}$$

Upoštevamo, da opazovalca vidita:  $x = ct$  in  $x' = ct'$ . Izrazimo  $c$

$$c = \frac{x}{t} = \frac{\gamma(x' + vt')}{\gamma(t' + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2 v} x')} = \frac{c + v}{1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \frac{c}{v}}$$

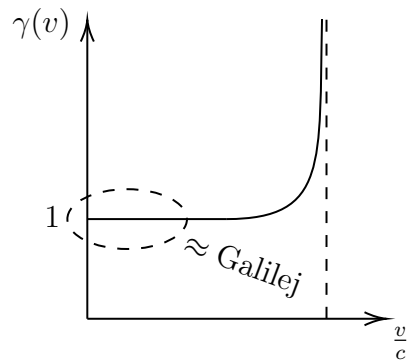
$$\Rightarrow c + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \frac{c^2}{v} = c + v$$

$$\Rightarrow \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} = \frac{v^2}{c^2}$$

$$\Rightarrow \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

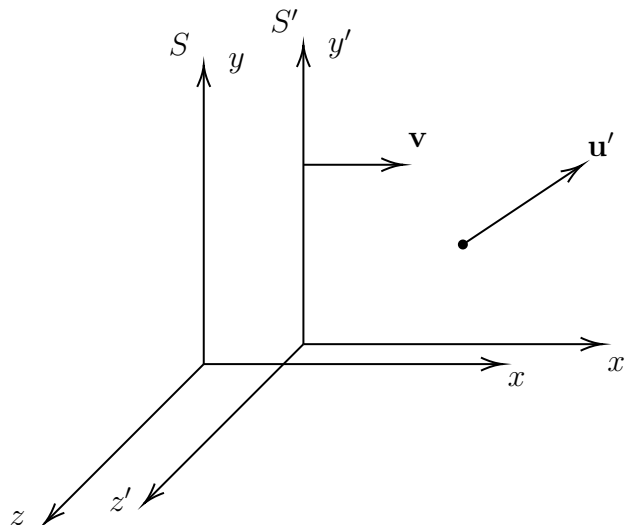
$$\beta = \frac{v}{c} \text{ je Lorentzev relativistični faktor}$$

Lorentzeve transformacije	obratne
$t' = \gamma(t - \frac{v}{c^2}x)$	$t = \gamma(t' + \frac{v}{c^2}x')$
$x' = \gamma(x - vt)$	$x = \gamma(x' + vt')$
$y' = y$	$y = y'$
$z' = z$	$z = z'$



### 1.3.1 Relativistična transformacija hitrosti

Klasično (Galilej):  $u' = u + v \rightarrow$  ne bo vredno pri  $v \rightarrow c$ .



$u'$  je merjena v  $S'$ , zanima nas pa v  $S$ .

$$dx' = \gamma(dx - v dt)$$

$$dy' = dy$$

$$dz' = dz$$

$$dt' = \gamma(dt - \frac{v}{c^2} dx)$$

$$u'_x = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\gamma(dx - v dt)}{\gamma(dt - \frac{v}{c^2} dx)} = \frac{\frac{\frac{dx}{dt} = u_x}{dt} - v}{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{u_x - v}{1 - \frac{vu_x}{c^2}}$$

$$u'_y = \frac{dy'}{dt'} = \frac{dy}{\gamma(dt - \frac{v}{c^2} dx)} = \frac{\frac{\frac{dy}{dt} = u_y}{dt}}{\gamma(1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt})} = \frac{u_y}{\gamma(1 - \frac{vu_x}{c^2})}$$

$$u'_z = \frac{dz'}{dt'} = \frac{dz}{\gamma(dt - \frac{v}{c^2} dx)} = \frac{\frac{\frac{dz}{dt} = u_z}{dt}}{\gamma(1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt})} = \frac{u_z}{\gamma(1 - \frac{vu_x}{c^2})}$$

$$u_x = \frac{u'_x + v}{1 + \frac{vu'_x}{c^2}}$$

$$u_y = \frac{u'_y}{\gamma(1 + \frac{vu'_x}{c^2})}$$

$$u_z = \frac{u'_z}{\gamma(1 + \frac{vu'_x}{c^2})}$$

Preverimo limito:

$$\|\mathbf{u}\|, |v| \ll c$$

$$\Rightarrow u_x = u'_x + v$$

$$u_y = u'_y$$

$$u_z = u'_z$$

$$u_x \rightarrow c : \quad u'_x \rightarrow \frac{c - v}{1 - \frac{v}{c}} \rightarrow c$$

V skladu s poslanstvom, da je svetlobna hitrost konstantna v vseh inercialnih sistemih. Nikjer nismo zahtevali, da bi bilo gibanje delca v  $S'$  enakomerno. Zapisali smo LT v diferencialni obliki  $\Rightarrow$  zapisane transformacije veljajo za trenutne hitrosti  $\mathbf{u}$  oziroma  $\mathbf{u}'$  (instantaneous velocities). Relativna hitrost dveh delcev, kjer splošno velja (samo na predznak  $\beta_1, \beta_2$  je potrebno paziti)

$$\beta = \frac{\beta_1 + \beta_2}{1 + \beta_1 \beta_2} < 1$$

### 1.3.2 Transformacija pospeškov

$$\begin{aligned}
 a'_x &= \frac{du'_x}{dt'} & u'_x &= \frac{u_x - v}{1 - \frac{u_x v}{c^2}} & t' &= \gamma \left( t - \frac{v}{c^2} x \right) \\
 du'_x &= \frac{(du_x - dv) \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right) + (u_x - v) \left( \frac{du_x v + u_x dv}{c^2} \right)}{\left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)^2} \\
 dt' &= \gamma \left( dt - \frac{v}{c^2} dx \right) \\
 a'_x &= \frac{du'_x}{dt'} = \frac{\left( \frac{du_x}{dt} - \frac{dv}{dt} \right) \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right) + \frac{u_x - v}{c^2} \left( v \frac{du_x}{dt} + u_x \frac{dv}{dt} \right)}{\gamma \left( 1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt} \right) \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)^2} \\
 \dots &= \frac{a_x \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right) + \left( \frac{u_x - v}{c^2} \right) v a_x}{\gamma \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)^3} = \frac{a_x}{\gamma^3 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)^3} = a'_x
 \end{aligned}$$

Na hitro (naredi za D.N.)

$$\begin{aligned}
 a'_y &= \frac{1}{\gamma^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)^3} \left[ \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right) a_y + \frac{v}{c^2} u_y a_x \right] \\
 a'_z &= \frac{1}{\gamma^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)^3} \left[ \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right) a_z + \frac{v}{c^2} u_z a_x \right]
 \end{aligned}$$

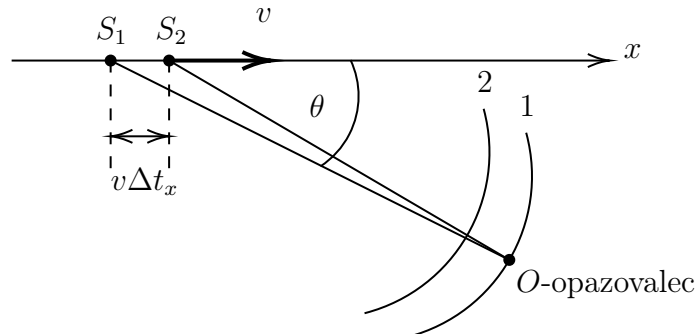
Bistveno sporočilo: če je  $\mathbf{a} = \text{konst.}$  v enem sistemu, je nujno  $\mathbf{a}' \neq \text{konst.}$  v drugem. V formalizem transformiranih pospeškov so se prikradle hitrosti, te pa se spreminjajo s časom.

### 1.3.3 Relativistični Dopplerjev pojav

(Nenavadna izpeljava)

- v mehanskem sredstvu
  - $\vartheta = \vartheta_0 (1 \pm \frac{v}{c})$ , če se giblje opazovalec glede na izvir.
  - $\vartheta = \frac{\vartheta_0}{1 \mp \frac{v}{c}}$ , če obratno.
- relativistično: važna samo hitrost med izvorom in detektorjem

$$\vartheta_O = \vartheta_S \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta}$$



Čas, ki ga signal  $S_1$  rabi do  $O$  je  $\frac{r_1}{c}$ . Izvir odda nov val, ko pride v  $S_1$ , do  $O$  pride po  $t = \Delta t_x + \frac{r_2}{c}$ . Čas med sprejemom signalov v  $O$  je  $\Delta t_O = \Delta t_x + \frac{r_2}{c} - \frac{r_1}{c}$ . Če je izvir dovolj daleč od opazovalca (veliko valovnih dolžin vstran):

$$r_2^2 = r_1^2 + \overline{S_1 S_2}^2 - 2r_1 \overline{S_1 S_2} \cos \theta \quad \text{postane} \quad r_2 \approx r_1 - \overline{S_1 S_2} \cos \theta$$

$$\Rightarrow r_2 - r_1 \approx -\overline{S_1 S_2} \cos \theta$$

$$\text{in} \quad \Delta t_O = \Delta t_x - \frac{\overline{S_1 S_2}}{c} \cos \theta = \Delta t_x - \frac{v \Delta t_x}{c} \cos \theta = \Delta t_x \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)$$

Kaj se zgodi s frekvencami? Zanima nas zveza med  $\Delta t_x$  in  $\vartheta_S$  (frekvenca izvira).  $\frac{1}{\vartheta_S}$  je čas med valovima, kot ga izmeri sam izvir, to je lastni čas.  $\Delta t_x$  je čas med istima dogodkoma (emisija prvega in drugega vala), merjen v sistemu  $O$ .

$$\frac{1}{\vartheta_S} = \Delta t_x \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

$$\Rightarrow \Delta t_O = \Delta t_x \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right) = \frac{1 - \frac{v}{c} \cos \theta}{\vartheta_S \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{1}{\vartheta_O}$$

$$\text{ozioroma} \quad \vartheta_O = \vartheta_S \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 - \frac{v}{c} \cos \theta}$$

Limitna primeta:

$$\text{za } \theta = 0^\circ \quad \vartheta_O = \vartheta_S \sqrt{\frac{1 + \frac{v}{c}}{1 - \frac{v}{c}}}$$

$$\text{za } \theta = 90^\circ \quad \vartheta_O = \vartheta_S \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Pri  $90^\circ$  imamo transversalni Dopplerjev pojav. Torej sprejem frekvence, tudi ko se izvor giblje pravokotno na zveznico med njim in opazovalcem. To je neposredna posledica dilatacije časa.

## 1.4 Prostor-čas

LT prepíšemo malo lepše:

$$ct' = \gamma(ct - \beta x)$$

$$x' = \gamma(x - \beta ct)$$

Produkt  $ct$  bi radi videli kot četrto (ali prvo ali ničto) koordinato poleg  $x, y, z$ . Vpeljemo štirirazsežen prostor, točke v tem prostoru so določene s četvercem  $\{ct, x, y, z\}$ . Uredimo jih v

$$\underline{\mathbf{r}} = (ct, x, y, z)^T \quad \text{Vektor četverec (four-vector)}$$

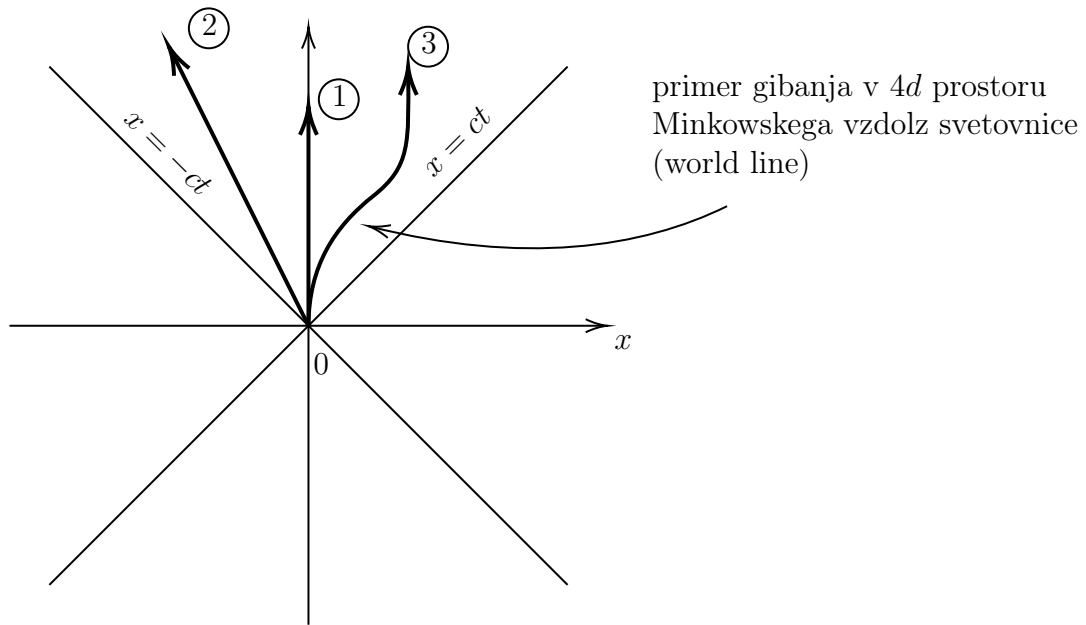
alternativni zapis:  $\underline{\mathbf{r}} = (ct, \mathbf{r})$



LT lahko zapišemo v vektroski obliki

$$\underline{\mathbf{r}}' = \underline{\mathbf{L}} \underline{\mathbf{r}}, \quad \underline{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dogodke definiramo tako, da določimo njihovo lego (točko v 3d prostoru) in čas, ko se zgodi. Možen način prikaza je na preseku svetlobnega stožca (na papirju gledamo samo  $ct, x$ ).



#### 1.4.1 Relativistične invariante

Invarianta je količina, ki se pri prehodu med koordinatnima sistemoma ne spremeni klasične invariante. Čas, masa, velikost razdalje med dvema točkama. V teoriji relativnosti čas in razdalja nista več invariantna (dilatacija časa in dolžin). Razdalja merjena v 3d:

$$|\Delta \mathbf{r}| = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|, \quad (\Delta \mathbf{r})^2 = \Delta \mathbf{r} \cdot \Delta \mathbf{r} = (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2$$

Ali bi delalo v 4d?

$$(\Delta \underline{\mathbf{r}})^2 = (c\Delta t)^2 + (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2$$

Poglejmo to v sistem  $S'$ :

$$\begin{aligned} c\Delta t' &= \gamma(c\Delta t - \beta\Delta x) & \Delta x' &= \gamma(\Delta x - \beta c\Delta t) \\ \Rightarrow (\Delta \underline{\mathbf{r}}')^2 &= (c\Delta t')^2 + (\Delta x')^2 + (\Delta y')^2 + (\Delta z')^2 \\ &= \gamma^2[c\Delta t - \beta\Delta x]^2 + \gamma^2[\Delta x - \beta c\Delta t]^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2 \\ &= \gamma^2[(1 + \beta^2)((c\Delta t)^2 + (\Delta x)^2) - 4\beta c\Delta t\Delta x] + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2 \\ &\quad \text{hodi narobe (raje -)} \quad \text{hodi narobe} \end{aligned}$$

Kaj pa če bi imel skalarni produkt obliko:

$$(\Delta \underline{\mathbf{r}})^2 = (\Delta s)^2 = +(c\Delta t)^2 - (\Delta x)^2 - (\Delta y)^2 - (\Delta z)^2$$

Razdalja (oz. kvadrat razdalje) med dogodkoma je očitno invariantna na LT. Potem se račun izide  $(\Delta \underline{\mathbf{r}}')^2 = (\Delta \underline{\mathbf{r}})^2$ . Namesto običajnega skalar-nega produkta v evklidskem prostoru imamo skalarni produkt četvercev v prostoru Minkowskega.

$$\underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\mathbf{b}} = a_0 b_0 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3 = \sum_{\alpha, \beta=0}^3 a_\alpha \eta_{\alpha\beta} b_\beta$$

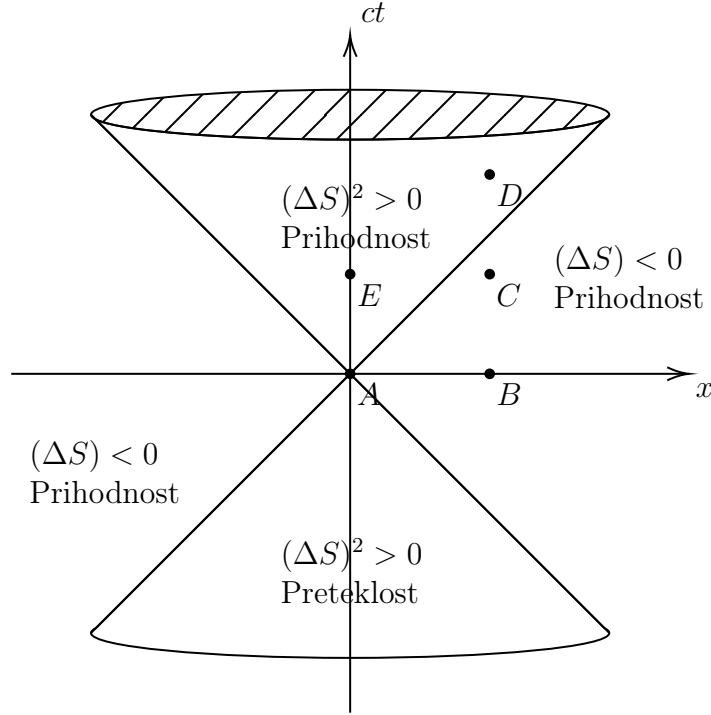
$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{matrix} \text{metrični tenzor igra ključno} \\ \text{vlogo v splošni teoriji re-} \\ \text{lativnosti kajti tam } \eta \text{ po-} \\ \text{stane odvisen od porazdeli-} \\ \text{tve mase} \end{matrix}$$

Opozorilo: ponekod pišejo  $\underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\mathbf{b}} = -(c\Delta t)^2 + (\Delta \underline{\mathbf{r}})^2$ .

## 1.5 Dogodki in vzročnost (kavzalnost)

Razmik/razdalja med dogodkoma je lahko:

- Krajevnega tipa oz. space-like  $((\Delta S)^2 < 0)$ : v tem primeru  $\exists$  inercialni sistem, v katerem se dogodka zgodita na različnih krajih, a ob istem času. To pomeni, da ne moreta biti v vzročni zvezi.
- Časovnega tipa oz. time-like  $((\Delta S)^2 > 0)$ :  $\exists$  inercialni sistem, v katerem se dogodka zgodita na istem mestu, toda ob različnih časih: takšna dogodka sta lahko v vzročni zvezi.
- Svetlobni tip  $((\Delta S)^2 = 0)$



$$\begin{aligned}\text{Dogodek } A : \quad \mathbf{r}_A &= (0, 0) \\ \text{Dogodek } B : \quad \mathbf{r}_B &= (0, 2SL) \\ \text{Dogodek } E : \quad \mathbf{r}_E &= (1SL, 0)\end{aligned}$$

Razmik med dogodkoma  $A$  in  $B$  je

$$\begin{aligned}(\Delta S_{AB})^2 &= (ct_B - ct_A)^2 - (x_B - x_A)^2 = -4SL^2 < 0 \\ \Rightarrow \text{razmik je krajevnega tipa, saj se } A \text{ in } B \text{ razlikujeta le po kraju}\end{aligned}$$

Razmik med  $A$  in  $E$  je

$$\begin{aligned}(\Delta S_{AE})^2 &= (ct_E - ct_A)^2 - (x_E - x_A)^2 = 1SL^2 > 0 \\ \Rightarrow \text{razmik je časovnega tipa, saj se } A \text{ in } E \text{ razlikujeta le po času}\end{aligned}$$

Denimo, da je  $C$  dogodek: pristanek rakete po 1 letu na planetu, oddaljenem  $2SL$ :  $\mathbf{r}_C = (\underbrace{1SL}_{=ct_c}, \underbrace{2SL}_{x_c})$ . Razmik med  $A$  in  $C$  je:

$$(\Delta S_{AC})^2 = (ct_C - ct_A)^2 - (x_C - x_A)^2 = 1SL^2 - 4SL^2 < 0$$

Ali sta lahko  $A$  in  $C$  v vzročni zvezi? Ker je  $(\Delta S_{AC})^2 < 0$ , ne moreta biti! Iz slike je jasno, da bi raketa morala imeti  $v = 2c$ . Toda lahko poiščemo inercialni sistem, v katerem sta  $A$  in  $C$  sočasna.

$$\begin{aligned}t_A &= t'_A = 0 \text{ sinhronizirani uri pri } x_A = x'_A = 0 \\ t'_C &= \gamma(t_C - \frac{vx_c}{c^2}) = t'_A = 0 \Rightarrow c^2 t_C = vx_c \Rightarrow v = \frac{c}{2}\end{aligned}$$

Za opazovalca, ki se giblje s  $v = \frac{c}{2}$ , se  $A$  in  $C$  zgodita sočasno.

Dogodek  $D$   $\underline{r}_D = (3SL, 2SL)$

Razmik med dogodkoma  $A$  in  $D$ :

$$(\Delta S_{AD})^2 = (ct_D - ct_A)^2 - (x_D - x_A)^2 = (3SL)^2 - (2SL)^2 = 5SL^2 > 0$$

$\Rightarrow$  razmik je časovnega tipa. Dogodka sta lahko tudi vzročno povezana

Preverimo ali  $\exists$  opazovalni sistem, v katerem se ta dogodka zgodita na istem kraju?

$$x'_D = \gamma(x_D - vt_D) = x'_A = 0$$

$$\Rightarrow v = \frac{x_D}{t_D} = \frac{X_{Dc}}{t_{Dc}} = \frac{2}{3}c$$

Jasno, da je to opazovalec, ki se pelje skupaj z raketo.

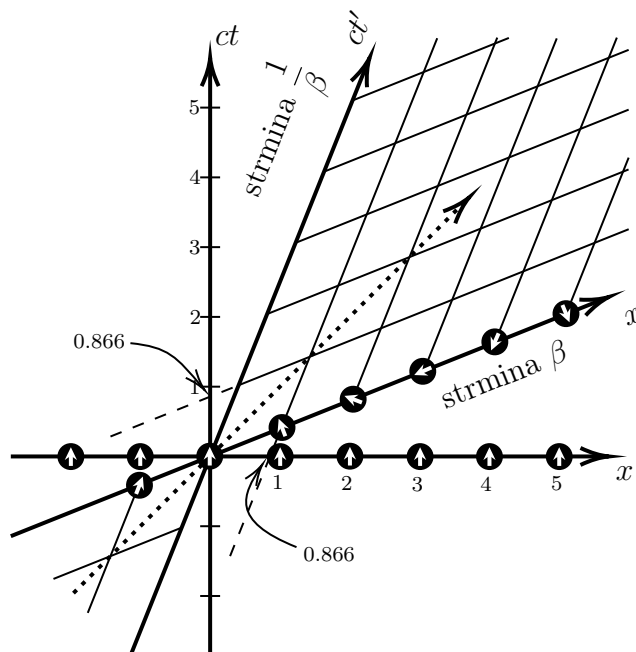
### 1.5.1 Sile in kavzalnost

Telo vpliva na drugo telo s silo. Sprememba na enem telesu je vzročno povezana s spremembo na drugem če sta vzročno povezani. Torej velja, da je kvadrat razmika med dogodkoma  $> 0$ .

$$(c\Delta t)^2 - (\Delta x)^2 \geq 0$$

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \leq c$$

Hitrost širjenja motnje ne more biti hitrejša od hitrosti svetlobe, sledi iz načela kavzalnosti.



Os  $ct$  v sistemu  $S$  je množica vseh točk za katere je  $x = 0$  torej je  $ct'$  množica točk za katere velja

$$\begin{aligned}x' &= 0 \\x' &= \gamma(x - vt) \equiv 0 \\ \Rightarrow x = vt = \beta ct \text{ oz. } ct &= \frac{1}{\beta}x \\ \text{kjer je strmina} &= \tan \theta = \frac{1}{\beta}\end{aligned}$$

Analogno za os  $x'$  velja, daje množica vseh točk za katere je  $ct' = 0$ :

$$\begin{aligned}t' &= \gamma(t - \frac{v}{c^2}x) \equiv 0 \\ \Rightarrow t &= \frac{v}{c^2}x \Rightarrow ct = \beta x \\ \text{kjer je strmina} &= \beta\end{aligned}$$

Paradoks dvojčkov.

## 1.6 Relativistična gibalna količina in energija

Kinematika je puščobna, zanimivosti so v dinamiki. Transformacija pospeškov:

$$a'_x = \frac{a_x}{\gamma^3(1 - \frac{vu_x}{c^2})^3}$$

Torej  $\frac{\mathbf{F}}{m}$  se mora tudi ustrezno transformirati, sicer  $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$  ne bo veljalo v poljubnem inercialnem sistemu. Razumno je pričakovati, da  $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$  ni v redu pri  $v \rightarrow c$ . Potrebujemo zakon gibanj, ki se bo prevedel na Newtonovo obliko, ko  $v \ll c$ .

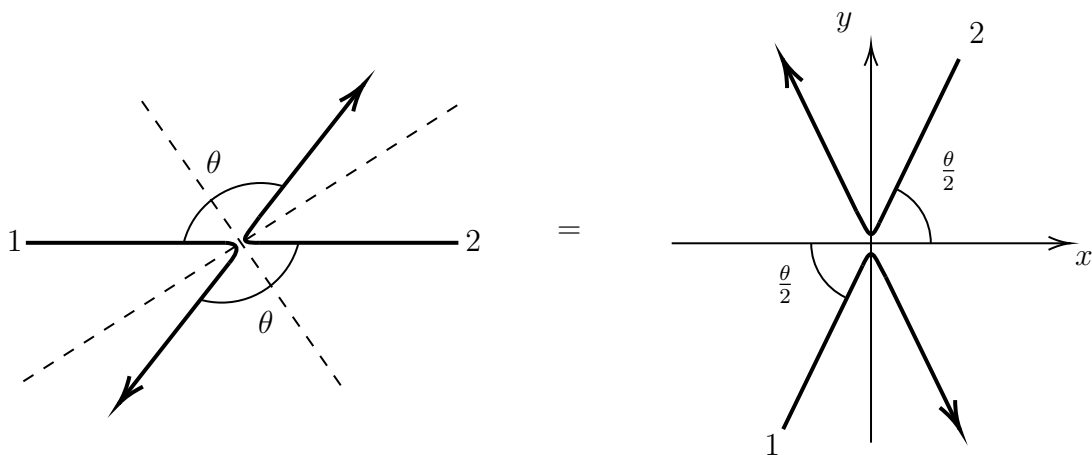
Najprej se lotimo gibalne količine. Predpostavimo, da ima GK obliko

$$\mathbf{p} = m_v \cdot \mathbf{v}$$

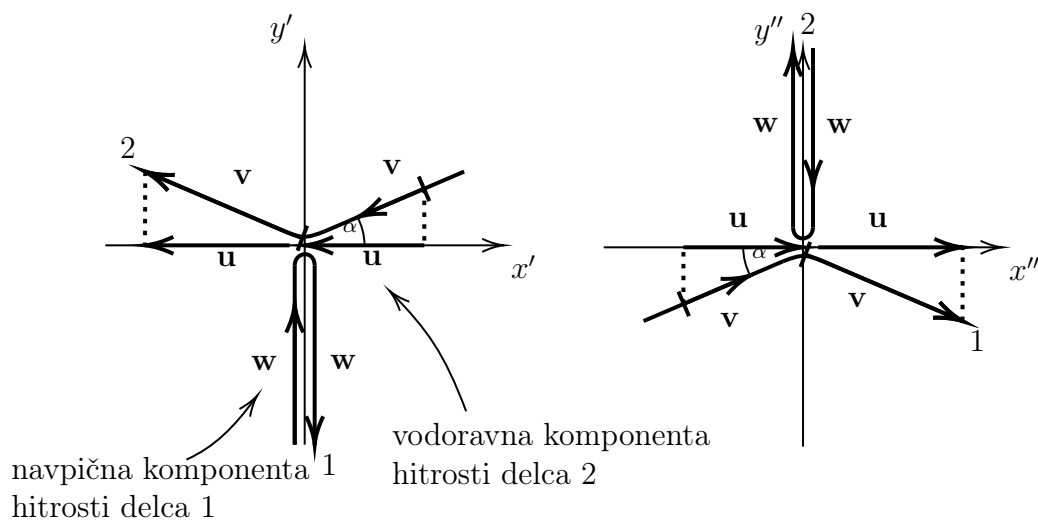
Radi bi pokazali, da je

$$m_v = \frac{\text{naša običajna masa } m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Oglejmo si elastični prožni trk dveh enakih delcev z nasprotno enakima hitrostima.



Ta trk si oglejmo z vidika sistema, ki se giblje s hitrostjo  $\rightarrow$  ali  $\leftarrow$ , ki je enaka vodoravni komponenti hitrosti enega od njih.



Formula za transformacijo hitrosti:

$$u_y = \frac{u'_y}{\gamma_v(1 + \frac{u'_x v}{c^2})} = \frac{u'_y \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 + \frac{u'_x v}{c^2}}$$

Toda pri nas je

$$\begin{aligned} v &\rightarrow u \\ u_y &= u \tan \alpha \\ u'_y &= w \\ u'_x &= 0 \end{aligned}$$

Vstavimo v enačbo 1.6:

$$u \tan \alpha = \frac{w}{\gamma_u} = w \sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}} = w \underbrace{\sqrt{1 - \beta_u^2}}_{\text{vedno } < 1} < u$$

$\Rightarrow \mathbf{p} = \sum_i m \mathbf{v}_i$  ne more veljati pri visokih hitrostih

$\Rightarrow$  Sprememba prečne GK “navpično” gibajočega se delca je

$$\Delta p = 2m_w w$$

$\Rightarrow$  Poševno sipani delec ima vodoravno hitrost  $u$  in navpično  $w\sqrt{1-\beta_u^2}$ , njegova relativistična masa (tega pojma se pravzaprav želimo znebiti) je  $m_v$ . Njegova sprememba prečne GK je torej

$$\Delta p' = 2m_v w \sqrt{1-\beta_u^2}$$

Če naj bo celotna prečna GK enaka nič, mora biti razmerje  $\frac{\Delta p}{\Delta p'} = 1$

$$\frac{\Delta p}{\Delta p'} = \frac{2m_w w}{2m_v w} \sqrt{1-\beta_u^2} \equiv 1 \Rightarrow \frac{m_w}{m_v} = \sqrt{1-\beta_u^2}$$

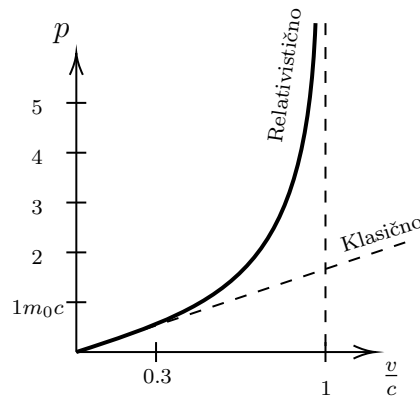
Vzemimo limitni primer, ko je  $w$  zelo majhna (zelo “nežen” trk)  $\Rightarrow v$  in  $u$  praktično enaka in  $m_w \rightarrow m_0$ ,  $m_v \rightarrow m_u$

- Relativistična masa (tega izraza ne bomo marali, samo mirovno maso bi radi pojmovali kot bistveno/intrinzično lastnost delca):

$$m_u = \frac{\overbrace{m_0}^{\text{mirovna masa}}}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}$$

Relativistična gibalna količina (dober pojem):

$$\mathbf{p} = \gamma_v m_0 \mathbf{v} = \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$



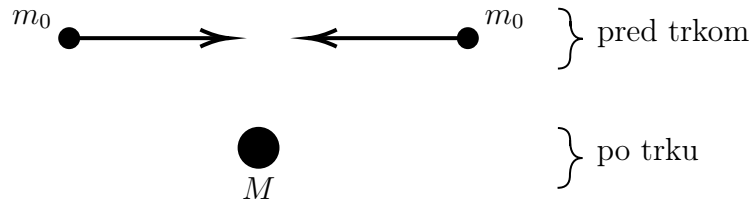
Trik z zelo majhno hitrostjo  $w$  ni potreben, ker vedno velja (po Pitagori)

$$u^2 + w^2(1-\beta_u^2) = v^2$$

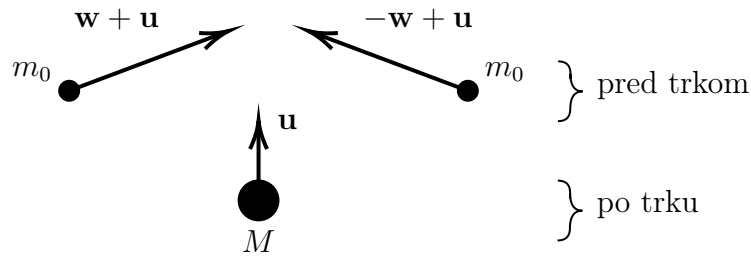
$$m_w = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta_w^2}}, \quad m_v = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta_v^2}}$$

$$\frac{m_w^2}{m_v^2} = \frac{1-\beta_v^2}{1-\beta_w^2} = \frac{1-\beta_u^2-\beta_w^2(1-\beta_u^2)}{1-\beta_w^2} = 1 - \frac{\beta_u^2(1-\beta_w^2)}{1-\beta_w^2} = 1-\beta_u^2$$

Kot neelastični (neprožni) trk si oglejmo primer centralnega trka identičnih teles z nasprotno enakima hitrostima  $\pm w$ .



Zamislimo si droben popravek k tej sliki



Kot da bi gledali iz dvigala, ki gre s hitrostjo  $-\mathbf{u}$  nazvdol. Če naj se ohrani navpična komponenta GK:

pred trkom  $p \approx 2m_w u$

po trku  $p' \approx M_u u = M_0 u$  ker je  $u$  tako majhen, da je  $M_u \approx M_0$

zahtevamo  $p = p' \Rightarrow M_0 = 2m_w$

Da zadostimo zahtevi po ohranitvi GK, mora biti masa zleпка večja od vsote mirovnih mas projektilov.

Zdaj pa še relativistična energija. Kako smo vpeljali kinetično energijo v klasični fiziki?

$$F = ma - m \frac{dv}{dt} = \frac{dv}{dx} \frac{dx}{dt} = mv \frac{dv}{dx} \rightarrow F dx = mv dt$$

$$\int_v^{v'} m \tilde{v} d\tilde{v} = \int_x^{x'} F d\tilde{x} \Rightarrow \Delta E_k = \frac{mv'^2}{2} - \frac{mv^2}{2} = A = F \Delta x$$

Pri relativistični izpeljavi je potrebna previdnost zaradi  $m = m(v)$ .

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d(\gamma m_0 \mathbf{v})}{dt}$$

V 1d:

$$F = \frac{d}{dt}(\gamma m_0 v) = \frac{dx}{dt} \frac{d}{dx}(\gamma m_0 v) \rightarrow F dx = m_0 v d(\gamma v)$$

$$d(\gamma v) = v d\gamma + \gamma dv = v \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{3}{2}} \frac{v dv}{c^2} + \gamma dv$$

$$= \frac{v^2}{c^2} \gamma^3 dv + \gamma dv = \left(\beta^2 + \frac{1}{\gamma^2}\right) \gamma^3 dv = \gamma^3 dv$$

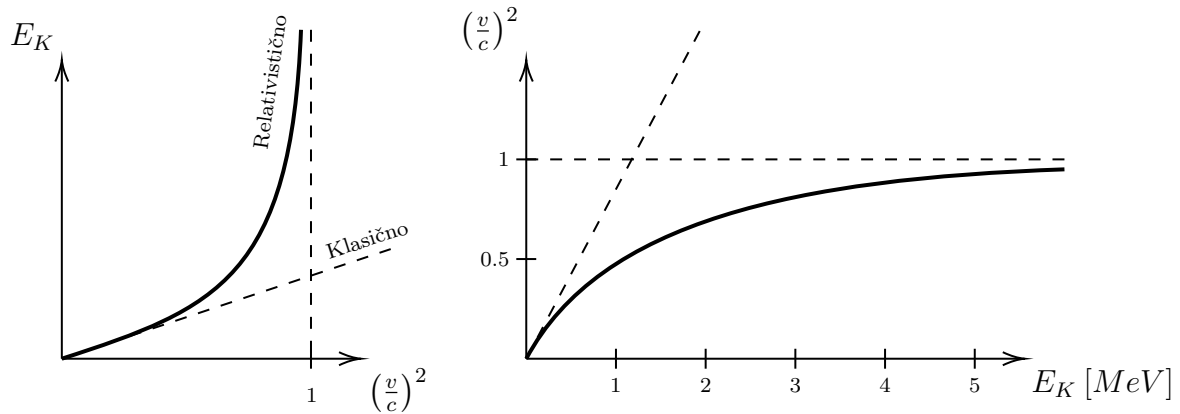


Potrebujemo  $m_0 \int \gamma^3(v) v dv$ . Uvedemo novo spremenljivko  $u^2 = \frac{1}{\gamma^2} = 1 - \beta^2 = 1 - \frac{v^2}{c^2}$ .

$$u du = -\frac{1}{c^2} v dv$$

$$m_0 \int_0^v \gamma^3(v) v dv = -m_0 c^2 \int_{v=0}^v u^{-3} u du = m_0 c^2 \frac{1}{u} \Big|_{v=0}^v = m_0 c^2 \gamma \Big|_{v=0}^v = m_0 c^2 \gamma - m_0 c^2$$

$$\Rightarrow E_K = m_0 c^2 (\gamma - 1) \quad \text{relativistična kinetična energija}$$



Energija delca v mirovanju :  $E_0 = m_0 c^2 =$  mirovna energija (rest energy)

Energija delca v gibanju :  $E = \gamma E_0 = \gamma m_0 c^2 =$  celotna energija (total energy)

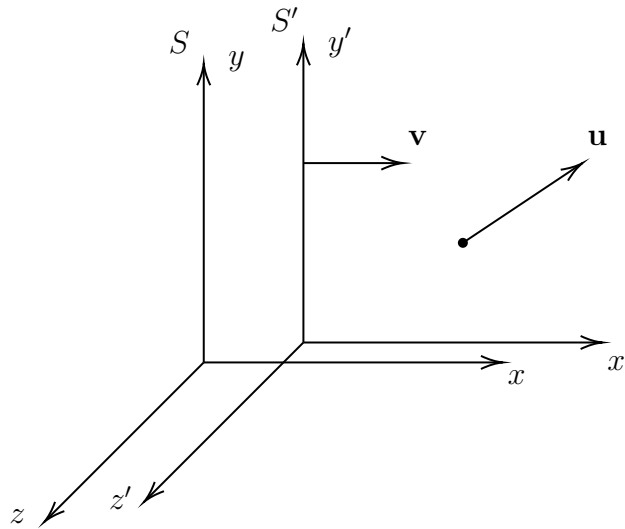
$$E = E_0 + E_K = \gamma m_0 c^2$$

$$E_0 = m_0 c^2$$

$$E_{0K} = (\gamma - 1) m_0 c^2$$

Mirovno maso bomo pisali kar kot  $m$  (ne  $m_0$ ), kadar ne bo nevarnosti za zmedo.

### 1.6.1 Relativistična transformacija GK in E



V sistemu  $S$ :

$$\begin{aligned} E &= \gamma_u mc^2 \\ p_x &= \gamma_u mu_x \\ p_y &= \gamma_u mu_y \\ p_z &= \gamma_u mu_z \\ \gamma_u &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \end{aligned}$$

V sistemu  $S'$ :

$$\begin{aligned} E' &= \gamma'_u mc^2 \\ p'_x &= \gamma'_u mu'_x \\ p'_y &= \gamma'_u mu'_y \\ p'_z &= \gamma'_u mu'_z \\ \gamma'_u &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u'^2}{c^2}}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\gamma'_u &= \left( 1 - \frac{u_x^{2'} + u_y^{2'} + u_z^{2'}}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \\
&= \left( 1 - \frac{(u_x - v)^2}{c^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)^2} - \frac{u_y^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)}{c^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)} - \frac{u_z^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)}{c^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)} \right)^{-\frac{1}{2}} \\
&= \left( \frac{c^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right) - (u_x - v)^2 - u_y^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right) - u_z^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)}{c^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)} \right)^{-\frac{1}{2}} \\
&= \left( \frac{c^2 - 2u_x v + u_x^2 \frac{v^2}{c^2} - u_x^2 + 2u_x v - v^2 - u_y^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right) - u_z^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)}{c^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)} \right)^{-\frac{1}{2}} \\
&= \left( \frac{c^2 - v^2 - u^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)}{c^2 \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)} \right)^{-\frac{1}{2}} = \gamma_v \frac{1 - \frac{u_x v}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} = \gamma_v \gamma_u \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right) = \gamma'_u
\end{aligned}$$

To uporabimo v enačbi za  $E'$ :

$$\begin{aligned}
E' &= \gamma'_u m c^2 = \frac{m c^2}{\sqrt{1 - \frac{u'^2}{c^2}}} = \gamma_v \left[ \frac{m c^2}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - \frac{m c^2 u_x \frac{v}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \right] \\
E' &= \gamma_v (E - v p_x)
\end{aligned}$$

Po podobnem računu (D.N.) dobimo

$$\begin{aligned}
p'_x &= \gamma'_u m u'_x = \frac{m u'_x}{\sqrt{1 - \frac{u'^2}{c^2}}} = \gamma_v \left[ \frac{m u_x}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - \frac{m v \frac{c^2}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \right] \\
p'_x &= \gamma_v \left( p_x - \frac{v}{c^2} E \right) \\
p'_y &= p_y \\
p'_z &= p_z \\
E' &= \gamma_v (E - v p_x) & E &= \gamma_v (E' + v p'_x) \\
p'_x &= \gamma_v \left( p_x - \frac{v E}{c^2} \right) & p_x &= \gamma_v \left( p'_x + \frac{v E'}{c^2} \right) \\
p'_y &= p_y & p_y &= p'_y \\
p'_z &= p_z & p_z &= p'_z
\end{aligned}$$

Vse na moč podobno LT za časovne in krajevne koordinate. Kako bi to organizirali v četverec? Spomnimo se na lastni čas  $\tau$ , koordinatni čas  $t$  (proper, improper)

$$dt = \gamma d\tau = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2(t)}{c^2}}} d\tau$$

Komponente običajne hitrosti,  $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ , ne tvorijo vektorja (za potrebe LT), ker  $dt$  ni skalar pri LT. Kaj hočemo povedati:

$$(ds)^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dy^\nu = c^2(dt)^2 - (dx)^2 - (dy)^2 - (dz)^2 \stackrel{!}{=} c^2(d\tau)^2$$

tu je implicirano  $\sum_{\mu,\nu}$

$\tau$  je skalar! (glede na LT).

$$\begin{aligned} ds &= c d\tau \quad \text{oziroma} \quad d\tau = \frac{1}{c} ds \\ d\tau &= \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{c} ds = \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{c} \sqrt{\eta_{\mu\nu} dx^\mu dy^\nu} \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 - \frac{1}{c^2} \left[ \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 + \left( \frac{dy}{dt} \right)^2 + \left( \frac{dz}{dt} \right)^2 \right]} dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 - \frac{v^2(t)}{c^2}} dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{dt}{\gamma(t)} = \Delta\tau \\ \Rightarrow \quad \text{Torej tudi} \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \left( c, \frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt} \right) \quad \text{ni četverec} \\ \underline{\mathbf{r}} &= (ct, x, y, z) \end{aligned}$$

Pač pa je četverec tole:  $\underline{\mathbf{v}} = \frac{d\underline{\mathbf{r}}}{d\tau} = \left( c \frac{dt}{d\tau}, \frac{dx}{d\tau}, \frac{dy}{d\tau}, \frac{dz}{d\tau} \right)$

$$= \gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \gamma(c, v_x, v_y, v_z) = \gamma(c, \mathbf{v}) = \underline{\mathbf{v}}$$

Četverec hitrosti

Če to pomnožimo s skalarno količino, ki je invariantna na LT, spet dobimo četverec, na primer z mirovno maso:

$$\underline{\mathbf{p}} = m\underline{\mathbf{v}} = (m\gamma c, m\gamma \mathbf{v}) = \left( \frac{E}{c}, \mathbf{p} \right)$$

Relativistična zveza med energijo in gibalno količino:

$$\underline{\mathbf{p}} = \left( \frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \quad \text{ker je to četverec, ima svojo invarianto:}$$

$$\underline{\mathbf{p}} \cdot \underline{\mathbf{p}} = \text{invarianta} \Leftrightarrow \text{enak rezultat v katerem koli inercialnem sistemu}$$

**Zgled:**

1. v  $S$ , kjer se giblje delec s hitrostjo  $v$ :

$$E = \gamma mc^2$$

$$\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}$$

2. v  $S'$ , kjer ima

$$E_0 = \gamma mc^2 \quad \text{samo mirovno energijo}$$

$$\mathbf{p}_0 = 0 \quad \text{miruje v } S'$$

$$\Rightarrow \underline{\mathbf{p}} = \left( \frac{E}{c}, \mathbf{p} \right), \quad \underline{\mathbf{p}}' = \left( \frac{E_0}{c}, 0 \right)$$

$$\underline{\mathbf{p}} \cdot \underline{\mathbf{p}} \stackrel{!}{=} \underline{\mathbf{p}}' \cdot \underline{\mathbf{p}}' = \left( \frac{E}{c} \right)^2 - \mathbf{p}^2 = \left( \frac{E_0}{c} \right)^2 - 0$$

$$\Rightarrow E^2 = m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2 \quad E = E_K + E_0$$

Brezmasni delci  $m \rightarrow 0 \Rightarrow E = pc$  se gibljejo s svetlobno hitrostjo

### 1.6.2 Enačba gibanja

Oziroma relativistični “Newtonov zakon”. Videli smo, da  $\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt}$  ne more biti pravilna relativistična gibalna enačba, saj dopušča, da bi lahko v izbranem inercialnem sistemu  $v \rightarrow \infty$ . Pravilna oblika:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad \mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}$$

Najpogosteje obravnavamo  $EM$  (Lorentzevo) silo  $\mathbf{F} = e(\boldsymbol{\mathcal{E}} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$  in Maxwellske enačbe:

$$e(\boldsymbol{\mathcal{E}} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = m \frac{d(\gamma \mathbf{v})}{dt} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}, \quad \gamma = \gamma(v)$$

Ta napisana sila ni del četverca, ker imamo na desni odvod po koordinatnem času. Torej se običajna sila  $\mathbf{F}$  ne transformira z LT. Lahko pa tvorimo četverec, ki mu pravimo sila Minkowskega, tako da odvajamo četverec GK po lastnem času.

$$\underline{\mathcal{F}} = \frac{d\underline{\mathbf{p}}}{d\tau} = \gamma \frac{d\underline{\mathbf{p}}}{dt}$$

$$\underline{\mathcal{F}} = \left( \underbrace{\gamma \frac{d}{dt} \left( \frac{E}{c} \right)}_{\frac{dE}{dt} = \text{moč sile}}, \underbrace{\gamma \frac{d\mathbf{p}}{dt}}_{\mathbf{F}} \right) = \left( \gamma \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}}{c}, \gamma \underbrace{\mathbf{F}}_{\text{splošen } \mathbf{F}} \right)$$

Klasična limita ( $v \ll c$ ):  $\underline{\mathcal{F}} = (0, \mathbf{F})$ . Zdaj lahko gibalno enačbo formalno zapišemo v obliki “Newtonovoega zakona”

$$\underline{\mathcal{F}} = m \frac{d\underline{\mathbf{v}}}{d\tau}$$

To je očitno Lorentzevo-invariantno. Obe strani enačbe se transformirata po LT. Sila Minkowskega podrobneje:

$$\underline{\mathcal{F}} = \frac{d\underline{\mathbf{p}}}{d\tau} = \frac{d\underline{\mathbf{p}}}{dt} = \gamma \left( \frac{1}{c} \frac{dE}{dt}, \frac{d\mathbf{p}}{dt} \right)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{c} \frac{dE}{dt} \stackrel{E=\gamma mc^2}{=} mc \frac{d\gamma}{dt} = mc\gamma^3 \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \\
\text{Kjer je } & \frac{d\gamma}{dt} = \frac{d}{dt} \left( 1 - \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \\
& = \left( 1 - \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \left( -\frac{1}{2} \right) \left( -\frac{2\mathbf{v}}{c^2} \right) \underbrace{\frac{d\mathbf{v}}{dt}}_{\mathbf{a}} \\
& = \gamma^3 \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \\
\Rightarrow \frac{d\mathbf{p}}{dt} & \stackrel{\mathbf{p}=m\gamma\mathbf{v}}{=} m \frac{d}{dt} (\gamma\mathbf{v}) = m \left( \frac{d\gamma}{dt} \mathbf{v} + \gamma \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) = m\gamma\mathbf{a} + m\gamma^3 \frac{(\mathbf{a} \cdot \mathbf{v})}{c^2} \mathbf{v} \\
\text{Torej } \underline{\mathcal{F}} & = \gamma \left( mc\gamma^3 \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{v}}{c^2}, m\gamma\mathbf{a} + m\gamma^3 \frac{(\mathbf{a} \cdot \mathbf{v})}{c^2} \mathbf{v} \right)
\end{aligned}$$

In če to delimo z  $m$ , dobimo četverec pospeška

$$\Rightarrow \underline{\mathbf{a}} = \frac{d^2 \mathbf{r}}{d\tau^2} = \gamma \left( \gamma^3 \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{v}}{c^2}, \gamma\mathbf{a} + \gamma^3 \frac{(\mathbf{a} \cdot \mathbf{v})}{c^2} \mathbf{v} \right)$$

V klasični limiti ( $v \ll c$ ):  $\underline{\mathbf{a}} = (0, \mathbf{a})$

S tem lahko napišemo "2. Newtonov zakon":

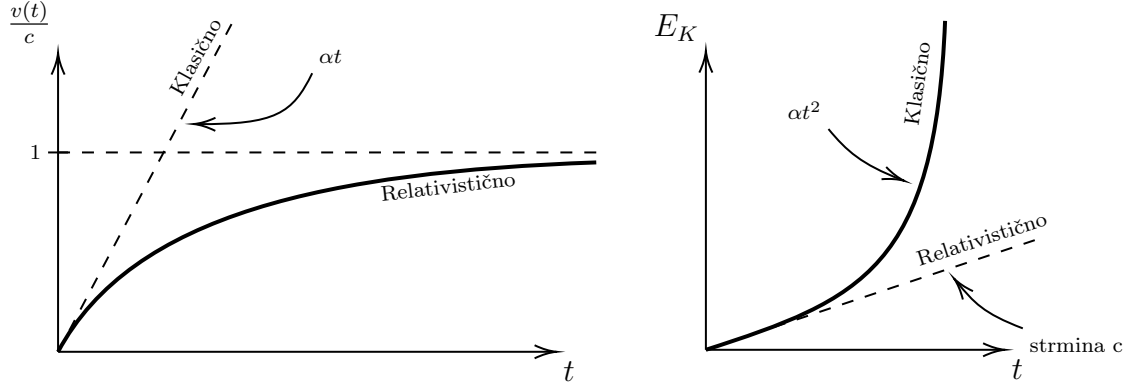
$$\underline{\mathcal{F}} = m\underline{\mathbf{a}}$$

## 1.7 Gibanje delca v EM

Gibanje delca v konstantnem električnem polju (os  $x \parallel \mathcal{E}$ ):

$$\begin{aligned}
& md(\gamma v) = F dt = e\mathcal{E} dt \\
\text{začetni pogoj : } & v(t=0) = 0 \text{ delec sprva miruje} \\
& \gamma v = \frac{e\mathcal{E}}{m} t = c\alpha t \quad \alpha = \frac{e\mathcal{E}}{mc} \left[ \frac{1}{s} \right] \\
\text{se pravi : } & \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{e\mathcal{E}}{mc} t \\
& \Rightarrow \beta = \frac{v}{c} = \frac{\alpha t}{\sqrt{1+\alpha^2 t^2}} \\
\text{oziroma } \gamma & = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \sqrt{1+\alpha^2 t^2}
\end{aligned}$$

Limita  $v = \frac{e\mathcal{E}}{m} t \ll c \Rightarrow \beta(t) = \alpha t$ .



Položaj delca: integriramo hitrost:

$$\begin{aligned}
 x(t) &= \int_0^t v(t) dt = c \int_0^t \beta(t) dt = c \int_0^t \frac{\alpha t}{\sqrt{1 + \alpha^2 t^2}} dt = \frac{mc^2}{e\mathcal{E}} (\sqrt{1 + \alpha^2 t^2} - 1) \\
 &\xrightarrow{t \ll \frac{1}{\alpha}} \frac{1}{2} \left( \frac{e\mathcal{E}}{m} \right) t^2 \\
 \gamma &= \sqrt{1 + \alpha^2 t^2} \Rightarrow \\
 \tau &= \int_0^t \frac{dt}{\gamma} = \int_0^t \frac{dt}{\sqrt{1 + \alpha^2 t^2}} = \frac{1}{\alpha} \sinh^{-1}(\alpha t) \\
 \Rightarrow \quad t &= \frac{1}{\alpha} \sinh(\alpha \tau) \quad \begin{array}{l} \text{za dolge čase je koordinatni} \\ \text{čas } (t) \text{ eksponentno daljši} \\ \text{od lastnega } (\tau) \end{array}
 \end{aligned}$$

Krajevno spremenljivo električno polje:

Opravimo delo  $A = e \int \mathcal{E} ds = eU$  ( $U = \Delta U$ ).

$$\begin{aligned}
 eU &= mc^2(\gamma - 1) - \underset{\text{potem}}{0} \quad \text{samo sprememba kinetične energije} \\
 \rightarrow \quad \frac{\gamma}{\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}} &= \frac{eU + mc^2}{mc^2} \Rightarrow \beta^2 = 1 - \frac{m^2 c^4}{(eU + mc^2)^2} \\
 \beta \frac{v}{c} &= \sqrt{\frac{eU(eU + 2mc^2)}{(eU + mc^2)^2}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2eU}{mc^2}} & ; eU \ll mc^2 \\ 1 & ; eU \gg mc^2 \end{cases}
 \end{aligned}$$

Konstantno magnetno polje:

Sila v magnetnem polju  $\mathbf{F} = e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ , je  $\perp$  na hitrost delca, zato se  $|\mathbf{v}|$  ne spremeni in posledično tudi ne  $\gamma = \gamma(v) = \gamma(|\mathbf{v}|^2)$ :

$$m \frac{d}{dt}(\gamma \mathbf{v}) = m\gamma \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

Radialni pospešek delca je  $\omega^2 r = \omega v = \frac{v^2}{r}$

$$m\gamma\omega v = evB \quad \Rightarrow \quad \omega_c = \frac{eB}{\gamma m} \quad \text{ciklotronska frekvenca}$$

$$m\gamma\frac{v^2}{r} = evB \quad \Rightarrow \quad r = \frac{m\omega v}{eB} = \frac{p}{eB} \quad \begin{array}{l} \text{polmer krožnice, po kateri} \\ \text{kroži delec v homogenem} \\ \text{MP } B \end{array}$$

### 1.7.1 Transformacija električnega in magnetnega polja

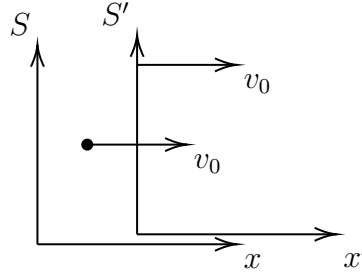
Razmeroma lahko opravilo, če imamo silo Minkowskega in LT. V primeru EM sile smo imeli četverec

$$\underline{\mathcal{F}} = \left( \gamma \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}}{c}, \gamma \mathbf{F} \right)$$

Sila  $\underline{\mathcal{F}}$  se transformira po LT, zato je transformacija iz sistema  $S'$  v  $S$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_x &= \gamma F_x = \gamma_0 (\underline{\mathcal{F}}'_x + \beta_0 \underline{\mathcal{F}}'_0) \\ \mathcal{F}_y &= \gamma F_y = \gamma' F'_y \\ \mathcal{F}_z &= \gamma F_z = \gamma' F'_z \end{aligned}$$

kjer  $\gamma_0$  vsebuje info o LT ( $S \rightarrow S'$ ). Ob takšni sliki  $\gamma = \gamma_0, \gamma' = 1 (v' = 0)$ .



Pišemo prispevke k  $\mathcal{F}_x$ :

$$\begin{aligned} \gamma_0 F_x &= \gamma_0 (e\mathcal{E}_x + e \underbrace{(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_x}_{v_y B_z - v_z B_y}) = \gamma_0 \left( e\mathcal{E}'_x + e(\mathbf{v}' \times \mathbf{B}')_x + \beta_0 \frac{\mathbf{F}' \cdot \mathbf{v}'}{c} \right) \\ \Rightarrow \mathcal{E}_x &= \mathcal{E}'_x \end{aligned}$$

Za komponento  $y$  moramo upoštevati tudi magnetni del sile:

$$\begin{aligned} \gamma_0 F_y &= \gamma_0 (e\mathcal{E}_y + e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_y) = 1 \cdot (e\mathcal{E}'_y + e(\mathbf{v}'_{=0} \times \mathbf{B}')_y) \\ \text{kjer je } (\mathbf{v} \times \mathbf{B})_y &= -v_x B_z + v_z B_x = -v_0 B_z \\ \text{Torej } \gamma_0 (\mathcal{E}_y - v_0 B_z) &= \mathcal{E}'_y \\ \text{in analogno } \gamma_0 (\mathcal{E}_z + v_0 B_y) &= \mathcal{E}'_z \end{aligned}$$

Obratni transformaciji sta:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_y &= \gamma_0 (\mathcal{E}'_y + v_0 B'_z) \\ \mathcal{E}_z &= \gamma_0 (\mathcal{E}'_z + v_0 B'_y) \end{aligned}$$



Vstavimo v obratne transformacije in izpeljemo:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_y &= \gamma_0(\gamma_0(\mathcal{E}_y - v_0 B_z) + v_0 B'_z) = \gamma_0^2 \mathcal{E}_y - v_0 \gamma_0^2 B_z + v_0 \gamma_0 B'_z \\ \Rightarrow B'_z &= \gamma_0 B_z - \mathcal{E}_y \frac{\gamma_0^2 - 1}{\gamma_0 v_0} = \gamma_0 \left( B_z - \frac{v_0}{c^2} \mathcal{E}_y \right)\end{aligned}$$

analogno še  $B'_y = \gamma_0 \left( B_y + \frac{v_0}{c^2} \mathcal{E}_z \right)$

Manjka še transformacija  $B_x \leftrightarrow B'_x$ . Denimo da imamo v  $S$  samo magnetno polje vzdolž  $x$ . Po zgornjih izrazih je lahko v  $S'$  od nič različno le polje  $B'_x$ . Naj ima delec v  $S$  hitrost  $\mathbf{v} = (v_0, 0, v)$  in tako v  $S'$  hitrost  $\mathbf{v}' = (0, 0, v')$ . Sila ima samo komponento  $y$  in po LT velja

$$\begin{aligned}\gamma F_y &= \gamma(e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_y) = \gamma e v B_x = \gamma' F'_y = \gamma e v' B'_x \\ \Rightarrow \gamma' v' B'_x &= \gamma v B_x\end{aligned}$$

Tako dobimo

$$\begin{aligned}\mathcal{E}'_x &= \mathcal{E}_x & B'_x &= B_x \\ \mathcal{E}'_y &= \gamma_0(\mathcal{E}_y - v_0 B_z) & B'_y &= \gamma_0 \left( B_y + \frac{v_0}{c^2} \mathcal{E}_z \right) \\ \mathcal{E}'_z &= \gamma_0(\mathcal{E}_z + v_0 B_y) & B'_z &= \gamma_0 \left( B_z - \frac{v_0}{c^2} \mathcal{E}_y \right)\end{aligned}$$

Očitno se komponente  $\mathcal{E}$  in  $\mathbf{B}$  ne transformirajo kot komponente četverca. Obe polji lahko združimo v EM tenzor, ki ga predstavimo z antisimetrično matriko:

$$\underline{\underline{\mathcal{F}}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\mathcal{E}_x}{c} & \frac{\mathcal{E}_y}{c} & \frac{\mathcal{E}_z}{c} \\ -\frac{\mathcal{E}_x}{c} & 0 & B_z & -B_y \\ -\frac{\mathcal{E}_y}{c} & -B_z & 0 & B_x \\ -\frac{\mathcal{E}_z}{c} & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix}$$

Ta  $\underline{\underline{\mathcal{F}}}$  se transformira:

$$\underline{\underline{\mathcal{F}'}} = \underline{\underline{L}} \underline{\underline{L}} \underline{\underline{\mathcal{F}}}$$

Natančneje:

$$\mathcal{F}'_{\mu\nu} = L_{\mu\rho} L_{\nu\sigma} \mathcal{F}_{\rho\sigma}$$

## 1.8 Sistemi delcev

Skupni četverec = vsota posameznih delcev:

$$\underline{\mathbf{P}} = \sum_i \underline{\mathbf{p}} = \left( \sum_i \frac{E_i}{c}, \sum_i \mathbf{p}_i \right) = \left( \frac{E}{c}, \mathbf{P} \right)$$

Če nas sistem ne deluje nobena zunanja sila, se mora ohraniti tak četverec.

$$\underline{\mathbf{P}}_{za} = \underline{\mathbf{P}}_{kon} \quad \Leftrightarrow \quad E_{za} = E_{kon} \quad \text{in} \quad \mathbf{P}_{za} = \mathbf{P}_{kon}$$

Težiščni sistem: relativistično ne moremo zahtevati, da bi bil  $\underline{\mathbf{P}} = 0$  (ves četverec), ker  $\text{LT}(\underline{\mathbf{O}}) = O$ . Še vedno zahtevamo samo  $\mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i = 0$ . Za nadaljne zglede samo vzdolž  $x$ .

$$\sum_i p_{ix}^* = 0$$

Izračunamo lahko hitrost težiščnega sistema,  $v^*$

$$\sum_i p_{ix}^* = \gamma^* \left( \sum_i p_{ix} - \beta^* \sum_i \frac{E_i}{c} \right) \equiv 0 \quad \text{definiramo težiščni sistem}$$

$$\text{kjer sta } \gamma^* = (1 - \beta^{*2})^{-\frac{1}{2}} \text{ in } \beta^* = \frac{\sum_i p_{ix} c}{\sum_i E_i} = \frac{v^*}{c}$$

Ali pri  $v \ll c$  sledi nerelativistični izraz?

$$\beta^* = \frac{\sum_i m_i \gamma_i v_i c}{\sum_i m_i \gamma_i c^2} \xrightarrow{\gamma_i \rightarrow 1} \frac{\sum_i m_i v_i c}{\sum_i m_i c} \quad v^* = \frac{\sum_i m_i v_i}{\sum_i m_i}$$

Zdaj pa zelo uporabno: kvadrat četverca je invarianta!

$$\left( \sum_i E_i \right)^2 - \left( \sum_i \mathbf{p}_i c \right)^2 = \left( \sum_i E_i^* \right)^2 - 0^2$$

laboratorijski sistem                      težiščni sistem

Sploh ni nujno, da imamo pred procesom in po procesu opravka z enakim naborom delcev.

### 1.8.1 Razpoložljiva energija

Sprijemanje delcev je v eksperimentalni fiziki zelo redko. Običajno nastane ob trkih veliko novih delcev. Energija, ki je na voljo:

$$m_r = \begin{array}{l} M - 2m \\ \text{če po trku vsi} \\ \text{delci v tež. sist.} \\ \text{mirujejo} \end{array} = 2m \left( \sqrt{\frac{\gamma_1 + 1}{2}} - 1 \right)$$

$$E_r = m_r c^2 \quad \text{razpoložljiva energija}$$

Vsa začetna kinetična energija  $T = mc^2(\gamma_1 - 1)$ , je večja od  $E_r$ , ker mora iti del  $T$  za kinetično energijo težišča, sicer ne ohranimo GK.

$$T = (\gamma_1 - 1)mc^2 \rightarrow \gamma_1 = \frac{T}{mc^2} + 1$$

$$\rightarrow E_r = 2mc^2 \left( \sqrt{1 + \frac{T}{2mc^2}} - 1 \right)$$

Če je  $t \ll 2mc^2 \Rightarrow E_r \approx \frac{T}{2}$ , če pa  $T \gg 2mc^2 \Rightarrow E_r \approx \sqrt{2mc^2 T} \alpha \sqrt{T}$  (fiksna tarča).

### 1.8.2 Razpadi delcev

Del mase začetnega delca gre za tvorbo novih delcev in njihove kinetične energije.

Razpad v mirovanju:

$$\begin{aligned} \text{npr. } \pi^- &\rightarrow \mu^- \bar{\nu}_\mu & m_\pi c^2 &= 139.6 \text{ MeV} \\ & & m_\mu c^2 &= 105.7 \text{ MeV} \\ & & m_{\bar{\nu}_\mu} c^2 &\approx 0 \end{aligned}$$

$$E : \quad m_\pi c^2 = E_\mu + E_{\bar{\nu}}$$

$$G : \quad 0 = p_\mu + p_{\bar{\nu}} = p_\mu + \frac{E_{\bar{\nu}}}{c} \rightarrow E_{\bar{\nu}}^2 = p_\mu^2 c^2 = E_\mu^2 - m_\mu^2 c^4$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (m_\pi c^2 - E_\mu)^2 &= E_{\bar{\nu}}^2 \\ m_\pi^2 c^4 - 2E_\mu m_\pi c^2 + E_\mu^2 &= E_\mu^2 - m_\mu^2 c^4 \\ \Rightarrow E_\mu &= \frac{m_\pi^2 c^4 + m_\mu^2 c^4}{2m_\pi c^2} \end{aligned}$$

$$\text{oziro} \quad T_\mu = E_\mu - m_\mu c^2 = \frac{(m_\pi c^2 - m_\mu c^2)^2}{2m_\pi c^2} = 4.1 \text{ MeV}$$

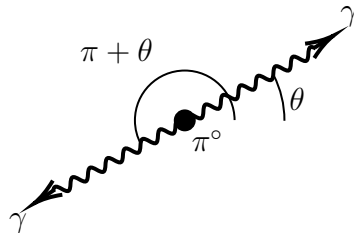
$$E_{\bar{\nu}} = m_\pi c^2 - E_\mu = 29.8 \text{ MeV}$$

Razpad v letu:

$$\begin{aligned} \text{npr. } \pi^0 &\rightarrow 2\gamma & m_\pi c^2 &= 135 \text{ MeV} \\ & & E_\pi &= 6 \text{ GeV} \end{aligned}$$

V težiščnem sistemu: tu  $\pi^0$  miruje, fotona pa odletita v nasprotnih smereh pod kotoma  $\theta^*, \pi + \theta^*$ . Po zakonu o ohranitvi energije (v težiščnem sistemu) vsak odnese  $\frac{m_\pi c^2}{2}$ .

$$\begin{aligned} p_{1x}^* &= \frac{m_\pi c}{2} \cos \theta^* = -p_{2x}^* \\ p_{1y}^* &= \frac{m_\pi c}{2} \sin \theta^* = -p_{2y}^* \end{aligned}$$



Za transformacijo v laboratorijski sistem potrebujemo  $\beta^* = \frac{p_{\pi}c}{E_{\pi}}$

$$\begin{aligned}\gamma^* &= \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^{*2}}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{p_{\pi}c}{E_{\pi}}\right)^2}} = \frac{E_{\pi}}{m_{\pi}c^2} = \gamma \quad (\text{od delca}) \\ p_{1x} &= \gamma \left( p_{1x}^* + \beta \frac{m_{\pi}c}{2} \right) = \frac{m_{\pi}c}{2} \left( \gamma \cos \theta^* + \sqrt{\gamma^2 - 1} \right) \\ p_{2x} &= \gamma \left( p_{2x}^* + \beta \frac{m_{\pi}c}{2} \right) = \frac{m_{\pi}c}{2} \left( -\gamma \cos \theta^* + \sqrt{\gamma^2 - 1} \right) \\ p_{1y} &= -p_{2y} = \frac{m_{\pi}c}{2} \sin \theta^* \quad (\text{LT nima učinka v } \perp \text{ smeri}) \\ \tan \theta_1 &= \frac{p_{1y}}{p_{1x}} = \frac{\sin \theta^*}{\gamma \cos \theta^* + \sqrt{\gamma^2 - 1}} \\ \tan \theta_2 &= \frac{p_{2y}}{p_{2x}} = \frac{\sin \theta^*}{\gamma \cos \theta^* - \sqrt{\gamma^2 - 1}}\end{aligned}$$

Kot med  $\gamma_1$  in  $\gamma_2$  v laboratorijskem sistemu:

$$\tan \theta_{12} = \tan(\theta_1 - \theta_2) = \frac{\tan \theta_1 - \tan \theta_2}{1 + \tan \theta_1 \tan \theta_2}$$

Toda za  $\gamma \gg 1$  (zelo hiter  $\pi^{\circ}$ ) dobimo preprostejši izraz:

$$\tan \theta_{12} = \frac{2}{\gamma \sin \theta^*}$$

kjer je  $\gamma$  lastnost  $\pi^{\circ}$  in  $\sin \theta^*$  kaj se je zgodilo v težiščnem sistemu. Če fotona v težiščnem sistemu ne odletita skoraj natanko naprej ( $\theta^* \approx 0$ ) oziroma nazaj ( $\theta^* \approx 180^{\circ}$ ), je kot med njima majhen, če  $\gamma \gg 1$ . Za naše podatke  $\gamma = \frac{E_{\pi}}{m_{\pi}c^2} = \frac{6000}{135} \approx 46$ . Pri  $\theta^* = 0.1 \rightarrow \theta_{12} = 0,22 = 12,5^{\circ}$ .

## 2 Kvantna fizika

Prehod iz 19. v 20. stoletje ne nastanejo težave smo pri opisu pojavov, ko  $v \rightarrow c$  ampak tudi v mikroskopskem svetu (atomi, jedra). Za večino problemov v tem semestru bo povsem zadoščala nerelativistična obravnava i.e.  $T = \frac{p^2}{2m}$ .

Doslej smo bili vajeni, da lahko fizikalne količine (zlasti energija, VK) zavzamejo poljubne vrednosti. V kvantni fiziki to ni več res. Energija se v fizikalnih sistemih spremeni (oziroma izmenja) samo v določenih "obrokih" = KVANTI (quantum). Spomnimo se: električni naboj:  $e_0, e_1, e_2 \dots$  (Millikanov poskus, 1909). Ukvarjali se bomo zlasti s kvantizacijo E in GK.

V kvantnem svetu se zabriše razlika med valovanjem in delci: valovanje se včasih obnaša kot delec in delci dobijo valovne lastnosti. "Valovno-delčna dualnost" = wave-particle duality, sliši se imenitno, a malo pove.

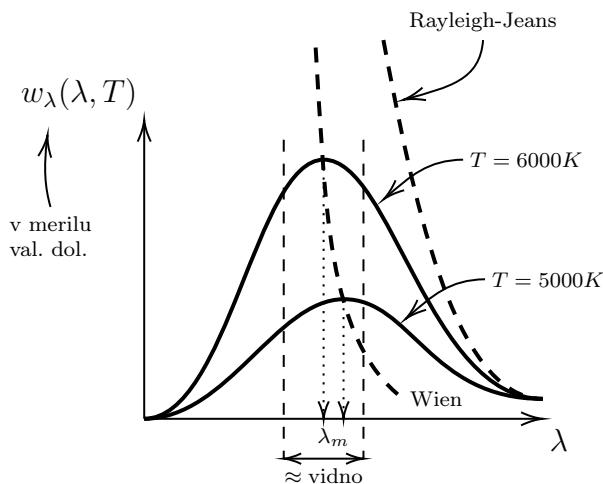
Najbolj pretresljivo: ni več absolutnih napovedi obnašanja fizikalnega sistema (npr. točnih trajektorij delca).

Klasična fizika:  $\mathbf{r}(0), \dot{\mathbf{r}}(0) \xrightarrow{H} \mathbf{r}(t), \dot{\mathbf{r}}(t)$  ob  $t > 0$ .

Kvantna fizika: napovemo lahko samo verjetnost izidov merjenj.

### 2.1 Sevanje črnega telesa

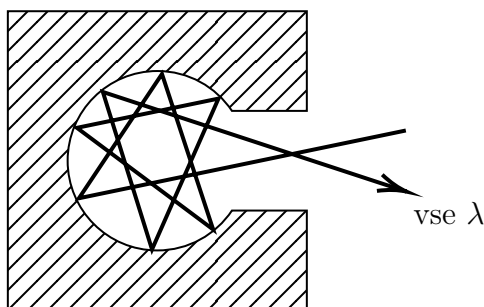
Od tod prve indikacije za kvantno naravo sevanja. Absorpcija svetlobe na telesu pomeni povečano kinetično energijo atomov (na "vzmeteh" v kristalni strukturi). Telo se ogreje, pospešeni delci ( $e^-$ ) sevajo in telo se ohladi. Ko je absorpcija = emisija  $\Rightarrow$  termično ravnovesje. Vsa telesa pri  $T \neq 0$  sevajo termično (toplotno) sevanje.



Spekter je odvisen samo od  $T$ . Poznali so tudi zvezo  $\lambda_m = \frac{\text{konst.}}{T} \text{konst.} = 2.9 \cdot 10^{-3} mK$  Wienov zakon. Telo, ki absorbira vso vpadno sevanje = črno telo (black body). Jožef Štefan je empirično pokazal, da velja:

$$j = \sigma T^4 \quad \sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$$

To je Stefan-Boltzmannov zakon.



$$j = \frac{1}{4} c \cdot w$$

$\frac{1}{4}$  pride od povprečja pri kotih sipanja. Rezultat iz statistične mehanike: število nihajnih načinov v votlini (analogno štetju načinov nihanja na struni (1d) oziroma opni (2d)):

$$n(\lambda) = \frac{dx}{d\lambda} = \frac{8\pi}{\lambda^4}$$

Klasična predstava: vsak nihajni način prinese  $k_B T$  energije

$$w_\lambda(\lambda, T) = k_B T n(\lambda) = \frac{8\pi k_B T}{\lambda^4}$$

To je Rayleigh-Jeansov zakon. Problem nastane pri integriranju po celotni realni osi

$$\int_0^\infty w_\lambda(\lambda, T) d\lambda \rightarrow \infty$$

## 2.2 Planckov zakon

Kako spraviti  $w_\lambda \rightarrow 0$ , ko  $\lambda \rightarrow 0$ ? Planck (1900) je podal empirično formulo, ki jo je lahko izpeljal ob privzetku, da so energije nihajočih nabojev (sevanje, ki ga oddajajo) lahko samo mnogokratniki  $\varepsilon$ :  $0, \varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon \dots$  kjer je  $\varepsilon$  sorazmeren s frekvenco oscilatorjev:

$$E_n = n \cdot \varepsilon = n \cdot h\nu = n \cdot \frac{hc}{\lambda} \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

Kjer je  $h$  Planckova konstanta (sorazmernostni koeficient med frekvenco in energijo) in je enaka  $h = 6.6 \cdot 10^{-34} Js$  (uporabno tudi  $hc \approx 1240 eV$ ).

nm). Pogosto tudi pišemo  $\hbar h = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \cdot 10^{-34} Js$  ( $\hbar hc \approx 197 MeV \cdot fm$ ). Tako dobimo

$$w_\lambda(\lambda, T) = \frac{\frac{8\pi\hbar c}{\lambda^5}}{e^{\frac{\hbar c}{\lambda k_B T}} - 1}$$

Planckov zakon sevanja črnega telesa.

### Izpeljava

Potrebujemo tri reči:

- a prešteti število načinov EM valovanja pri dani  $T, V$ .
- b verjetnost, da se pri dani  $T$  v votlini pojavi način z energijo  $E$  (to bo dala Maxwell-Boltzmannove porazdelitve).
- c izračunati povprečno energijo na način (mode).

a

struna (1d): dovoljene so takšne  $\lambda$ , da

$$\sin\left(\frac{2\pi L}{\lambda}\right) = 0$$

To da valovne dolžine, kjer velja

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \rightarrow \nu_n = \frac{c}{\lambda_n} = \frac{cn}{2L} \quad n = 1, 2, \dots$$

(3d):

$$\nu = \frac{c}{2L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad \text{oziroma} \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{2L}{c}\nu\right)^2 \quad n_x, n_y, n \geq 0$$

Računamo “ $4\pi r^2 \Delta r$ ” v prostoru frekvenc

$$\frac{1}{8} 4\pi \left(\frac{2L}{c}\nu\right)^2 \frac{2L}{c} d\nu = \frac{4\pi\nu^2}{c^3} d\nu \cdot V \Rightarrow V = L^3$$

V resnici (verjamemo za zdaj) še dvakrat več načinov, ker ima lahko vsak foton dve polarizaciji. Število načinov na frekvenčni interval:

$$N_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} V \left[ \frac{1}{s^{-1}} \right]$$

Spektralna energijska gostota

$$w_\nu(\nu, T) = \frac{N_\nu}{V} \langle E \rangle \quad \left[ \frac{J}{m^3 s^{-1}} \right]$$

Energijski tok

$$j_\nu(\nu, T) = \frac{c}{4} w_\nu(\nu, T) \quad \left[ \frac{W}{m^2 s^{-1}} \right]$$

b,c

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n f(E_n) E_n}{\sum_n f(E_n)} \quad \text{spomni se} \quad x_T = \frac{\sum_n m_n x_n}{\sum_n m_n}$$

Uteži so Boltzmannovi faktorji

$$f(E) = e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n n h \nu e^{-\frac{n h \nu}{k_B T}}}{\sum_n e^{-\frac{n h \nu}{k_B T}}} = k_B T \frac{\sum_n n x e^{-n x}}{\sum_n e^{-n x}}$$

Najprej imenovalec (= fazna vsota,  $Z$ ):

$$Z(x) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n x} = 1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots = \frac{1}{1 - e^{-x}}$$

Števec (trik: odvajamo  $Z(x)$ ):

$$\begin{aligned} -x \frac{dZ}{dx} &= -x \frac{d}{dx} \left( \sum_n e^{-n x} \right) = x \sum_n n e^{-n x} \\ &= -x \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{1 - e^{-x}} \right) = \frac{x e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} \quad \text{števec} \end{aligned}$$

Sestavimo vse faktorje:

$$\begin{aligned} w_\nu(\nu, T) &= \frac{N \nu}{V} \langle E \rangle = \frac{8 \pi \nu^2}{c^3} k_B T \frac{x e^{-x}}{1 - e^{-x}} \\ &= \frac{8 \pi \nu^2}{c^3} k_B T \frac{\frac{h \nu}{k_B T}}{e^{\frac{h \nu}{k_B T}} - 1} = \frac{8 \pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h \nu / k_B T} - 1} \end{aligned}$$

Z valovnimi dolžinami:

$$w_\lambda(\lambda, T) = w_\nu(\nu, T) \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| = \frac{8 \pi h c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{h c / \lambda k_B T} - 1}$$

Od tod dobimo:

$$\begin{aligned} j_\lambda(\lambda, T) &= \frac{c}{4} w_\lambda(\lambda, T) \\ j_\nu(\nu, T) &= \frac{c}{4} w_\nu(\nu, T) \end{aligned}$$

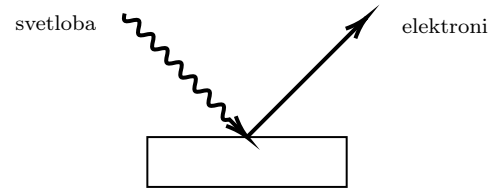
in pa integral po celotnem spektru (za katerikoli  $T$ ):

$$j = \int_0^\infty j_\lambda(\lambda, T) d\lambda = \int_0^\infty j_\nu(\nu, T) d\nu = \sigma T^4$$

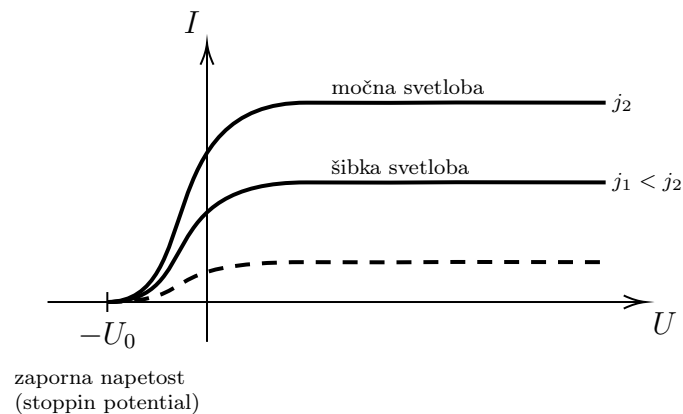
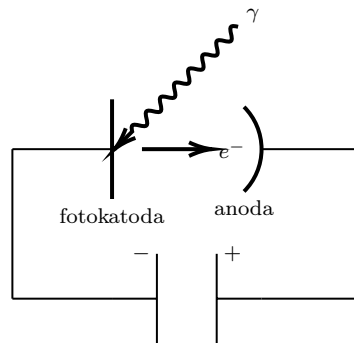
## 2.3 Fotoelektrični pojav



ali “fotoefekt” je odkril Hertz že leta 1887. Pojasnil ga je Einstein (1905), za kar je tudi prejel Nobelovo nagrado. Ideja obrokov  $h\nu$  je bila med fiziki sprejeta s skepso, kjer je Planckova hipoteza o oscilatorjih, emitiranih fotonih (v črnem telesu), tedaj bila “ezoterično” okolje za večino fizikov. Einstein je razširil idejo kvantizacije, da ne velja specifično le za črno telo, ampak da je to splošna lastnost svetlobe.



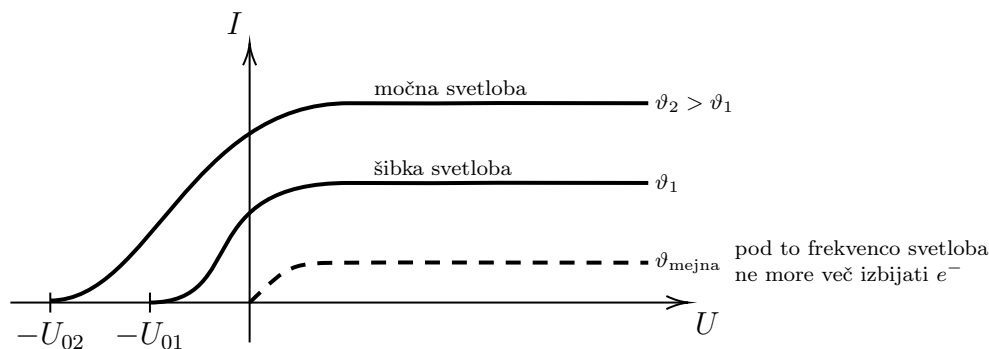
Slika 2: Poksus je zelo preprost.



Pri dovolj veliki  $U$ , vsi elektroni pridejo do anode in je tok nasičen. Klasično pričakujemo, da bo tok nehal teči, ko bo vpadna svetloba prešibka. Pri  $U < 0$  anoda  $e^-$  odbija in ko je  $eU_0$ , je ravno  $(\frac{1}{2}mv^2)_{\max} = e_0U$ . Dobimo presenetljiv rezultat:  $U_0$  je neodvisna od jakosti vpadne svetlobe. Einsteinova razlaga: namesto, da bi bila energija svetlobnega valovanja (enakomerno) porazdeljena po sredstvu/prostoru, bi bila energija svetlobe sestavljena le iz diskretnih “kvantov”, kjer ima vsak od njih energijo  $h\nu$ , oziroma fotonov. Ko tak kvant zadane fotokatodo, vso njegovo energijo lahko absorbira en sam  $e^-$ , kjer za to da ga izbije iz kovine, potrebujemo izstopno delo (exit work).

$$eU_0 = \left( \frac{1}{2}mv^2 \right)_{\max} = h\nu - \Phi$$

kjer sta  $h\nu$  energija vpadnega fotona in  $\Phi$  izstopno delo.



## Zgled

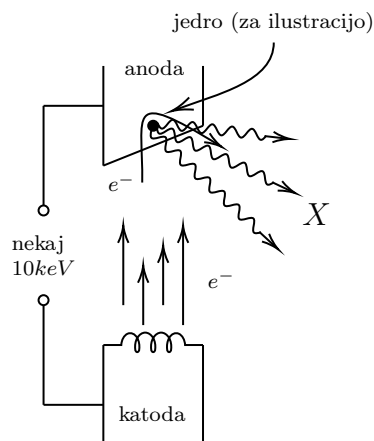
Pomislek: naredimo tako šibek izvir, da se bo energija za izbitje  $e^-$  nabirala “celo večnost” (klasična predstava). Vzemimo katodo iz kalija ( $\Phi = 2.2\text{eV}$ ) nanjo posvetimo z  $\lambda = 400\text{nm}$ , jakost izvora  $j = 10^{-2} \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$ , tipični polmer atoma pa  $r = 10^{-10}\text{m}$ . Energija, ki v časi  $t$  pade na  $e^-$ , je

$$E = j \cdot \pi r^2 \cdot t, \quad \text{in to naj bo enako } \Phi$$

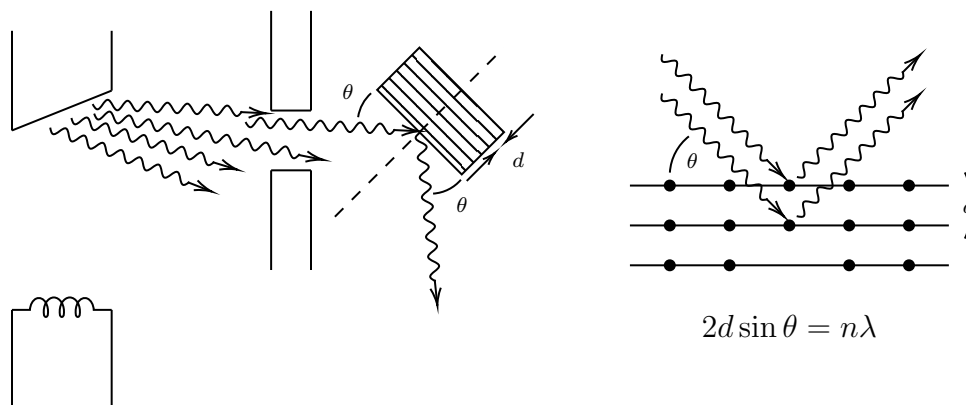
$$t = \frac{\Phi}{j\pi r^2} = 19 \text{ minut}$$

Po klasični predstavi, bi morali čakati 19 minut, da bi izbili en elektron. Kvantno pa ima en sam foton dovolj energije da izbije  $e^-$ . Fotonov je pri nizkih energija sicer malo, a je atomov ogromno.

## 2.4 Rentgensko sevanje (žarki X)

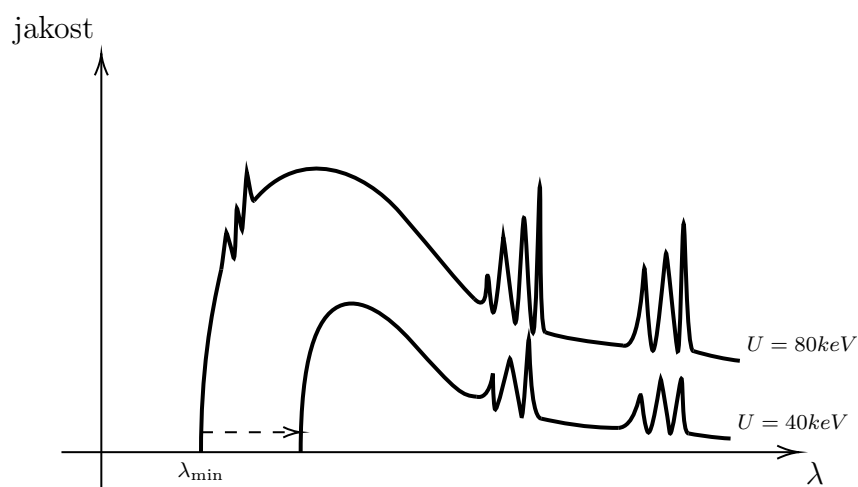


Odkril jih je Röntgen leta 1895. Fotoni nastajajo ob zaviranju  $e^-$  v polju pozitivnih jeder: zavorno sevanje (bremsstrahlung). Röntgen žarkov ni mogel odkloniti z magnetnim poljem. Ugotovil je, da imajo  $\lambda \approx 0.1\text{nm}$  (po uklonu ob prehodu skozi zaslonko).



Meritve spektra RTG svetlobe je pokazala tri značilnosti:

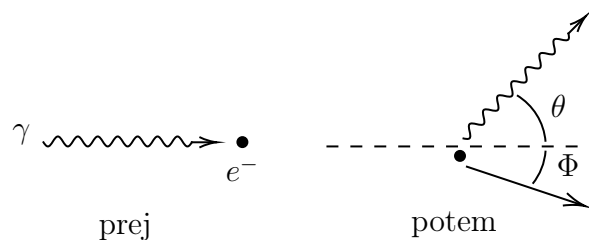
1. gladki (zvezni) del spektra ... od zavnega sevanja.
2. ostre črte, tako imenovan karakteristični del spektra ... popolnoma nejasno, od kod.
3. spekter odrezan pri  $\lambda_{\min}$ .



$$h\nu_{\max} = h \frac{c}{\lambda_{\min}} = eU \quad \Rightarrow \quad \lambda_{\min} = \frac{hc}{eU}$$

## 2.5 Comptonov pojav

Prvič opažen pri sipanju RTG svetlobe, na (skoraj) prostih elektronih v atomih. Kasneje tudi na drugi energijski/prostorski skali. Pojav je relativističen!



Ohranitev E in GK:

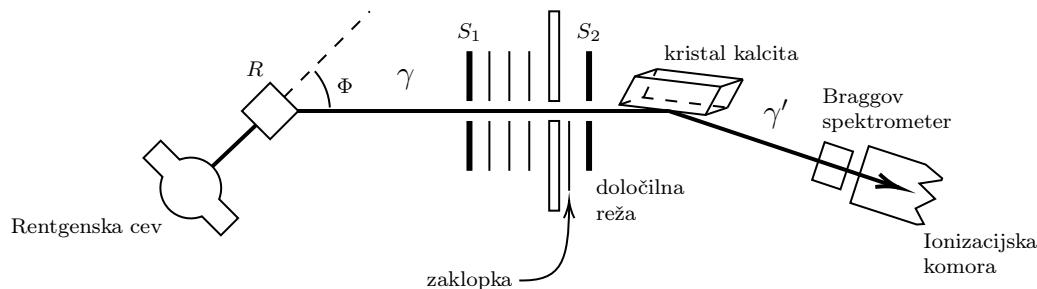
$$\begin{array}{ll} E & 1. \quad h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \\ p_x & 2. \quad h\nu = h\nu' \cos \theta + pc \cos \Phi \\ p_y & 3. \quad h\nu' \sin \theta = pc \sin \Phi \end{array}$$

Kvadriramo 2. in 3. ter ju seštejmo:

$$\begin{aligned} p^2c^2 \left( \underbrace{\cos^2 \Phi + \sin^2 \Phi}_1 \right) &= (h\nu - h\nu' \cos \theta)^2 + (h\nu' \sin \theta)^2 \\ &= (h\nu)^2 + (h\nu')^2 \left( \underbrace{\cos^2 \theta + \sin^2 \theta}_1 \right) - 2h\nu h\nu' \cos \theta \end{aligned}$$

S kvadriranjem 1. dobimo

$$\begin{aligned} h^2 (\nu - \nu')^2 + 2h(\nu - \nu') mc^2 + m^2c^4 &= p^2c^2 + m^2c^4 \\ \Rightarrow h(\nu - \nu') mc^2 &= h^2 \nu \nu' (1 - \cos \theta) \end{aligned}$$



oziroma končna formula

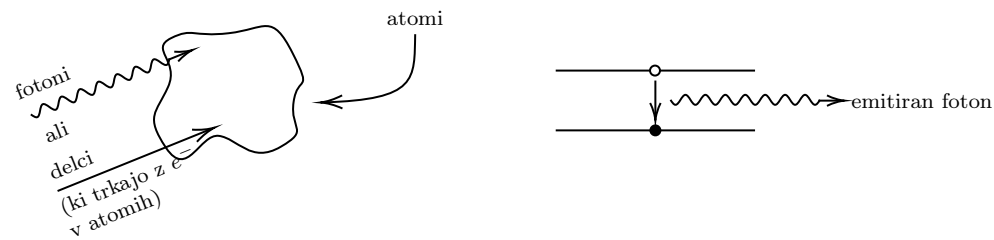
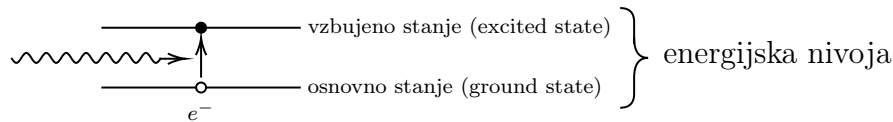
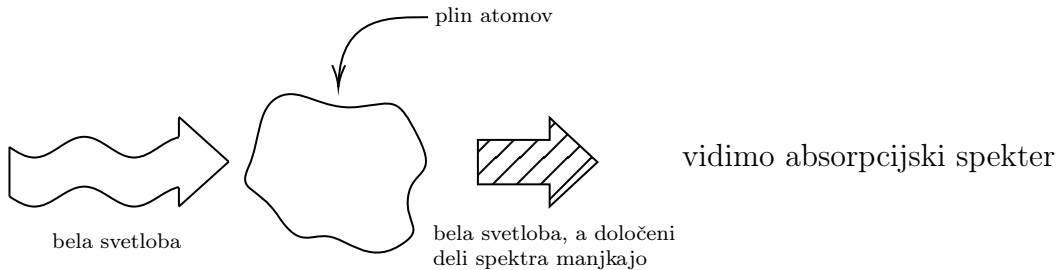
$$\begin{aligned} \Delta\lambda &= \lambda' - \lambda = \lambda_C (1 - \cos \theta) \\ \lambda_C &= \frac{h}{mc} \approx 2.4 \cdot 10^{-3} nm \quad \text{Comptonova valovna dolžina} \end{aligned}$$

Limite:

- $\theta = 0^\circ$ ,  $e^-$  miruje tudi po trku  $\lambda' = \lambda$ .
- $\theta = 90^\circ$ ,  $\lambda' = \lambda + \lambda_C$ .
- $\theta = 180^\circ$ ,  $e^-$  odleti v smeri vpadnega  $\gamma$ , malksimalna monžna  $\Delta\lambda = 3\lambda_C$  oziroma  $\lambda' = \lambda + 2\lambda_C$ .

## 2.6 Atomski spektri

Ne samo pri zavornem sevanju, črnemu telesu... tudi pri vzbujanju atomov opazimo, da atomi lahko sprejmejo ali oddajo energijo le v obrokih (kvantih). Naprimer:



Oba spektra imata črte. Od kod se vzamejo?

### 2.6.1 Bohrov model vodikovega atoma

Odlično napove spekter, toda model ni pravilen.  $H = p + e^- = \text{Sonce} + \text{Zemlja}$ , torej ideja elips (skoraj krožnic). Bohr je vzel samo krožnice in tega koncepta se želimo sčasoma povsem osvoboditi! Zapišemo Coulombski potencial  $V(r) = -\frac{kZe^2}{r}$  (izpeljava je dobra tudi za naboj  $+Ze$  in  $-e$ , naprimer za  $He^+$ ,  $Li^{2+}$ ...). Imamo centripetalno silo

$$F_c = \frac{kZe^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{kZe^2}{m_e r}} = \text{obodna hitrost}$$

Klasično bi moral  $e^-$  (kot pospešen naboj) sevati s frekvenco, ki je enaka frekvenci kroženja.

$$\nu = \frac{v}{2\pi r} = \left(\frac{kZe^2}{m_e r}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2\pi r} \propto \frac{1}{r^{\frac{3}{2}}} \Rightarrow \frac{1}{2}m_e v^2 = \frac{kZe^2}{2r}$$

Imamo  $T = -\frac{1}{2}V$  (Virialni teorem velja za silo oblike  $\frac{1}{r^2}$ ). Celotna energija

$$E = \underbrace{\frac{1}{2}m_e v^2}_T - \underbrace{\frac{kZe^2}{r}}_V = -\frac{kZe^2}{2r} \propto -\frac{1}{r}$$

Zaradi sevanja, torej izgube energije, bi se moral  $e^-$  gibati po vedno manjših krožnicah (spirala), posledično večje frekvence itd. To bi se zgodilo v  $1\mu s$ .?!

Bohrovi privzetki

1.  $e^-$  se lahko giblje samo po točno določenih orbitalah, ne da bi sevali. Tem orbitalam je rekel stacionarna stanja (kasneje drug pomen).
2. Atom seva, ko  $e^-$  preide iz enega stacionarnega stanja v drugo, frekvenca izsevane svetlobe pa je  $\gamma$ ,

$$h\nu = E_i - E_f \quad \begin{array}{l} i = \text{intial} \\ f = \text{final} \end{array}$$

3. Korespondenčno načelo (correspondence principle). V limiti velikih orbit/velikih energij/(kasneje: visokih vzbuditev/visokih kvantnih števil), se morajo kvantni rezultati ujemati s klasičnimi.

1) se ni obdržal saj je potrebno rešiti Schrödingerjevo enačbo za  $e^-$ . 2) in 3) pa sta ostala v veljavi! Kako je z vrtilno količino  $e^-$  (ki "kroži" okrog jedra). Bohr je kvantiziral

$$\Gamma = m_e v r = n\hbar = n \frac{h}{2\pi} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$\Gamma$  je nova oznaka za vrtilno količino. Bohr je  $n$  rekel kvantno število (quantum number), za klasifikacijo orbit in splošneje kvantnih stanj kasneje. Od tu sledi za polmer orbite:

$$r = \frac{n\hbar}{m_e v} = \frac{n\hbar}{m_e} \left( \frac{m_e r}{kZe^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

oziroma

$$\begin{aligned} r_n &= \frac{n^2 \hbar^2}{m_e k Z e^2} = \frac{n^2 r_B}{Z} \propto \frac{1}{Z} \\ \Rightarrow r_B &= \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx \dots \approx 529 \text{ nm} \quad \text{Bohrov radij} \end{aligned}$$

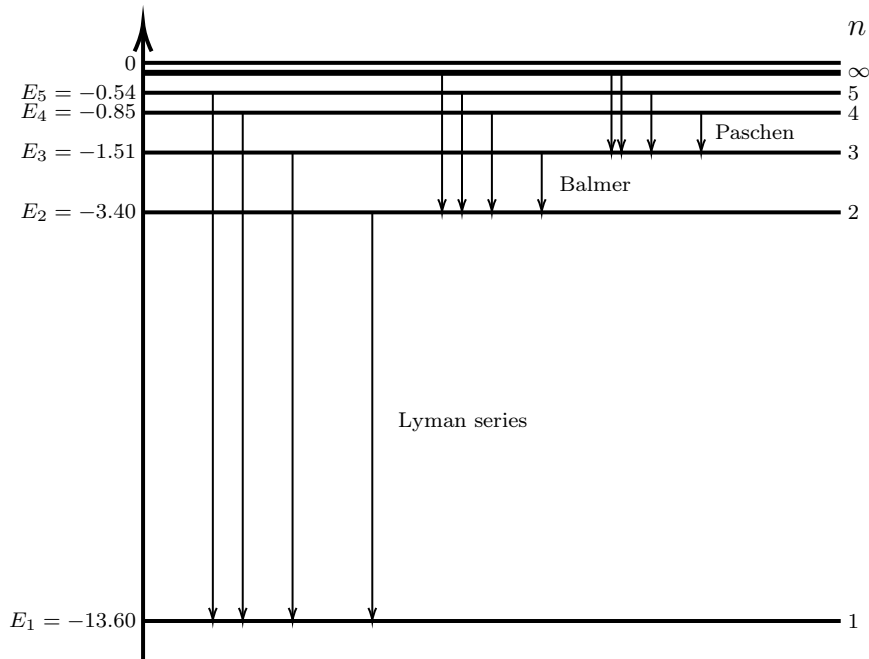
Bohrov radij postavi prostorsko skalo za vso atomsko fiziko. Celotna energija ( $e^-$  v polju  $p$  oziroma  $+Ze$ ):

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{kZe^2}{2r_n} = -\frac{kZe^2}{2} \left( \frac{m_e k Z e^2}{n^2 \hbar^2} \right) = -\frac{m_e k^2 Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} \\ E_n &= -E_0 \frac{Z^2}{n^2} \quad E_0 = \frac{m_e k^2 e^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV} \end{aligned}$$

Tudi energij  $e^-$  so kvantizirane (ne le vrtilna količina). Ali velja kore-spondenčno načelo?

$$\text{Kvantno} \quad h\nu = E_0 Z^2 \left( \frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) = E_0 Z^2 \frac{2n-1}{(n-1)^2 n^2} \approx E_0 Z^2 \frac{2}{n^3} = \frac{Z^2 m_e k^2 e^4}{\hbar^2 n^3}$$

$$\text{Klasično} \quad h\nu_{kl} = h \frac{v}{2\pi r} = h \frac{\frac{n\hbar}{m_e r}}{2\pi r} = \frac{n\hbar^2}{m_e r^2} = \frac{Z^2 m_e k^2 e^4}{\hbar^2 n^3}$$



## 2.7 de Brogliejeva hipoteza

1924 je vedel, da se svetloba obnaša kot delci (kvanti energije), kjer je v svojem doktoratu predpostavil, da obratno velja za delce, ki bi se obnašali kot valovanje  $\rightarrow$  dualizem.

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad \nu = \frac{E}{h}$$

Kjer je  $\lambda$  de Brogliejeva valovna dolžina delca. Delcu pripšemo takšno  $\lambda$  in  $\nu$ . Za fotone je to avtomatsko izpolnjeno, kajti za brezmasne delce  $E = pc = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ . Po de Broglieju naj bi to veljalo tudi za delce z maso, kar je hotel združiti z Bohrovo sliko in kvantizacijo vrtilne količine v vodikovem atomu.

$$m_e v r = n\hbar \quad n \in \mathbb{N}$$

$$o = 2\pi r = \frac{n\hbar}{m_e v} = \frac{n\hbar}{p} = n\lambda$$

Sliši se obetavno razlaga diskretnega značaja energijskih nivojev prek stoječih valovanj. Zakaj tega niso opazili že prej? Ker so  $\lambda$  premajhne.

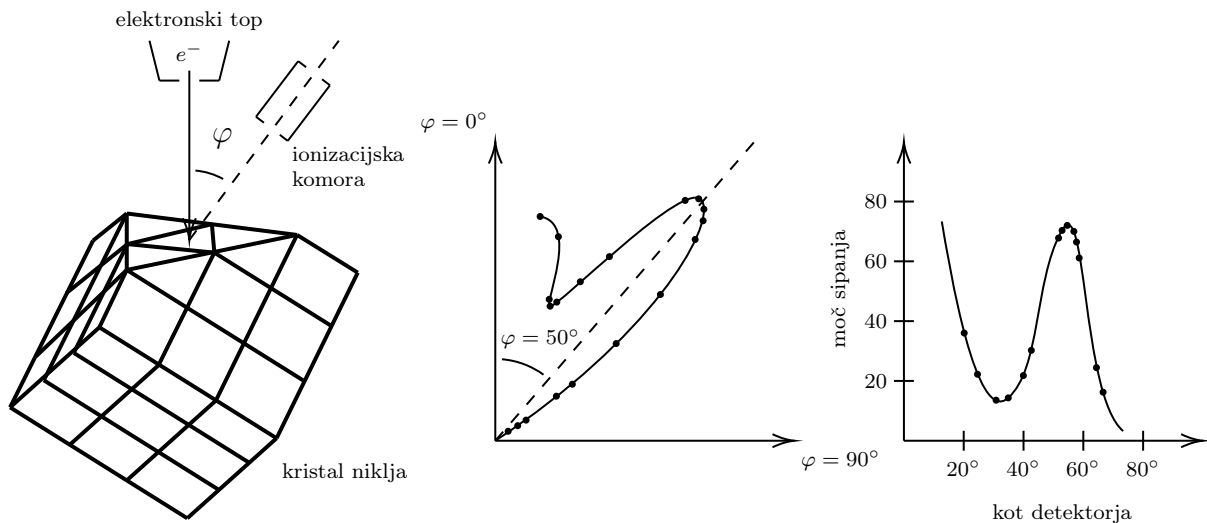
Ocena de Brogliejeva valovna dolžina ping-pong žogice:

$$m = 2g, v = 5 \frac{m}{s} \rightarrow \lambda = \frac{h}{mv} = 6.6 \cdot 10^{-23} nm$$

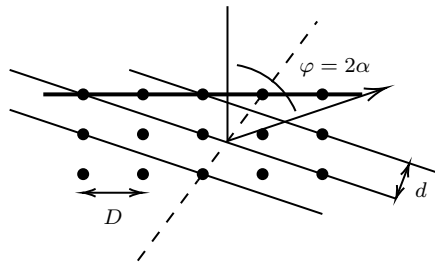
Imamo nemerljiv uklonski kot (sploh ne moremo narediti takšne “režice”).  
Kaj pa  $e^-$

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} kg, T = 10eV, p = \sqrt{2m_e T} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = 0.39nm$$

To pa bi šlo, kristali! Meritev valovne dolžine elektronov sta leta 1927 opravila Davisson-Germer (Bell Telephone Labs).



Podatki so kazali močan maksimum pri  $\varphi = 50^\circ$  za  $T = 54eV$ .



Konstruirano interferenco dobimo pri

$$n\lambda = 2d \sin \theta = 2d \cos \alpha$$

Razmik med kristalnimi ravninami:

$$n\lambda = 2D \sin \alpha \cos \alpha = D \sin 2\alpha \quad \text{oziroma} \quad c\lambda = D \sin \varphi$$

Razmik  $D$  sta poznala iz uklona žarkov X:  $D = 0.215nm$ , tako iz njunega izmerjenega  $\varphi = 50^\circ$  sledi

$$\lambda = D \sin \varphi = 0.165nm$$

vrednost izračuna po de Brogliejevi formuli:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e T}} = 0.167nm$$



## 2.8 Opis valvovanja delcev

(matter waves) Ravni val v klasični fiziki: interferenco  $e^-$  na kristalu bi pojasnili, če bi elektronskemu curku ( $\parallel x$ ) pripisali ravno valovanje:

$$u(x, t) = A \cos(\omega t - kx) \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi mv}{h} = \frac{p}{\hbar} \rightarrow p = k\hbar$$

Toda kaj valovi pri delčnem valovanju? Odgovor je dal Max Born (1926): valovi valovna funkcija (wave function) oziroma verjetnostna amplituda in jo označimo z

$$\Psi \quad \text{v splošnem} \quad \in \mathbb{C}$$

Sama valovna funkcija ni opazljiva (observable) količina. Kar lahko opazimo (merimo), je samo kvadrat verjetnostne amplitude, ki mu pravimo tudi verjetnostna gostota:

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$$

Kjer je  $\Psi^*$  običajna kompleksna konjugacija. Verjetnost, da delec ob času  $t$  najdemo na  $[x, x + \Delta x]$ , je

$$\rho(x, t)\Delta x$$

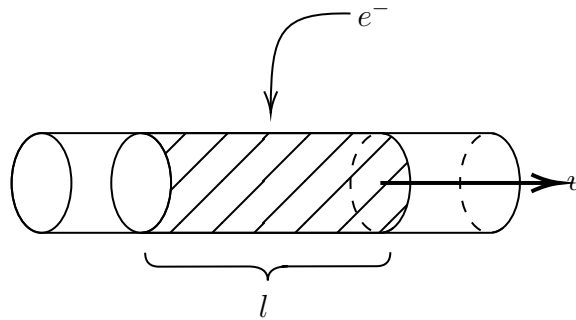
in seveda nenegativnost in normalizacija:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) dx = 1$$

Za naše ravno valovanje:

$$\Psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

$$\rho(x, t) = \Psi^*\Psi = |A|^2$$



$$\int_0^l \rho(x, t) dx = 1 \quad \forall t \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{\sqrt{l}}$$

Ne ustreza naši predstavi o delcu ("kroglici"), ki se giblje s hitrostjo  $v$  vzdolž osi  $x$ . Delec bi radi lokalizirali, želeli bi valovni paket (wave packet).

### 2.8.1 Superpozicija valov

Najprej sestavimo dve valovanji z malce različnima

$$k : \quad \begin{aligned} k_1 &= k + \Delta k, & \omega_1 &= \omega + \Delta \omega \\ k_2 &= k - \Delta k, & \omega_2 &= \omega - \Delta \omega \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{1,2}(x, t) &= A \left( e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} + e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)} \right) \\ &= A \left( e^{-i(\omega t + \Delta \omega t - kx - \Delta kx)} + e^{-i(\omega t - \Delta \omega t - kx + \Delta kx)} \right) \\ &= A e^{-i(\omega t - kx)} \left( \underbrace{e^{-i(\Delta \omega t - \Delta kx)} + e^{i(\Delta \omega t - \Delta kx)}}_{2 \cos(\Delta \omega t - \Delta kx)} \right) \\ &= 2A e^{-i(\omega t - kx)} \cos(\Delta \omega t - \Delta kx) \\ \rho_{1,2}(x, t) &= |\Psi_{1,2}(x, t)|^2 = 4|A|^2 \cos^2(\Delta \omega t - \Delta kx) \\ \text{slika} \quad N &= 2 \end{aligned}$$

To je izračun za  $N = 2$  valov. NKako izgleda npr. za  $N = 6$ :

$$\begin{aligned} \{k_n\} &= k \pm \frac{\Delta k}{3}, k \pm \frac{2\Delta k}{3}, k \pm \Delta k \\ \{\omega_n\} &= \omega \pm \frac{\Delta \omega}{3}, \omega \pm \frac{2\Delta \omega}{3}, \omega \pm \Delta \omega \\ \text{slika} \quad N &= 6 \end{aligned}$$

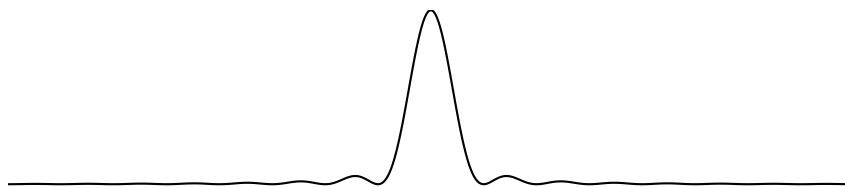
Radi bi dosegli limito  $N \rightarrow \infty$ :

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= A \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \exp \left( -i \left( \omega t + \frac{n}{N} \Delta \omega t - kx - \frac{n}{N} \Delta kx \right) \right) \\ u &= \frac{n}{N}, \quad dn = N du, \quad \sum \quad \text{prevedemo na} \quad \int \\ \Psi(x, t) &= A N e^{-i(\omega t - kx)} \int_{-1}^1 \exp(-i(\Delta \omega t - \Delta kx)u) du \\ &= A N e^{-i(\omega t - kx)} \frac{1}{-i(\Delta \omega t - \Delta kx)} \left( \underbrace{e^{-i(\Delta \omega t - \Delta kx)} - e^{i(\Delta \omega t - \Delta kx)}}_{2i \sin(\Delta \omega t - \Delta kx)} \right) \\ A &= \frac{a}{2N} \quad 2 \text{ črtamo, da bo vsota končna} \quad \sim \frac{1}{N} \\ \Psi(x, t) &= a e^{-i(\omega t - kx)} \frac{\sin(\Delta \omega t - \Delta kx)}{\Delta \omega t - \Delta kx} \\ \Rightarrow \quad \rho(x, t) &= |\Psi(x, t)|^2 = |a|^2 \frac{\sin^2(\Delta \omega t - \Delta kx)}{(\Delta \omega t - \Delta kx)^2} \\ \text{slika} \quad N &\rightarrow \infty \end{aligned}$$

Naredili smo valovni paket (wave packet). V kvantni mehaniki načelno ne moremo ostro določiti gibalne količine delca, če smo ga kakorkoli lokalizirali.



$$N = 2$$



$$N = \infty$$

### 2.8.2 Gaussov valovni paket

Radi bi se znebili stranskih oscilacij. Vsakemu valu damo drugo amplitudo in takoj računamo zvezno. Gledamo samo krajevni del:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \int A(k) e^{ikx} dk, \quad A(k) = A_0 e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} \\ \psi(x) &= A_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + ikx\right) \\ &= A_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{k-k_0}{\sqrt{2}\sigma_k} - \sqrt{2}i\sigma_k x\right)^2 - \sigma_k^2 x^2 + ik_0 x\right) dk \\ &= A_0 e^{-\sigma_k^2 x^2 + ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \underbrace{\left(\frac{k-k_0}{\sqrt{2}\sigma_k} - \sqrt{2}i\sigma_k x\right)^2}_{u, du = \frac{dk}{\sqrt{2}\sigma_k}}\right) dk \\ \Rightarrow \psi(x) &= \sqrt{2}\sigma_k A_0 e^{-\sigma_k^2 x^2 + ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{2}} du \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\sigma_k} A_0 \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_k^2}\right) e^{ik_0 x} \quad \text{Gaussov valovni paket} \quad \sigma_x = \frac{1}{2\sigma_k}\end{aligned}$$

### 2.9 Načelo nedoločenosti

(uncertainty principle) Nedoločenost lege v  $(\frac{\sin^2 x}{x^2})$  valovnem paketu:

$$p = \bar{p} \pm \sigma_p \quad \sigma_p = \hbar \Delta k$$

Širino verjetnostne gostote po nekem merilu lahko tolmačimo kot negotovost oziroma nezanesljivost s katero lahko določimo lego delca.

$$t = 0 : \quad \text{vrh v izhodišču, prvi minimum:} \quad \sin \Delta k \Delta x = 0 \rightarrow \begin{aligned} \Delta k \Delta x &= \pi \\ \Delta x &= \frac{\pi}{\Delta k} \end{aligned}$$

$$\sigma_p = \hbar \Delta k \quad \Delta x \equiv \sigma_x = \frac{\pi \hbar}{\sigma_p}$$

$$\text{oziroma} \quad \sigma_x \sigma_p = \pi \hbar = \frac{h}{2}$$

Heisenberg (1927) je to načelo formuliral in pokazal, da ima produkt  $\sigma_x \sigma_p$  spodnjo mejo:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{Heisenbergovo načelo nedoločenosti}$$

Enačaj dosežemo pri Gasuovem paketu.

**Zgled:** takoj ko delec zapremo v škatlo, dobi  $p \neq 0$ . Merilo za negotovost  $p$ :

$$\begin{aligned} \sigma_p^2 &= (\Delta p)^2 = \overline{p^2} - \bar{p}^2 = \overline{p^2} - \bar{p}^2 \\ (\Delta p)^2 &= \overline{p^2} \geq \left( \frac{\hbar}{L} \right)^2 \\ \overline{E}_{\text{kin}} &= \frac{\overline{p^2}}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} \end{aligned}$$

**Zgled:** "izpeljava" energije osnovnega stanja  $H$  atoma iz načela nedoločenosti  $e^-$  na krožni orbiti (Bohrov model):

$$E = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{ke^2}{r} \quad k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

Če vzamemo za red velikosti negotovosti lege kar  $\Delta x \approx r$ ,

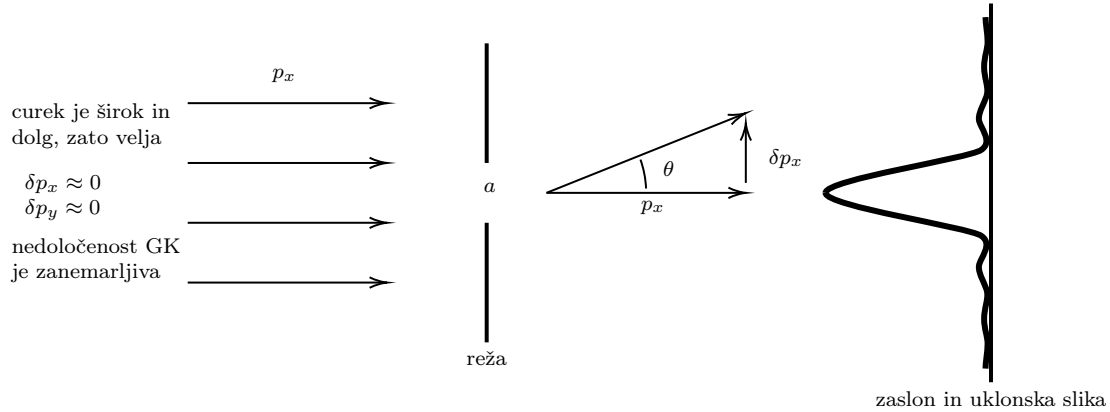
$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 &= \overline{p^2} \geq \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} = \frac{\hbar^2}{r^2} \\ \text{energija je} \quad E &= \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{ke^2}{r} \end{aligned}$$

Pri katerem  $r$  je  $E$  minimalna?

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial E}{\partial r} \right|_{r=r_{\min}} &= 0 \quad \Rightarrow \quad r_{\min} = \frac{\hbar^2}{ke^2 m_e} = r_B \\ \text{in še več} \quad E_{\min} &= -\frac{k^2 e^4 m_e}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV} \end{aligned}$$

### 2.9.1 Sipanje delcev na reži

Reža širine  $a$ , ki je primerljiva z de Brogliejevo valovno dolžino delca v curku, ki pada na režo



Ko pride skozi režo, ima delec  $\sigma_y \approx \frac{a}{2}$ . Gibalna količina:

$$p_y = 0 \pm \delta p_y \quad \text{ocenimo glede na položaj prvega minimuma:} \quad \frac{a}{2} \sin \theta = \frac{\lambda}{2}$$

$$\delta p_y = p_x \tan \theta \stackrel{\theta \ll 1}{\doteq} p_x \sin \theta = p_x \frac{\lambda}{a} = p_x \frac{h}{p_x a} = \frac{h}{a} = \sigma_{p_y}$$

$$\Rightarrow \sigma_y \sigma_{p_y} = \frac{a}{2} \frac{h}{a} = \frac{h}{2}$$

### 2.9.2 Nedoločenost energije in časa

$$\rho(x=0, t) = a^2 \frac{\sin^2(\Delta\omega t)}{(\Delta\omega t)^2}$$

Prvi minimum:  $\sin(\Delta\omega t_0) = 0 \quad t_0 \approx \sigma_t$ . Delec mimo nas potuje  $\approx$  na  $[-t_0, t_0]$ . Energija delca je  $E = \hbar\omega$ , toda v valovnem paketu je več frekvenc torej tudi energija ni točno določena, je na intervalu  $[\omega - \Delta\omega, \omega + \Delta\omega]$ . Nedoločenost energije  $\sigma_E = \hbar\Delta\omega$

$$\sin(\Delta\omega t_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega t_0 = \pi$$

$$t_0 \equiv \sigma_t = \frac{\pi}{\Delta\omega} = \frac{\hbar\pi}{\hbar\Delta\omega} = \frac{h}{2\sigma_E}$$

$$\Rightarrow \sigma_t \sigma_E = \frac{h}{2}$$

oziroma spet natančnejši račun:  $\sigma_t \sigma_E \geq \frac{h}{2}$

Načelo nedoločenosti je samo načelo, torej je nedokazljivo, a deluje. Je očitno v nasprotju z eksaktno napovedjo npr. trajektorij. Napovedujemo lahko verjetnost, da je delec npr. med  $x = a$  in  $x = b$ . Tako je obnašanje kvantnih sistemov nedeterministično. To so fiziki težko sprejeli.

Die Theorie liefert viel, aber dem Geheimnis des Alten bringt sie uns nicht näher. Jedenfalls bin ich überzeugt, dass der nicht würfelt. **[Gott würfelt nicht]**

(Albert Einstein)

Zgled za to, da načelo nedoločenosti v makroskopskem svetu ne pride do izraza:

Telo, ki ima maso  $m = 1\text{kg}$  in hitrost  $v = 1\frac{m}{s}$ . Recimo, da lahko lego določimo na  $\sigma_x \approx 10^{-15}m$  natančno (toliko je velikost atomskega jedra).

$$\text{Nedoločenost hitrosti: } \sigma_v = \frac{\sigma_p}{m} \approx \frac{h}{m\sigma_x} \approx 10^{-18} \frac{m}{s}$$

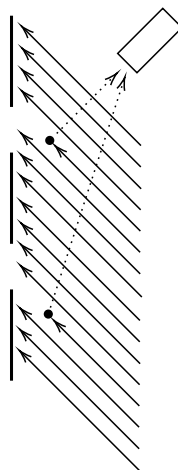
Napram mikroskopskim delcem, kjer pa se to pozna:

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{kg} \Rightarrow \sigma_v > c \quad \text{pri istem } \sigma_x$$

## 2.10 Interferenčni poskus z delci

(two-slit experiment)  $\lambda$  (de Broglie) mora biti primerljiva z razmikom med režama. Konstruktivno interferenco pričakujemo pod koti  $\theta$ , kjer velja  $a\theta = n\lambda$ , kot jo pričakujemo z ene samo reže. Ko odpremo obe reži in nanju pošljemo posamezne elektrone, opazimo da delci interferirajo sami s seboj! Dobimo prvi primer na sliki spodaj

Lahko merimo skozi katero rezo je šel elektron:



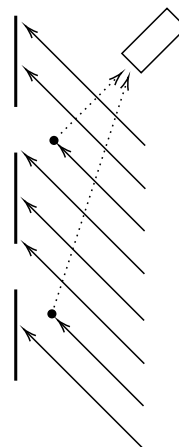
to res lahko storimo in ugotovimo rezo, skozi katero je šel, a interferenčna slika izgine



delec se obnaša drugače, če ga opazujemo, kot če ga ne.



Kolaps valovne funkcije  
wave-function collapse



toda delec smo zmotili, ker je bila ta  $\lambda$  svetlobe premajhna, tako da vzamemo večjo valovno dolžino (delca ne zmotimo)



Dobimo interferenčno sliko, ampak s to  $\lambda$  ne moremo več ločiti med režami

$\Psi_1 =$  valovna funkcija, ki opisuje tir delca skozi prvo rezo

$\Psi_2 =$  valovna funkcija, ki opisuje tir delca skozi drugo rezo

$\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$  skupna valovna funkcija oziroma superpozicija (linearnost)

Verjetnostna gostota na zaslonu z dvema odprtima režama, primer *a*):

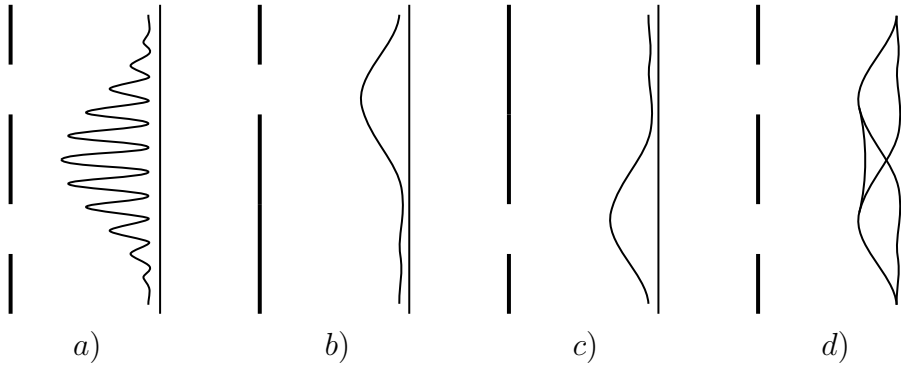
$$\begin{aligned}\rho_{12}^{a)} &= |\Psi_{12}|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 \\ &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \underbrace{\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*}_{\text{IF člen, ki da IF sliko}}\end{aligned}$$

Verjetnostna gostota, ko je ena reža zaprta, primera *b*) in *c*):

$$\rho_1^{b)} = |\Psi_1|^2 \quad \rho_2^{c)} = |\Psi_2|^2$$

Pri *d*) pa dobimo nekoherentno vsoto, ki je v redu, kadar lahko ugotovimo, po kateri poti je šel delec.

$$\rho_{12}^{d)} = \rho_1^{b)} + \rho_2^{c)} = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 0$$



## 3 Kvantna mehanika v 1d

### 3.1 Schrödingerjeva enačba

Vse imamo v 1d, smer  $x$ , vse nerelativistično, potencialno energijo  $V(x)$  in silo  $F = -\frac{dV}{dx}$ . V klasični mehaniki, bi radi  $x(0), \dot{x}(0) \rightarrow x(t) \quad t > 0$ . V kvantni mehaniki pa bi radi našli valovno funkcijo  $\Phi(x, t)$  in potem napovedali verjetnost za detekcijo delca. Potrebujemo "gibalno enačbo", ki je očitno parcialna diferencialna enačba, ker mora vsebovati odvoda po  $t$  in  $x$ . Valovna enačba (naprimer za valovanje na vrvici,  $u = u(x, t)$ ):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Hočemo linearnost ( $u_1, u_2$  rešitvi  $\Rightarrow u_1 + u_2$  rešitev). Načelo superpozicije bi radi obdržali, sicer za naše "snovne valove" ne bomo dobili interferenčnih pojavov. Kasneje pokažemo, da enačba  $\Psi(x, t)$  bo morala biti 1. reda v časovnem odvodu.

Najprej samo prost delec

$$V = 0, \quad F = -\frac{dV}{dx} = 0$$

Lokaliziran prost delec opišemo kot

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

Od valovnega paketa vemo:

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

Disperzijska relacija za delec z maso  $m$ . Globlje ozadje: razlika med fazno in grupno hitrostjo valovanja:

$$c_f = \frac{E}{p} = \frac{v}{2} \quad c_g = \frac{dE}{dp} = v \quad \text{to je smiselno, ker imamo paket valov}$$

Torej:

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

Formalno  $A(k)$  ni bistvena. Uvidimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k) (ik)^2 e^{i(kx - \frac{\hbar}{2m} k^2 t)} dk \\ \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \left( -i \frac{\hbar}{2m} \right) k^2 e^{i(kx - \frac{\hbar}{2m} k^2 t)} dk \end{aligned}$$



količini  $\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$  in  $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$  sta identični!

Torej odvod prvega reda po  $t$  in odvod drugega reda po  $x \Leftrightarrow$  disperzijska relacija  $\omega \propto k^2$ . Tako dobimo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

To Schrödingerjevo enačbo, ki še ne vsebuje potenciala, bi lahko pojmovali, kot delovanje dveh diferencialnih operatorjev na  $\Psi$ :

$$p^2 \Rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{in} \quad E \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Ta diferencialna operatorja delujeta na  $\Psi(x, t)$  in pomenita reprezentacijsko pravilo za količini  $p^2$  in  $E$ . Enačbe nismo strogo izpeljali, je pa konsistentna z vsemi našimi zahtevami in željami (in še mnogimi drugimi, ki jih še ne poznamo). Jasno je, da v Newtonovem režimu in pri  $v \rightarrow c$  ne bo dobra. Radi bi zaključili potenciale:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

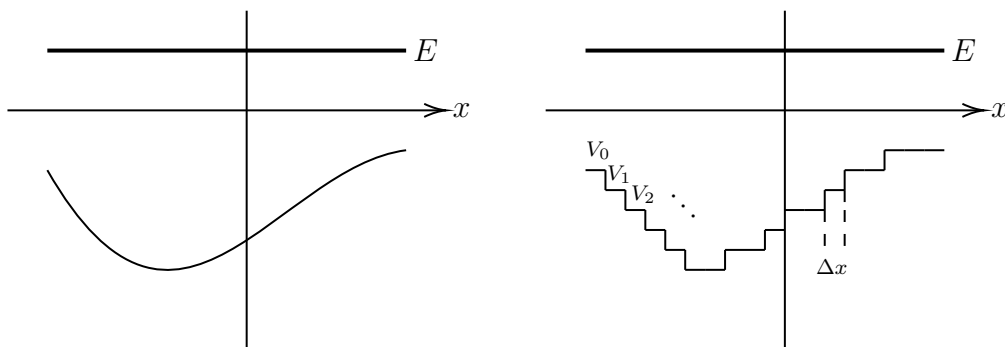
Uporabimo kar “monokromatsko” valovno funkcijo  $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\omega$$

$\Psi(x, t)$  mora zadoščati diferencialni enačbi:

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

Kjer je  $V$  za zdaj konstanten ( $-\frac{dV}{dx} = 0$ ). Če hočemo  $V \neq \text{konst.}$



$E$  ves čas konstanten in  $E = \hbar\omega$ . Na vsaki stopnički je  $k$  drugačen, i.e.

$$E = V_0 + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = V_1 + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \dots$$

To stopničanost poženemo v limito  $\Delta x \rightarrow 0$ , torej poljuben  $V(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \text{oziroma} \quad \hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Dobili smo časovno odvisno (nestacionarno) Schrödingerjevo enačbo (NSE). S strešico označimo operatorje, kjer je  $\hat{H}$  Hamiltonov operator (celotne energije) imenovan lahko tudi Hamiltonka ali pa Hamiltonian, kjer velja

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{T} + \hat{V} \\ \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ \hat{V} &= V(x) \quad \text{za zdaj samo multiplikator}\end{aligned}$$

**Opomba:** Vemo, da so  $\cos(kx - \omega t)$ ,  $\sin(kx - \omega t)$ ,  $e^{i(kx - \omega t)}$ , ... možne rešitve običajne klasične valovne enačbe (ker so v njej drugi odvodi po  $x$  in  $t$ ). Toda  $\cos(kx - \omega t)$  in  $\sin(kx - \omega t)$  nista vreda za Schrödingerjevo enačbo, ki je prvega reda v časovnem odvodu in že to nam pove, da mora biti časovna odvisnost  $\Psi(x, t)$  kompleksna

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

**Zgled:**  $e^{i(kx - \omega t)}$  in  $e^{i(-kx - \omega t)}$  sta rešitvi NSE za prosti delec, torej mora biti tudi njuna linearna kombinacija rešitev NSE. Naprimer:

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \frac{A}{2} [e^{i(kx - \omega t)} + e^{i(-kx - \omega t)}] \\ &= A \cos kx e^{-i\omega t}\end{aligned}$$

Ali to res zadosti NSE?

$$\begin{aligned}\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\right) A \cos kx e^{-i\omega t} &= \left(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V\right) \cos kx e^{-i\omega t} \\ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \hbar \omega A \cos kx e^{-i\omega t}\end{aligned}$$

Torej Schrödingerjeva enačba velja, če  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar \omega = E$ .

### 3.2 Verjetnostna interpretacija $\Psi(x, t)$

Postavili smo "gibalno" enačbo, kaj vemo o značaju njene rešitve? Kako dobimo iz nje informacije o verjetnosti za detekcijo delca?

Schrödinger: je že sam  $\Psi$  tolmačil kot fizikalni "val" oziroma reprezentacija.

Born:  $\Psi$  je samo matematični objekt, edina opazljiva reč pa je  $|\Psi|^2$ . Osnovni argument je nujno  $\Psi(x, t) \in \mathbb{C}$ .

Vrnimo se k poskusu na dveh režah.

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \quad \Psi_1 = |\Psi_2|e^{i\Phi_1} \quad \Psi_2 = |\Psi_2|e^{i\Phi_2}$$

Verjetnost za detekcijo na zaslonu:

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= (\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2) \\ &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_2^*\Psi_1 + \Psi_2\Psi_1^* \\ &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2|\Psi_1||\Psi_2|\cos(\Phi_1 - \Phi_2) \end{aligned}$$

Na koncu imamo interferenčni člen, kjer sta fazi odvisni od tega, kje opazujemo sliko. Za poljuben delec  $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$  ob času  $t$  je verjetnost, da ga zaznamo med  $x_1$  in  $x_2$

$$\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx$$

in dogovorimo se, da

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

NSE je linearna, zato sta  $\Psi$  in  $a\Psi$  v redu. Ker imamo v splošnem časovno odvisno  $\rho(x, t)$ , se lahko vprašamo o toku verjetnosti. Oglejmo si kakšnim enačbam zadoščata  $\Psi$  in  $\Psi^*$   $V(x) = 0$ .

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} &= -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \\ \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) &= \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \\ &= \Psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) \Psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right]}_{\text{gostota verjetnostnega toka}} \\ &\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \end{aligned}$$

Dobimo ohranitveni zakon za verjetnost: časovno spremembo verjetnosti kompenzira sprememba fluksa prek lokalnega območja.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) dx = - \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) dx = j(x_1, t) - j(x_2, t)$$

Ohranitveni zakon velja tudi za neproste delce. Subtilna poanta: rekli smo  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ . Leva stran je še odvisna od  $t$ . Prepišimo v obliko:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \Psi^* \Psi dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{x_1}^{x_2}$$

Na katerem koli končnem intervalu  $\Delta x = x_2 - x_1$ , je lahko verjetnost za detekcijo odvisna od  $t$ , saj je desna stran te enačbe v splošnem različna od nič. Toda ta integral zadeva  $(-\infty, \infty)$ , torej celotno definicijsko območje  $\Psi$ . Za ta odgovor sta relevantni limiti, kjer pošljemo  $x_1 \rightarrow -\infty$  in  $x_2 \rightarrow \infty$ . Kar pomeni, da mora biti valovna funkcija  $\Psi$  smiselno lokalizirana.

$$\left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{x_1}^{x_2} \rightarrow 0$$

Sprejemljive valovne funkcije:

- $\Psi$  zvezna: ker verjetnost za detekcijo  $|\Psi|^2 \Delta x$  ne sme nezvezno skakati od ene točke do druge.
- Ker Schrödingerjeva enačba vsebuje drugi odvod  $\Psi''$ , mora biti zvezen tudi prvi odvod  $\Psi'$ . Izjemo imamo, ko  $V \rightarrow \infty$ , je lahko  $\Psi'$  nezvezen ( $\Psi$  pa še vedno zvezna).

### 3.3 Stacionarna stanja

Tukaj gre za separacijo krajevnih in časovnih koordinat. Ta separacija je ključna za rešitev Schrödingerjeve enačbe in neposredno pripelje do pojma stacionarnih stanj. Rešitve iščemo s produktnim nastavkom (ansatz), produktno valovno funkcijo:

$$\begin{aligned} \Psi &= \psi(x)f(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} f + V\psi f &= i\hbar \psi \frac{\partial f}{\partial t} \\ \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi}{\psi} &= \frac{i\hbar \psi \frac{\partial f}{\partial t}}{f} \equiv \lambda \quad \text{separacijska konstanta in ne valovna dolžina} \\ \Rightarrow i\hbar \psi \frac{\partial f}{\partial t} &= \lambda f \quad (1) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi &= \lambda \psi \quad (2) \end{aligned}$$

Kjer mora biti potencial odvisen samo od  $x$ , sicer separacija ne deluje. Rešitev (1):

$$\begin{aligned} f(t) &= e^{-i\frac{\lambda t}{\hbar}} = \cos \overbrace{\frac{\lambda}{\hbar}}^{\omega} t - i \sin \frac{\lambda}{\hbar} t \\ E &= \hbar \omega = \lambda \end{aligned}$$

Separacijska konstanta je enaka energiji stanja, v katerem je delec. Da to stanje dobimo, pa moramo rešiti (2) enačbo, in to je glavna naloga pri danem potencialu  $V(x)$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

Tako dobimo časovno neodvisno (stacionarno) Schrödingerjevo enačbo (SSE). Kratek zapis:

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

Produkta rešitev  $\Psi = \psi f$  je veljavna rešitev Schrödingerjeve enačbe ob pogoju da je  $\psi$  rešitev stacionarne Schrödingerjeve enačbe. Časovna odvisnost vsebovana v  $f(t)$  je trivialna.

- Dovoljena vrednost  $E$  je lastna vrednost energije (energy eigenvalue)
- Pripadajoča  $\psi$  pa je lastna funkcija (eigen function) operatorja energije

Tudi  $\psi$  je normiran  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$ . Ni nujno vsak  $\Psi$  takega tipa,  $\psi(x)e^{-\frac{Et}{\hbar}}$ ,

lahko imamo njihove superpozicije, ampak če so oblike  $\Psi = \psi e^{-\frac{Et}{\hbar}}$ , opisujejo stacionarna stanja sistema

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2$$

Stanje je stacionarno, ker verjetnostni vidik ustrezne valovne funkcije (ne pa valovna funkcija sama) niso odvisne od časa. Pričakujemo množico (spekter)  $E$  in ustreznih  $\psi(x)$  za nek določen  $V(x)$ .

**Zgled:** imamo dve stanji

$$(E_1, E_2) : \quad \begin{array}{l} \psi_1(x)e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} \\ |\Psi_1|^2 = |\psi_1|^2 \end{array} \quad \text{in} \quad \begin{array}{l} \psi_2(x)e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \\ |\Psi_2|^2 = |\psi_2|^2 \end{array}$$

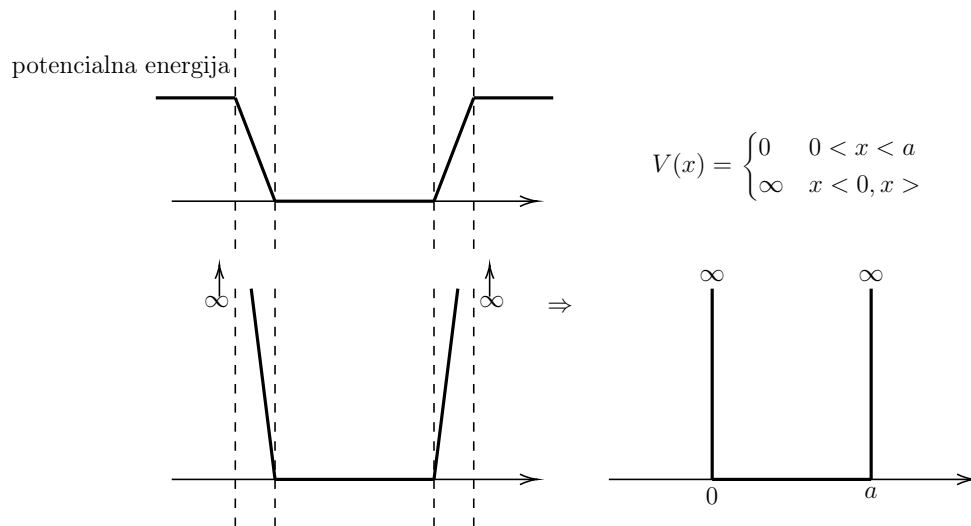
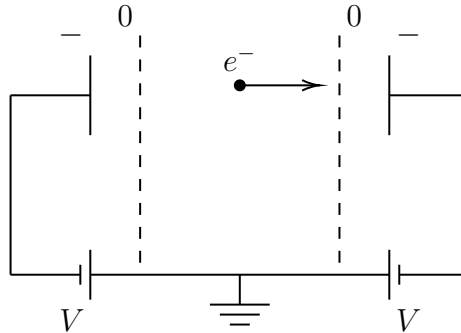
Toda superpozicija ni stacionarna:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= a_1 \psi_1(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + a_2 \psi_2(x) e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \\ |\Psi(x, t)|^2 &= \left( a_1^* \psi_1^* e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} + a_2^* \psi_2^* e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \left( a_1 \psi_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + a_2 \psi_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \\ &= |a_1|^2 |\psi_1|^2 + |a_2|^2 |\psi_2|^2 + a_1^* a_2 \psi_1^* \psi_2 e^{i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} + a_1 a_2^* \psi_1 \psi_2^* e^{-i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \end{aligned}$$

In to je v splošnem odvisno od  $t$ . Tak  $\Psi(x, t)$  ne opisuje stacionarnega stanja, ker  $|\Psi(x, t)|^2$  vsebuje  $\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}$ . Vse statistične lastnosti bodo oscilirale s takšno  $\omega$ .

### 3.4 Neskončna potencialna jama

ali tudi lonec (infinite square well/particle in a box). Makroskopska analogija:



Delec ima samo kinetično energijo, saj  $V = 0$  in  $E = T$ . Delec ne more iz jame (tudi kvantno ne)  $\Rightarrow$  robna pogoja  $\psi(0) = \psi(a) = 0$ , kjer je znotraj jame  $V(x) = 0$  (in tu rešujemo SSE).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2$$

Rešitve so:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad A, B = \text{konst.}$$

$$\psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0$$

$$\psi(a) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(a) = A \sin ka = 0$$

$$\text{kjer je } k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$\Rightarrow \quad \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi a}{n\pi} \quad \Rightarrow \quad a = n \frac{\lambda}{2}$$

Za energijo to pomeni

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = n^2 E_1$$

Kjer je  $n \geq 1$  kvantno število.  $E_n$  je nabor lastnih energij delca z maso  $m$  v  $\infty$  potencialnem loncu širine  $a$  (energijski spekter). Lastne funkcije so:

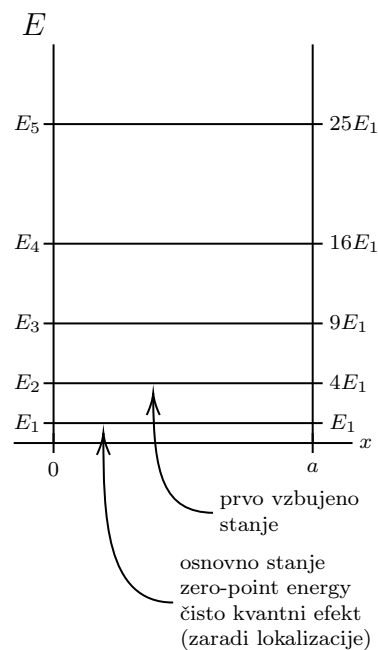
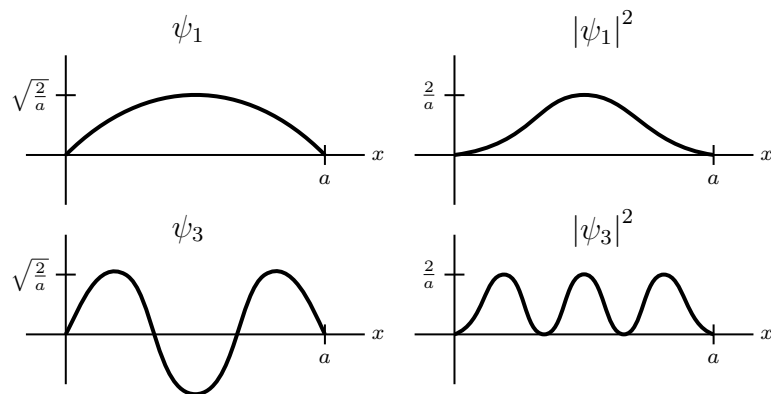
$$\psi_n = A_n \sin k_n x$$

Normiramo jih:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_0^a |A_n|^2 \sin^2 \left( \frac{n\pi x}{a} \right) dx = 1$$

$$\Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \in \mathbb{R}$$

$$\Rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$



Lastne funkcije so ortonormirane:

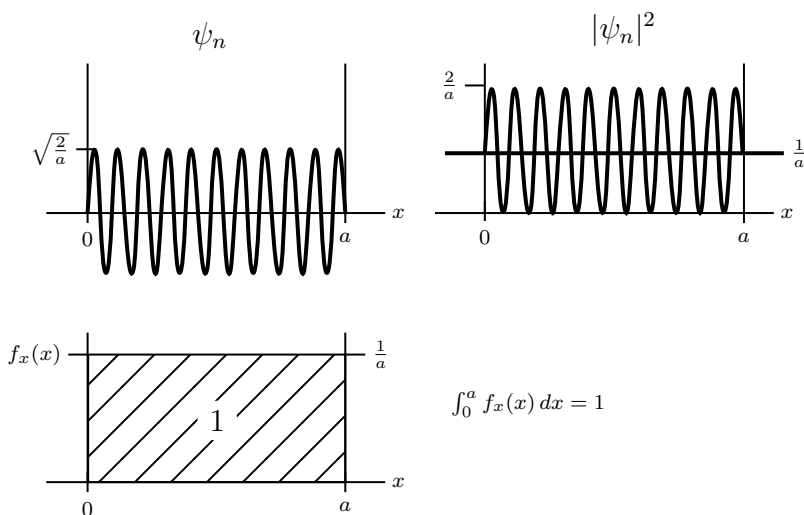
$$\int_0^a \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{m,n} \begin{cases} 1 & ; \quad m = n \\ 0 & ; \quad m \neq n \end{cases}$$

**Opomba:** možen je tudi interval  $[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$ . Je tudi lepši, če bi radi hitreje videli simetrije. Toda tedaj imamo dve vrsti valovne funkcije:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} & \text{sodi } n \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} & \text{lihi } n \end{cases}$$

Izraz za  $E_n$  ostane enak, razen če izberemo  $[-a, a] \Rightarrow \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$ .

**Opomba (korespondenčno načelo):** kakšna je  $\psi_n(x)$  ozrioma  $|\psi_n(x)|^2$ , ko  $n \rightarrow \infty$ ?



### 3.5 Lastnosti lastnih funkcij

Ker so  $\psi_n(x)$  ortonormirane, lahko katerokoli valovno funkcijo delca (ne le v neskončni potencialni jami, povsod!) razvijemo po lastnih funkcijah energije:

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

Kjer imamo začetni pogoj  $t = 0$ . Za jamo:

$$\begin{aligned} \int_0^a \psi_m(x) \Psi(x, 0) dx &= \sum_n c_n \int_0^a \psi_m(x) \psi_n(x) dx \\ &= \sum_n c_n \delta_{m,n} \\ &= c_m \end{aligned}$$



Izvemo tudi, kako se bo s časom spreminjala  $\Psi(x, t)$ .

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$$

**Zgled:** lokaliziran delec (valovni paket v neskončni jami). Vzemimo Gaussov paket s širino  $\sigma \ll a$ , s sredino pri  $x = x_0$ , in naj ima povprečno gibalno količino  $\hbar k_0$ :

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}} e^{-i \frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} \\ &= \sum_n c_n \psi_n(x) \end{aligned}$$

Kjer morajo biti  $\psi_n$  lastne za sistem v katerem to delamo. Dobimo  $c_n$ :

$$c_n = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a e^{-i \frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$\text{ker } \sigma \ll a \approx i(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{\sigma}{a}} \left[ e^{-\sigma^2 \left(k_0 - \frac{n\pi}{a}\right)^2} e^{i \left(k_0 - \frac{n\pi}{a}\right) x_0} - e^{-\sigma^2 \left(k_0 + \frac{n\pi}{a}\right)^2} e^{i \left(k_0 + \frac{n\pi}{a}\right) x_0} \right]$$

Zdaj imamo  $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$ , čeprav je izraz za  $c_n$  grd, ga imamo. Paket se razleze, zmanjša se mu amplituda (zardi disperzije, različni  $k$ !).

**Svarilo:** za prost delec (ravni val) so lastna stanja  $E$  tudi lastna stanja gibalne količine! Pri delcu v neskončni jami to ne velja, namreč:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{a}} (e^{ik_n x} + e^{-ik_n x}) \quad k_n = \frac{n\pi}{a}$$

Kjer sta gibalna količina  $k_n \hbar$  v eno smer in gibalna količina  $k_n \hbar$  v nasprotno smer dobro določeni.

### 3.6 Linearni harmonski oscilator

Klasična predstava: delec z maso  $m$  na vmzeti s koeficientom  $k$

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 \quad \Rightarrow \quad F = -\frac{dV}{dx} = -kx$$

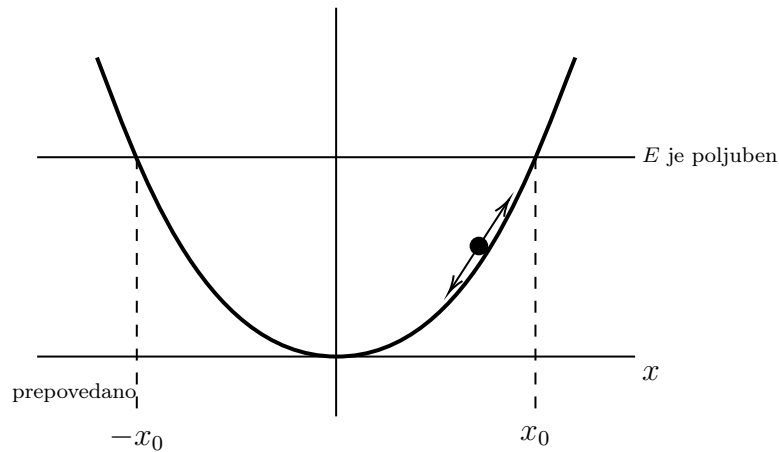
$$m\ddot{x} = -kx$$

$$\Rightarrow \quad x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t - \Phi) \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$v(t) = \dot{x}(t) = -\omega_0 x_0 \sin(\omega_0 t - \Phi)$$

Celotna energija (konstanta gibanja) je

$$\begin{aligned}
 E = T + V &= \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 \\
 &= \frac{1}{2}mv_0x_0^2\omega_0^2 \sin^2(\omega_0 t - \Phi) + \frac{1}{2}kx_0^2 \cos^2(\omega_0 t - \Phi) = \frac{1}{2}kx_0^2 \\
 v(x) &= \sqrt{\frac{2}{m} \left( E - \frac{1}{2}kx^2 \right)} = \sqrt{\frac{k}{m} (x_0^2 - x^2)}
 \end{aligned}$$



Kakšna je verjetnostna gostota?

$$\begin{aligned}
 f_{\text{klas}}(x) dx &= \frac{dt}{\frac{T}{2}} = \frac{\frac{dx}{v(x)}}{\frac{T}{2}} \\
 \Rightarrow f_{\text{klas}}(x) &= \frac{2}{T v(x)} = \frac{\omega_0}{\pi} \frac{1}{v(x)} = \frac{\sqrt{\frac{k}{m}}}{\pi} \frac{1}{v(x)} = \frac{1}{\pi \sqrt{x_0^2 - x^2}} \\
 \Rightarrow f_{\text{klas}}(x) dx &= 1
 \end{aligned}$$

Zdaj pa kvantna obravnava: Rešiti moramo SSE:

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi &= E\psi \quad V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \\
 \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{k^2}{2}x^2 - E \right) \psi = \frac{mk}{\hbar^2} \left( x^2 - \frac{2E}{k} \right) \psi \\
 \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \left( \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} x^2 - \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} \right) \psi
 \end{aligned}$$

Radi bi brezdimenzijsko obliko enačb:

$$\begin{aligned}
 \xi^2 &= \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} x^2 \\
 \lambda &= \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{\hbar\omega_0}
 \end{aligned}$$

Tako odbimo

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - \lambda) \psi$$

Klasičen delec omejen na  $|x| \leq x_0$  v novih spremenljivkah pomeni

$$\xi_{\max}^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} x_0^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \frac{2E}{k} = \frac{2E}{\hbar\omega_0} = \lambda$$

Obnašanje rešitve ključno odvisno od predznaka  $\xi^2 - \lambda$

$\xi^2 < \lambda \Rightarrow \psi$  drug predzna kot  $\psi''$  dovoljeno območje

$\xi^2 > \lambda \Rightarrow \psi$  isti predznak kot  $\psi''$  klasično prepovedano, ne pa kvantno!

Kvantni problem ima neničelno rešitev v klasično prepovedanem območju. Neničelna verjetnost, da delec detektiramo tam, kjer ga klasično ne najedmo nikoli! Rešitev napol uganemo in pričakujemo zelo hitro padanje  $\psi(x)$  proti  $\pm\infty$ . Poskusimo

$$\psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\psi'(\xi) = -\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\psi''(\xi) = \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} - e^{-\frac{\xi^2}{2}} = (\xi^2 - 1) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

To izpolni SSE, če velja

$$\lambda_0 = 1$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \lambda_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} = \text{energija osnovnega stanja LHO}$$

Celotna valovna funkcija osnovna stanja:

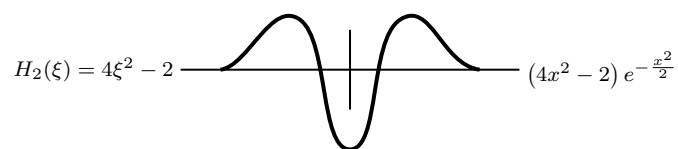
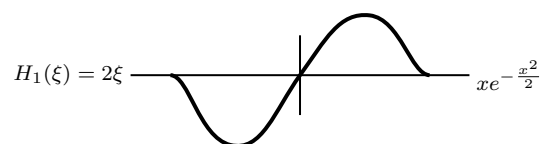
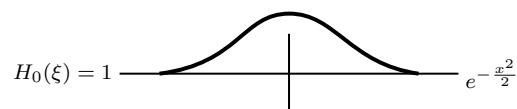
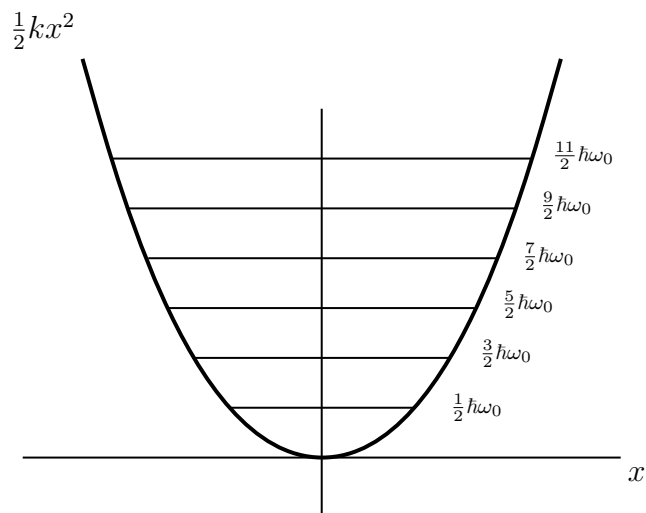
$$\Psi_0(x, t) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}} e^{-\frac{E_0 t}{\hbar}} = \psi_0(x) e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}}$$

Če bi s tem uganjevanjem nadaljevali (ali pogledamo v knjige ali Schrödingerjev trik)

$$\psi(\xi) = p(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

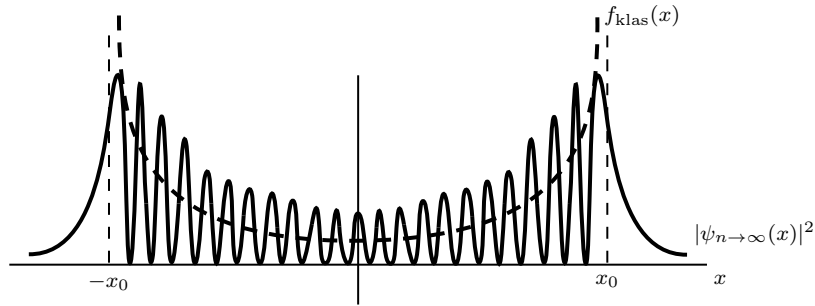
$$E_n = \frac{\hbar\omega_0}{2} \lambda_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$$



**Zgled:** gaussov paket v harmonskem potencialu (paket spet lokaliziran, ampak ne tako “grobo” kot v neskončni potencialni jami).

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= \text{Gaussov paket} \\ \text{spet } \Psi(x, 0) &= \sum_n c_n \psi_n(x) \\ c_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) \psi_n(x) dx \\ \Psi(x, t) &= \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \quad E_n = \hbar \omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Korespondenčno načelo:



### 3.7 Pričakovane vrednosti

(expected, expectation value), označimo z  $\overline{A}$  ali  $\langle A \rangle$ .  $\Psi$ ,  $|\Psi|^2$  imamo, v njiju je “zakodirana” vsa informacija, a manjkajo nam izrazi za izračun vseh opaljk, naprimer energija, gibalna količina, lega (v smislu verjetnosti za detekcijo na  $\Delta x$ ), itd. Iz verjetnostne teorije:

$$\overline{A} = \int_{-\infty}^{\infty} A(x) f_x(x) dx$$

Velja tudi v kvantnem, če je  $A(x)$  skalar v 1d oziroma ni diferencialen operator:

$$\langle A \rangle = \overline{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* A(x) \Psi(x, t) dx$$

Če je  $A(x)$  samo multiplikativna reč, je preprosto  $\int_{-\infty}^{\infty} A(x) |\Psi(x, t)|^2 dx$ .

Naprimer:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* V(x) \Psi(x, t) dx \\ \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* x \Psi(x, t) dx \\ \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* x^2 \Psi(x, t) dx \end{aligned}$$

Tako kot pri verjetnosti v fiziki ( $E[X], E[X^2]$ ):

$$\begin{aligned} (\delta x)^2 &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle \\ &= \langle x^2 \rangle - 2 \langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \end{aligned}$$

Kaj pa gibalna količina? Klasično bi mislili:  $\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$ . V kvantnem ogrodju pa velja:

$$\begin{aligned} m \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= m \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx = m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* x \Psi) dx \\ &= m \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi + \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx \end{aligned}$$

Predpostavimo  $V(x) \in \mathbb{R}$  in upoštevamo NSE za  $\Psi$  in  $\Psi^*$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{V}{i\hbar} \Psi \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{V}{i\hbar} \Psi^* \\ \Rightarrow &= m \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \left[ -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{V}{i\hbar} \Psi^* \right] x \Psi + \Psi^* x \left[ \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{V}{i\hbar} \Psi \right] \right\} dx \\ &= \frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi \right) dx \\ &= \frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi + \Psi^* \Psi \right) - 2 \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] dx \\ &= \frac{i\hbar}{2} \left( \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi + \Psi^* \Psi \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} - i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \\ \Rightarrow \quad \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) dx \end{aligned}$$

Tako dobimo operator gibalne količine  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ . Operator deluje samo na krajevni del valovne funkcije. Tako lahko izrazimo operator kinetične energije:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Ker znamo izračunati  $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p \rangle, \langle p^2 \rangle$ , znamo torej tudi izračunati nedoločenost:

$$(\delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (\delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$$

Zdaj znamo za katero koli  $\Psi(x, t)$  preveriti ali velja

$$\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Celotna energija je  $E = T + V$ , kvantno pa imamo:

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \underbrace{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right]}_{=\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}} \Psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \underbrace{\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)}_{\substack{\hat{E} \quad \text{ali} \quad \hat{H}}} \Psi dx\end{aligned}$$

$\hat{p}$  in  $\hat{H}$  sta  $\mathbb{C}$  operatorja, toda  $\langle E \rangle \in \mathbb{R}$ , sicer smo se zmotili...

### 3.7.1 Stacionarna stanja

Oglejmo si pričakovano vrednost energije v stacionarnem stanju

$$\begin{aligned}\Psi_n(x, t) &= \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \\ i\hbar \frac{d\Psi_n}{dt} &= E_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} = E_n \Psi_n \\ \text{Torej } \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_n dx = E_n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi_n dx = E_n \\ \langle E^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \Psi_n dx = E_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi_n dx = E_n^2 \\ \Rightarrow \langle E^2 \rangle &= \langle E \rangle^2 = E_n^2\end{aligned}$$

Energija stacionarnega stanja je enala lastni vrednosti energije v tem stanju z ničelno negotovostjo?!

$$(\delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = E_n^2 - E_n^2 = 0$$

Spomnimo se  $|\Psi_n(x, t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$  verjetnostna gostota je neodvisna od  $t$ . To pomeni nekakšno delokalizacijo v času. Lahko vidimo kot  $\delta E = 0$  in  $\delta t = \infty$ , kjer podobno kot velja za  $\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ , velja  $\delta t \delta E \geq \frac{\hbar}{2}$ . Nakasneje pri sevanju bo postalo vse jasno, da strogo stacionarnih stanj ne more biti, sicer sistemi ne bi sevali (perturbacije/fluktuacije).

### 3.7.2 Meritev energije

Denimo, da  $\psi(x)$  ni lastno stanje energije, lahko pa ga razvijemo po lastnih:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

Pričakovana vrednost energije v tem stanju je:

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= \int \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx \\
 &= \sum_{mn} c_m^* c_n \int \psi_m^*(x) \underbrace{\hat{H} \psi_n(x)}_{=E_n \psi_n(x)} dx \\
 &= \sum_{mn} c_m^* c_n E_n \int \underbrace{\psi_m^* \psi_n}_{\delta_{m,n}} dx = \sum_n |c_n|^2 E_n
 \end{aligned}$$

Zaradi normalizacije še:

$$\int \psi^* \psi dx = \sum_{mn} c_m^* c_n \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum_n |c_n|^2 \equiv 1$$

$|c_n|^2$  je verjetnost, da delcu v stanju  $\psi$  izmerimo  $n$ -to lastno vrednost energije. Naprimer

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_2) \quad |c_1|^2 = |c_2|^2 = \frac{1}{2}$$

Pri kateri koli posamezni meritvi lahko izmerimo samo eno od lastnih vrednosti hamiltonovega operatorja.

**Primer:** povprečna gibalna količina valovnega paketa

$$\begin{aligned}
 \psi(x) &= A e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} \\
 \frac{d\psi}{dx} &= A \left( -\frac{x}{2\sigma^2} + ik_0 \right) e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} \\
 \langle p \rangle &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d\psi}{dx} dx \\
 &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} A^* e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{-ik_0 x} A \left( ik_0 - \frac{x}{2\sigma^2} \right) e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} dx \\
 &= \hbar k_0 \underbrace{|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx}_{\substack{A \text{ nastavljen tako, da je to } 1}} + \frac{i\hbar}{2\sigma^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx}_{\substack{=0 \text{ lih integrand na sodih mejah}}} \\
 \langle p \rangle &= \hbar k_0
 \end{aligned}$$



Kaj pa  $\langle T \rangle$ ?

$$\begin{aligned}
\langle T \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx \\
\frac{d^2 \psi}{dx^2} dx &= A \left( -\frac{x^2}{2\sigma^2} \right) e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} + A \left( -\frac{x}{2\sigma^2} + ik_0 \right)^2 e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} \\
&= A \left( -\frac{1}{2\sigma^2} - k_0^2 + \frac{x^2}{4\sigma^4} - i \frac{k_0 x}{\sigma^2} \right) e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} \\
\Rightarrow \langle T \rangle &= -|A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left( -\frac{1}{2\sigma^2} - k_0^2 + \frac{x^2}{4\sigma^4} \right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx \\
&= |A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( -\frac{1}{2\sigma^2} - k_0^2 \right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx - \frac{x^2}{4\sigma^4} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx \right] \\
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{2}} du &= \sqrt{2\pi} \quad \int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-\frac{u^2}{2}} du = \sqrt{2\pi} \quad u = \frac{x}{\sigma}, dx = \sigma dx \quad |A|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \\
&= \dots = |A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( -\frac{1}{2\sigma^2} - k_0^2 \right) \sqrt{2\pi}\sigma - \frac{x^2}{4\sigma^4} \sqrt{2\pi}\sigma^3 \right] \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) \langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) \left( k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right)
\end{aligned}$$

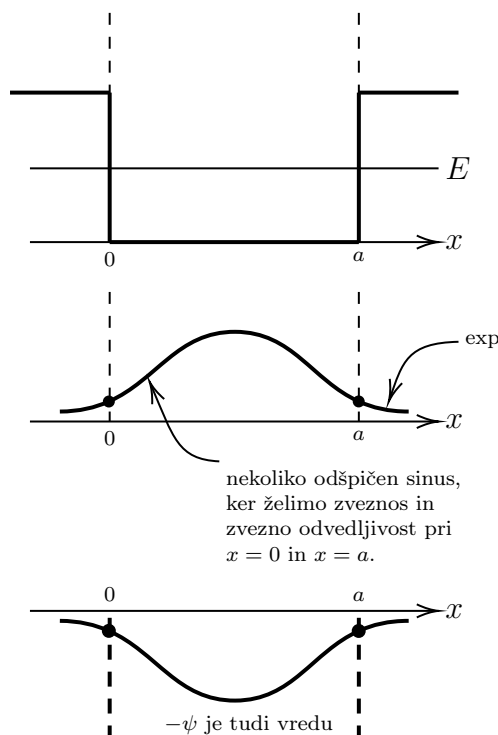
Povsem kvantna pridobitev! Različno od nič tudi tedaj ko klasično delec miruje ( $k_0 = 0$ ). To pride od lokalizacije delca (paket ima širino  $\approx$  nekaj takega kot  $\sigma$ ).

### 3.8 Kvalitativne slike valovnih funkcij vezanih stanj

Intuitivne rešitve SSE za poljuben potencial, brez da bi računali. Tudi dobra dobra preprava za validacijo numeričnih računov (sanity check). In hkrati dobra popotnica za 3d probleme!

#### 3.8.1 Ukrivljenost valovne funkcije

Kakšna bi bila prva lastna valovna funkcija (osnovno stanje) za delec v končni potencialni jami?



Kvantno imamo rešitev tudi pri  $x < 0$  in  $x > a$ :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0\right) \psi = E \psi$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = \overbrace{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}^{=\kappa^2} \psi = \kappa^2 \psi$$

Rešitve:

$$\psi(x) = e^{\kappa x} (x < 0)$$

$$\psi(x) = e^{\kappa(a-x)} (x > a)$$

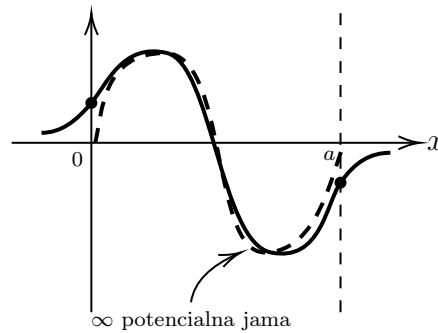
Zakaj je ta valovna funkcija za najnižje stanje? Ker je to sinusoida z najmanjšo ukrivljenostjo (najmanjši  $\frac{d^2}{dx^2}$  in najmanjša  $p, T$ ). Znotraj kakršnegakoli lonca mora stanje z najnižjo energijo ustrezati najnižji možni gibalni količini v kateri koli točki potenciala.

$$p^2 \propto E - V(x)$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} \propto (E - V(x)) \psi$$

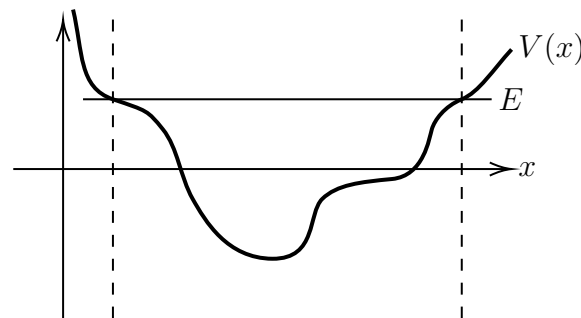
Oziroma celo osnovno stanje ima najnižjo možnost razmerja  $\frac{1}{4} \frac{d^2 \psi}{dx^2}$ . Torej stanje z najnižjo  $E$  ima po vsej širini jame konstanten  $p$ , in temu  $p$  pripada največja možna  $\lambda$  oziroma najmanjše možno  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ . Imamo sinusoido z najmanjšo možno ukrivljenostjo, gladko zlepljeno z  $\exp()$  na levi in desni strani. Kaj pa  $\psi(x) = \text{konst.}$  čez vso jamo? Ima ukrivljenost enako 0 kar je v redu, ampak tega ni mogoče gladko zlepliti z eksponentno funkcijo.

Kaj pa  $\psi(x) = 0$ ? To pa ni nič! Kaj pa prvo vzbujeno stanje? Spet imamo sinusoido, ki bo imela malo manj kot celo  $\lambda$  na  $[0, a]$ .



Lastne energije v končni jami so vse manjše od energij ustreznih stanj v neskončni jami, ker imamo vedno malo manjšo ukrivljenost, oziroma nekoliko odščipnjene sinusoido.

### 3.8.2 Poljubni potenciali $V(x)$



$\lambda$  ne moremo več smiselno definirati, lahko pa vseeno definiramo območja “znotraj” in “zunaj”, kjer je značaj Schrödingerjeve enačbe drugačen.

1. Znotraj ( $E > V(x)$ ):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad k = k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}$$

Ukrivljenost  $\psi$  je vedno proti osi  $x$ .

2. Zunaj ( $E < V(x)$ ):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi \quad \kappa = \kappa(x) = \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar}$$

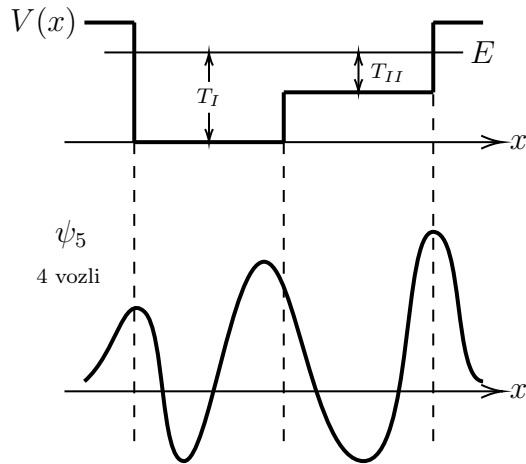
ukrivljenost vedno proč od osi  $x$ .

$N$ -to lastno energijsko stanje ima  $N - 1$  vozlvo (nodes). To velja za vse potenciale, ne le jame. V ozadju je Sturm-Liouvilleova teorija. Pazi!

$$N = n + 1 \quad \text{pri neskončni jami}$$

$$N = n \quad \text{pri LHO}$$

Vpliv globine/višine potenciala na amplitudo valovne funkcije:



V vsakem delu te stopničaste jame ima valovna funkcija obliko

$$\psi(x) = A \sin(kx + \Phi)$$

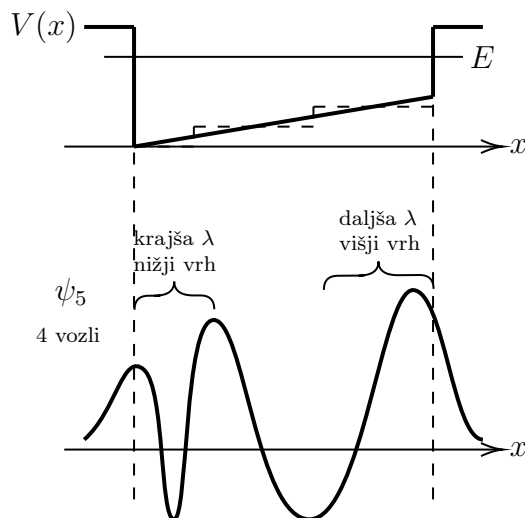
Strmina valovne funkcije je:

$$\frac{d\psi}{dx} \equiv m = kA \cos(kx + \Phi) \quad \text{oziroma} \quad A \cos(kx + \Phi) = \frac{m}{k}$$

Enačbi kvadriramo in seštejmo:

$$A = \sqrt{\psi^2 + \frac{m^2}{k^2}}$$

$\psi$  in  $\psi' = m$  sta povsod zvezna torej se  $\psi^2$  in  $m^2$  nikjer ne spremenita skokovito, edino  $k$  se spremeni, ko naletimo na spremembo v potencialu. Očitno je da  $k \uparrow \Rightarrow A \downarrow$  in obratno.



### 3.9 Odboj na potencialni stopnici

Prehod iz vezanih stanj k nevezanim.

1. težava: sunkovit skok lahko zgladimo (mrežica, kjer potencial ne skoči sunkovito).
2. težava: normalizacija valovne funkcije, če delamo z ravnimi valovi:

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad \text{ali} \quad e^{i(-kx - \omega t)}$$

To sta lastni stanji operatorja gibalne količine  $(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})$  z lastno vrednostjo  $\pm \hbar k$ . Iz tega smo naredili stoječe valovanje

$$\begin{aligned} e^{i(kx - \omega t)} + e^{i(-kx - \omega t)} &= 2 \cos kx e^{-i\omega t} \\ e^{i(kx - \omega t)} - e^{i(-kx - \omega t)} &= 2i \sin kx e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

To pa nista lastni stanji gibalne količine, ker sta superpozicij gibanj  $\rightarrow$  in  $\leftarrow$ . Vse te valovne funkcije so stacionarne rešitve Schrödingerjeve enačbe za prost delec z isto vrednostjo energije

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

Normalizacija:

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 dx = \int_a^b \rho(x) dx = \int_a^b dN = N$$

Kjer je  $N$  število delcev v žarku. Bolje:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \tilde{A} e^{ikx} \\ \Rightarrow \quad j &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) = \frac{|A|^2 \hbar k}{m} = \frac{|A|^2 p}{m} = |A|^2 v \end{aligned}$$

Kjer  $v$  navežemo na električni tok.

$$\begin{aligned} \text{Pri } x < 0 \quad \text{imamo} \quad k_1 &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \text{in kinetično energijo} \quad E &= \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \\ \text{Pri } x > 0 \quad \text{in kinetično energijo} \quad E - V_0 & \\ \text{zato} \quad k_2 &= \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \end{aligned}$$

Valovna funkcija pri  $x < 0$  je vsota vpadnega in odbitega vala:

$$\psi_1 = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

$A$  in  $B$  bomo normirali na električni tok. Pri  $x < 0$  pa imamo samo prepuščen val:

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$$

Zveznost  $\psi$  in  $\psi'$  pri  $x = 0$ :

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{oziroma} \quad \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \psi_1(0 - \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \psi_1(0 + \varepsilon)$$

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0)$$

Zveznost  $\psi$ :

$$A + B = C$$

Zveznost  $\psi'$ :

$$k_1A - k_1B = k_2C$$

Dobimo dve enačbi za tri neznanke, ampak  $A$  načeloma poznamo (električni tok). Rešitev je:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A$$

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A$$

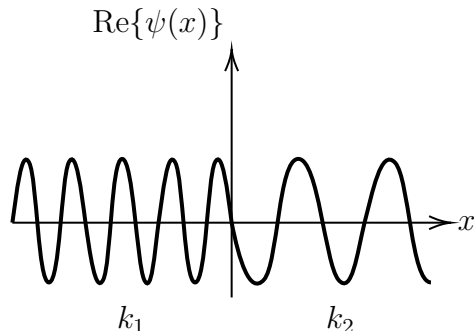
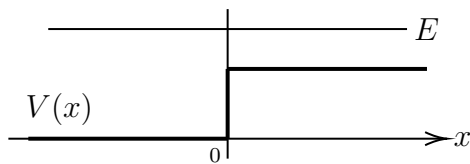
Odbojnost definiramo kot razmerje odbite in vpadne gostote toka

$$R = \frac{j_1}{j_2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \frac{k_1}{k_2} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

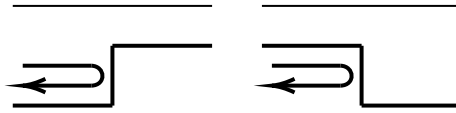
Enačaj velja saj sta velikosti hitrosti delcev  $\rightarrow$  in  $\leftarrow$  enaki. Prepustnost pa kot razmerje prepuščenega in vpadnega toka:

$$T = \frac{j_2}{j_0} = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Seveda  $R + T = 1$ .



čep rav  $E > V_0$ , imamo  $R \neq 0$ , pojem v nasprotju s klasično izkušnjo. Velikost  $R$  je odvisna od  $k_1 - k_2$  ampak ni važno, ali je  $k_1 > k_2$  ali  $k_2 > k_1$ , stopnica navzdol povzroči enako odbojnost kot stopnica navzgor!

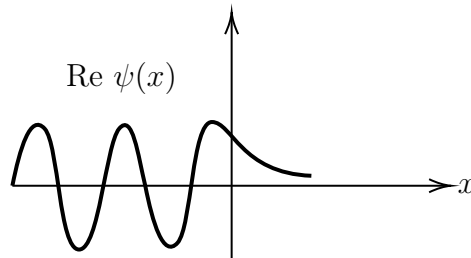
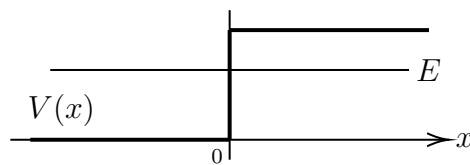


Kaj se zgodi, če je  $E < V_0$ ? Klasično pričakujemo, da se vse odbije. Kvantno:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mi(E - V_0)}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2mi(V_0 - E)}}{\hbar} = i\kappa \in \mathbb{C}$$

Torej je valovna funkcija na desni

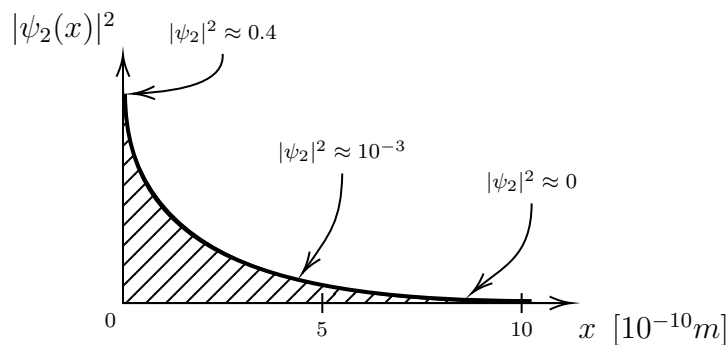
$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} = Ce^{-\kappa x}$$



“Val” prodre v klasično prepovedano območje, a se ves odbije. Verjetnostna gostota, da najdemo delec v (klasično) prepovedanem območju, kjer je njegova kinetična energija negativna (!!!) je različna od nič!

$$R = \left| \frac{k_1 - i\kappa}{k_1 + i\kappa} \right|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad T = 0$$

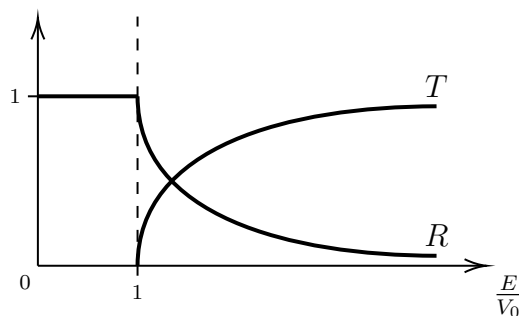
Imamo  $|\psi_2(x)|^2 = |C|^2 e^{-2\kappa x}$   $x > 0$ . Ali lahko pri  $x > 0$  res “vidimo” negativno kinetično energijo  $\propto (i\kappa)^2 < 0$ . Numerični zgled z  $V_0 = 2eV$ ,  $E = 0.1eV$ ,  $m = m_e$ , tako imamo  $\left| \frac{C}{A} \right|^2 \approx 0.4$



Če bi z merilnikom energije prišli tako blizu, bi lahko videli “ $T < 0$ ”, če ne bi bilo Heisenbergove neenakosti.

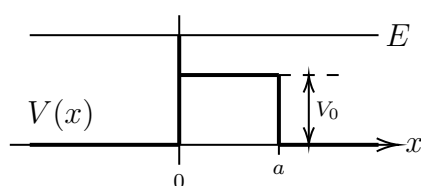
$$\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Povzetek znanja o potencialni stopnici:



### 3.10 Potencialna plast in tunelski pojav

ali tuneliranje



$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & , \quad x < 0 \\ \psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & , \quad 0 < x < a \\ \psi_3(x) = Fe^{ik_1x} & , \quad x > a \end{cases}$$

Gladko zlepimo  $\psi_1$  s  $\psi_2$  pri  $x = 0$  in  $\psi_2$  s  $\psi_3$  pri  $x = a$ :

$$\begin{aligned} \psi_1(0) = \psi_2(0) & \rightarrow A + B = C + D \\ \psi'_1(0) = \psi'_2(0) & \rightarrow k_1(A + B) = k_2(C + D) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) & \rightarrow Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} = Fe^{ik_1a} \\ \psi'_2(a) = \psi'_3(a) & \rightarrow k_2(Ce^{ik_2a} - De^{-ik_2a}) = k_1Fe^{ik_1a} \end{aligned} \quad ]$$



Iz teh štirih enačb za pet neznakov poiščemo samo razmerja  $\left|\frac{B}{A}\right|^2, \left|\frac{C}{A}\right|^2 \dots$

$$C = A \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1 - k_2)a}$$

$$D = A \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1 + k_2)a}$$

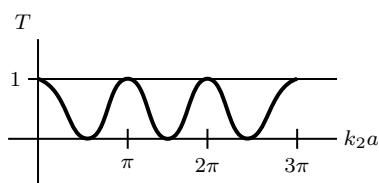
Iz prvih dveh pa  $F = k_1 k_2 a A$

$$B = k_1 k_2 a A$$

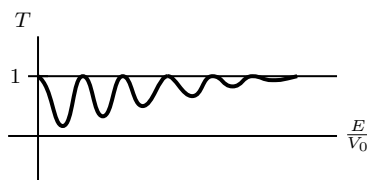
$$T = \frac{j_2}{j_0} = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left( 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2 k_2 a \right)^{-1}$$

$$R = 1 - T = \frac{j_1}{j_0} = \left| \frac{C}{A} \right|^2$$

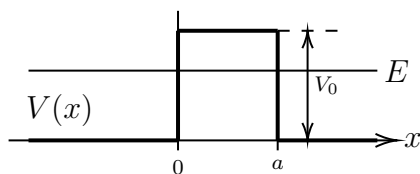
Zanimiva je zlasti odvisnost  $T$  od  $k_2 a$ : povsod, kjer je  $\sin k_2 a = 0$ , je  $T = 1$ , torej kadar  $k_2 a = n\pi$ . Ploščina plasti je enaka celemu mnogokratniku valovne dolžine delca.



Še z reskaliranjem abcise:



Za energijo tedaj velja  $E + V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ . Ramsauerjev pojav v žlahtnih plinih: v prvem približku so elektronski oblaki teh atomov preproste potencialne plasti skozi katere vpadni elektroni nemoteno švigajo. Ostane še možnost  $E < V_0$



Klasično bi se morali vsi delci odbiti. Kvantno postane  $k_2$  na  $0 < x < a$  imaginaren:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \equiv i\kappa$$

Valovna funkcija znotraj plasti je torej:

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$$

Desno od plasti ( $x > a$ ) pa imamo spet ravni val  $e^{ik_1x}$  z amplitudo:

$$F = \frac{2ik_1\kappa e^{ik_1x}}{2ik_1 \cosh \kappa a + (k_1^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a} A$$

Delci prehajajo skozi plast! Imamo tunelski pojav, tunneliranje. Prepustnost je  $T + \left|\frac{F}{A}\right|^2$ , in če je  $\kappa \approx 1$ , sta funkciji v imenovalcu  $T \cosh \kappa a \approx \sinh \kappa a \approx e^{\kappa a}$ . in dobimo

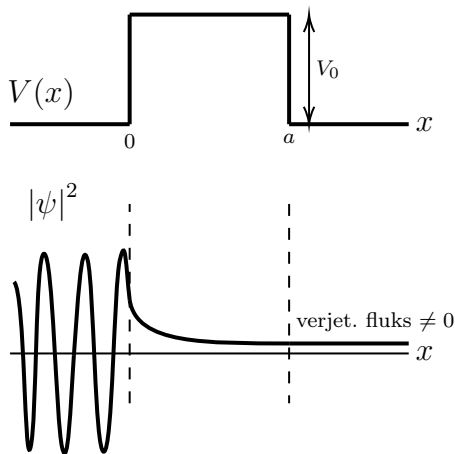
$$T \approx \frac{4k_1^2\kappa^2}{k_1 + \kappa^2} e^{\frac{-2a\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}}$$

Še lepši zapis:

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left( 1 + \frac{\sinh \kappa a}{4 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right)^{-1}$$

V limiti  $\kappa a \gg 1$ :

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



$$\begin{aligned} \psi(x) &= Fe^{ik_1x} \\ |\psi(x)|^2 &= |F|^2 \\ j &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \\ &= |F|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \end{aligned}$$

## 4 Kvantna mehanika v 3d

Naredim prehod v 3d:

- $\Psi(x, t) \rightarrow \Psi(x, y, z, t) = \Psi(\mathbf{r}, t)$
- $\psi(x) \rightarrow \psi(\mathbf{r})$
- $dx \rightarrow dV = dx dy dz = d^3\mathbf{r}$  ali pa  $r^2 dr \sin \theta d\Phi$
- Obvelja normalizacija  $\int \Psi^* \Psi dV = 1$
- Izračun pričakovani vrednosti:  $\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV$
- Imamo gibalno količino:  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \hat{\mathbf{r}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla$
- In kinetično energijo:  $\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{r}}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
- Izrazimo celotno energijo  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(\mathbf{r})$

Nestacionarna Schrödingerjeva enačba:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) &= i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) &= i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \end{aligned}$$

Stacionarna Schrödingerjeva enačba:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Stanje prostega delca z dobro določeno gibalno količino je 3d ravni val

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} = A e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$$

Lastne vrednosti komponent gibalne količine so po analogiji z 1d

$$p_\alpha = \hbar k_\alpha \quad \mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) \quad \alpha \in \{x, y, z\}$$

Ravni val je tudi lastno stanje operatorja energije, z lastno vrednostjo

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

## 4.1 Neskončna jama v 3d

Imamo kocko  $\infty$  visokimi "zidovi".

$$V(\mathbf{r}) \begin{cases} 0 & ; 0 < x, y, z < a \\ \infty & ; \text{ sicer} \end{cases}$$

Rešujemo SSE;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E\psi \quad \psi = \psi(x, y, z)$$

$$\text{Uganemo: } \psi(x, y, z) = A \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z$$

$$\text{Robni pogoji: } \psi(0, y, z) = \psi(x, 0, z) = \psi(x, y, 0) = 0$$

$\Rightarrow$  to nam da sinuse in "ubije" kosinuse

$$\psi(a, y, z) = \psi(x, a, z) = \psi(x, y, a) = 0$$

$$\Rightarrow k_\alpha = \frac{n_\alpha \pi}{a} \quad \alpha \in \{x, y, z\}$$

$$\Rightarrow E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Tu prvič srečamo degeneracijo, torej kadar imajo stanja z različnimi valovnimi funkcijami enako energijo. Naprimer funkcija z  $n_x = 2, n_y = n_z = 1$  opisuje delec z enako energijo kot  $n_x = 1, n_y = 2, n_z = 1$  in velja  $E_{211} = E_{121} = E_{112}$ . Degeneracija je vedno povezana s simetrijo fizikalnega sistema, v primeru neskončne potencialne jame so vse stranice enake  $a$ . Če porušimo (zlomimo) to simetrijo, degeneracija izgine  $a, a, a \rightarrow a, b, c$ :

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= A \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z \\ k_x &= \frac{n_x \pi}{a} \quad k_y = \frac{n_y \pi}{b} \quad k_z = \frac{n_z \pi}{c} \\ \Rightarrow E_{n_x n_y n_z} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \end{aligned}$$

Zgodi se tole:

$$\begin{array}{ll} E_{221} = E_{212} = E_{122} = 9E_1 & \text{=====} \\ \text{ko zlomimo simetrijo,} & \\ \text{degeneracijo odpravimo} & \\ E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6E_1 & \text{=====} \\ E_{111} = 6E_1 & \text{=====} \end{array}$$

## 4.2 Harmonski oscilator v 3d

Imamo potencial

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} k \mathbf{r}^2 = \frac{1}{2} k (x^2 + y^2 + z^2)$$

in SSE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2} k (x^2 + y^2 + z^2) \psi = E \psi$$

Imamo robni pogoj

$$\psi(x, y, z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$$

Rešitev iščemo kot produktno valovno funkcijo  $\psi(x, y, z) = u(x)v(y)w(z)$ :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left( vw \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + uw \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + uv \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2} k (x^2 + y^2 + z^2) uvw &= E uvw \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{u} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2} k x^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{v} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{1}{2} k y^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{w} \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{1}{2} k z^2 &= E \end{aligned}$$

Samo vsota treh 1d LHO, z

$$\begin{aligned} E &= \lambda_x + \lambda_y + \lambda_z \\ \lambda_\alpha &= \hbar\omega \left( n_\alpha + \frac{1}{2} \right) \\ \alpha &\in \{x, y, z\} \end{aligned}$$

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

Prav tako obstaja možnost degeneracije, dokler ne zlomimo simetrije  $\rightarrow \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ .

### 4.3 Nedoločenost in komutatorji operatorjev

Zanima nas povezava med produktom nedoločenosti dveh količin in komutatorjem ustreznih operatorjev, ki je definiran kot

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Oglejmo si primer

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x] \psi &= -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \right) \\ &= -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial x} \psi - x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = i\hbar \psi \end{aligned}$$

Ker je  $\psi$  poljubna, velja

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

Operator lege (kraja) in operator gibalne količine ne komutirata. Če operatorja ne komutirata, ne obstaja stanje, v katerem bi bili vrednosti obeh

količin ostro določeni: če bi takšno stanje obstajalo, recimo  $\psi_{AB}$ , bi namreč imeli:

$$\begin{aligned}
\hat{B} \cdot / \quad \hat{A}\psi_{AB} &= A\psi_{AB} \\
\hat{A} \cdot / \quad \hat{B}\psi_{AB} &= B\psi_{AB} \\
\hat{B}\hat{A}\psi_{AB} &= A\hat{B}\psi_{AB} = AB\psi_{AB} \\
\hat{A}\hat{B}\psi_{AB} &= B\hat{A}\psi_{AB} = AB\psi_{AB} \\
[\hat{A}, \hat{B}]\psi_{AB} &= (AB - BA)\psi_{AB} = 0 \\
\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}]\psi_{AB} &\neq 0, \quad \text{dobili pa smo } 0 \quad \Rightarrow \quad \nexists \psi_{AB}
\end{aligned}$$

Za primer  $\hat{A} = \hat{x}, \hat{B} = \hat{p}_x$  nam je to jasno

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0 \quad \text{ne komutirata} \quad \Leftrightarrow \delta x \delta p_x \neq 0 (\geq \frac{\hbar}{2})$$

Splošno:

$$\delta A \delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\delta \hat{A}, \delta \hat{B}] \rangle| = \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

**Primer:**

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{p}_x] &= i\hbar \quad \Rightarrow \quad \delta x \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \\
\text{pač pa } [\hat{x}, \hat{p}_y] &= 0 \quad \Rightarrow \quad \delta x \delta p_y = 0
\end{aligned}$$

Kar ni nič problematičnega

#### 4.4 Kvantizacija vrtilne količine

Klasično imamo:

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = (yp_z - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_z)$$

Kvantno pa želimo operator vrtilne količine, ki ga označimo z  $\hat{\mathbf{L}}$ .

$$\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z) = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Oglejmo si komutator

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y \\
&= -\hbar^2 \left[ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \\
&= -\hbar^2 \left[ y \frac{\partial}{\partial x} + yz \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} - xy \frac{\partial^2}{\partial z^2} + xz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \right. \\
&\quad \left. - zy \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + y \frac{\partial^2}{\partial z^2} - xz \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} - x \frac{\partial}{\partial y} \right] \\
&= i\hbar \left[ i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] = i\hbar \hat{L}_z
\end{aligned}$$

Analogno pokažemo za vse tri kombinacije, da velja

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y \end{aligned}$$

Komponente tirne vrtilne količine med seboj ne komutirajo. Torej ne obstaja stanje, ki bi bilo lastno stanje vseh treh hkrati. Izberemo lahko samo eno komponento in poiščemo njena lastna stanja in lastne vrednosti. Običajno  $L_z$ . Zanima nas še kvadrat vektorja vrtilne količine (velikost).

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Ali  $\hat{\mathbf{L}}^2$  komutira s posameznimi komponentami?

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \\ &= \hat{L}_x^3 + \hat{L}_y^2 \hat{L}_x + \hat{L}_z^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x^3 - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 \\ \hat{L}_z^2 \hat{L}_x &= \hat{L}_z \cdot \hat{L}_z \hat{L}_x = \hat{L}_z \cdot (\hat{L}_x \hat{L}_z + i\hbar \hat{L}_y) \\ &= \hat{L}_z \hat{L}_x \hat{L}_z + i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y \\ &= (\hat{L}_x \hat{L}_z + i\hbar \hat{L}_y) \hat{L}_z + i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y \\ &= \hat{L}_x \hat{L}_z^2 + i\hbar (\hat{L}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{L}_y) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}_y^2 &= \hat{L}_y^2 \hat{L}_x + i\hbar (\hat{L}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{L}_y) \\ &= \hat{L}_y^2 \hat{L}_x + \hat{L}_x \hat{L}_z^2 + i\hbar (\hat{L}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{L}_y) - \hat{L}_y^2 \hat{L}_x - i\hbar (\hat{L}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{L}_y) - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\alpha}] = 0 \quad \alpha \in \{x, y, z\}$$

Hkrati lahko poiščemo lastne vrednosti/stanja  $\hat{\mathbf{L}}^2$  in  $\hat{L}_z$  (običajna izbira).

#### 4.4.1 Rotator



Ko odstranimo gibanje težišča (translacijo) delamo le z rotacijo in upoštevamo reducirano maso  $\mu = \frac{mM}{m+M}$ . Orientacijo te točke podamo v krogelnih koordinatah s polarnim kotom  $\theta$  in azimutalnim kotom  $\phi$ . Stanje tega rotatorja opišemo s funkcijo  $\psi(\theta, \phi)$ , in zanimajo nas lastne funkcije operatorjev  $\hat{\mathbf{L}}^2$  in  $\hat{L}_z$ .

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Zelo dolgočasen račun:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
&= -i\hbar \left( r \sin \theta \sin \phi \cos \theta \underbrace{\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}}_{=\frac{\partial}{\partial z}} - r \cos \theta \underbrace{-i\hbar \left( -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)}_{=\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial y}} \right) \\
\hat{L}_y &= -i\hbar \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\
\hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}
\end{aligned}$$

Izražava kartezičnih koordinat s sferičnimi

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial r} \frac{\partial}{\partial z} = \sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial z}$$

in

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \theta} &= \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial z} \\
&= r \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} - r \sin \theta \frac{\partial}{\partial z}
\end{aligned}$$

Rezultate za  $\left( \frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$  lahko sestavimo v matriko

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \\ r \cos \theta \cos \phi & r \cos \theta \sin \varphi & -r \sin \theta \\ -r \sin \theta \sin \phi & r \sin \theta \cos \varphi & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Z inverzom kvadratne matrike dobimo izraze za  $\left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$ :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi & \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} & -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \\ \sin \theta \sin \phi & \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} & \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \\ \cos \theta & -\frac{\sin \theta}{r} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \end{bmatrix}$$

Zanima nas velikost:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Analogija s translacijo v 1d:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \Rightarrow [\hat{\phi}, \hat{L}_z] = i\hbar$$

Ne moremo hkrati ostro določiti  $\phi$  in  $L_z$ , produkt nedoločenosti je  $\delta\phi \cdot \delta L_z \geq \frac{\hbar}{2}$ . V lastnem stanju operatorja  $\hat{L}_z$  je  $\delta L_z = 0$  in je  $\phi$  popolnoma nedoločen, oziroma ničesar ne moremo povedati o  $L_x$  in  $L_y$ .



#### 4.4.2 Lastne funkcije in lastne vrednosti $\hat{L}_z$

$\hat{L}_z$  deluje samo na  $\phi$ , zato mora biti

$$\hat{L}_z \Phi(\phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Phi = L_z \Phi$$

Kjer je  $L_z$  lastna vrednost (brez strešice) oziroma eigenvalue in  $\Phi$  lastna funkcija (eigefunction). Ker  $\phi + 2\pi$  pomeni enako kot  $\phi$ , mora biti  $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ .

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad L_z = \hbar m \quad \text{za} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Kjer je  $m$  kvantno število  $z$  komponente vrtilne količine oziroma projekcije vrtilne količine na os  $z$ .  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$  je zato, da se izide  $\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi = 1$ .

#### 4.4.3 Lastne funkcije in lastne vrednosti $\hat{L}^2$

Očitno so povezane z rotacijsko energijo, kajti  $E_{rot} = \frac{\mathbf{r}^2}{2J} \rightarrow \frac{\mathbf{L}^2}{2J}$ . Označimo lastne funkcije z  $Y(\theta, \phi)$

$$-\hbar^2 \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) = \lambda Y$$

Kjer so  $\lambda$  lastne funkcije. Poskusimo z  $Y(\theta, \phi) = H(\theta)\Phi(\phi)$ . Pozabimo za hip na  $\hbar^2$ , enačbo množimo s  $\sin^2 \theta$  in delimo s  $H\Phi$

$$\frac{1}{H} \sin^2 \theta \frac{d^2 H}{d\theta^2} + \frac{1}{H} \sin \theta \cos \theta \frac{dH}{d\theta} - \lambda \sin^2 \theta = \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2}$$

Kjer imamo na levi samo funkcijo  $\theta$ . Vsaka stran posebej je enaka konstanti, recimo ji  $m^2$ , izbira je očitna ker od  $\phi$  odvisni del reši kar naš nastavek za rotator  $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$   $m \in \mathbb{Z}$ . Od  $\theta$  odvisen del je sitnejši, povemo samo rezultat:

$$\lambda = l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Veljati mora  $|m| \leq l$ . Za  $m = 0$  velja, da so lastne funkcije Legendreovi polinomi  $P_l(\cos \theta)$  (stopnje  $l$ , sodi za sode  $l$  in lihi za lihe  $l$ ). Za  $m \neq 0$  so lastne funkcije pridruženi Legendreovi polinomi  $P_l^m(\cos \theta)$

$$P_m^l(t) = (1-t^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dt^m} P_l(t)$$

Lastne funkcije operatorja  $\hat{\mathbf{L}}^2$  so torej

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = A_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad m \in \mathbb{Z}, |m| \leq l, l = 0, 1, 2, \dots$$

Kjer so  $Y_{lm}$  krogelne funkcije oziroma sferični harmoniki (spherical harmonics).  $m$  je kvantno število  $z$  komponente in  $l$  je kvantno število tirne

vrtilne količine. Ta oblika enačbe je vredna za radialno simetrični potencial. Funkcija je normalizirana

$$\int Y_{lm}^* Y_{lm} d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

Vrnemo  $\hbar^2$  in dobimo

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= \hbar^2 l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots \\ L_z &= \hbar m \quad |m| \leq l \end{aligned}$$

Nekaj prvih funkcij:

$$\begin{aligned} Y_{00}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad \text{izotropna} \\ Y_{10}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_{20}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{5}{8\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ Y_{2\pm 1}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_{2\pm 2}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Lastne vrednosti za kvadrat vrtilne količine so degenerirane. Vsakemu kvantnemu številu  $l$  ustreza  $2l + 1$  različnih vrednosti  $m$

$$\begin{aligned} |m| \leq l \quad l = 0 &\rightarrow m = 0 \\ l = 1 &\rightarrow m = 0, \pm 1 \\ l = 2 &\rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2 \end{aligned}$$

Pri danem  $l$  imajo vsa stanja  $\mathbf{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ . Sferične funkcije so med seboj ortogonalne

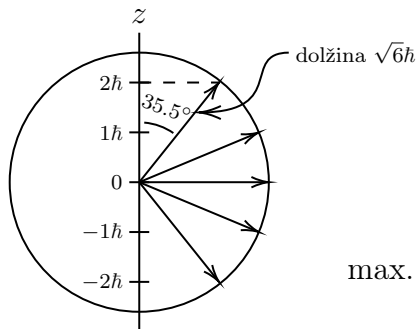
$$\int Y_{l'm'}^* Y_{lm} d\Omega = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

Spomni se na  $\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{lm}$ . Vsako funkcijo na krogli ( $r = 1$ ) lahko zapišemo kot linearno kombinacijo sferičnih harmonikov

$$f(\theta, \phi) = \sum_{lm} C_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Spomni se na  $\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$ ,  $Y_{lm}$  opisujejo stanje rotatorja, orientacijo ročke oziroma  $\mathbf{L}$  pri vrtenju ročke v prostoru.  $|Y_{lm}|^2$  pomeni verjetnostno gostoto, da je  $\mathbf{L}$  ročke usmerjena v okolico  $d\Omega$  kotov  $\theta$  in  $\phi$ .

## Zgled



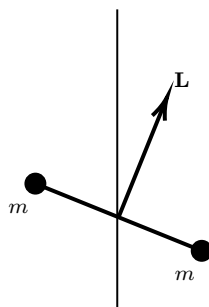
$$l = 2$$

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{\hbar^2 l(l+1)} = \sqrt{6}\hbar$$

$$L_z = m\hbar = 0\hbar, \pm 1\hbar, \pm 2\hbar$$

$$|m| \leq l, \text{ torej } m = 0, \pm 1, \pm 2$$

$$\begin{aligned} \text{max. projekcija} \quad \cos \theta &= \frac{L_z}{L} = \frac{2}{\sqrt{6}} \approx 0.816 \\ &\Rightarrow \theta \approx 35.5^\circ \end{aligned}$$



Edino kardar je vrtilna količina enaka nič ( $l = 0$ ) so vse tri komponente  $L_{xyz}$  ostro določene in enake nič, tedaj je krogelna funkcija konstantna,  $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$  torej ročka z enako verjetnostjo kaže v katero koli smer v prostor.

Rotacijska energija rotatorja (ročke) je

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2J} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J}$$

**Primer:** Dvoatomna molekula, naprimer  $H_2$ , kako se spreminjajo energijski razmiki med stanji v tem sistemu (zaradi rotacij)?

$$\Delta E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2J} (l(l+1) - (l-1)l) = \frac{\hbar^2}{J} l \propto l$$

Numerični zgled

$$\frac{\hbar^2}{2J} = \frac{\hbar^2}{ma^2} = \frac{\hbar^2 c^2}{mc^2 a^2} = \frac{(200 \text{ eV nm})^2}{10^9 \text{ eV } 10^{-2} \text{ nm}^2} \approx 2 \cdot 10^{-3}$$

Gre za prehode v daljnem IR področju ( $\lambda \approx 0.1 \text{ mm}$ ).

## 5 Enoelektronski atom

Predvsem bomo obravnavali  $H = p + e^-$ . Schrödinger (1926): nerelativističen opis se mu je posrečil. Obravnava  $H$  atoma je pomembna, saj je edini atomski sistem, ki dopušča eksaktno rešitev. Osnovni privzetki so

- en sam  $e^-$  v coulombnem potencialu jedra z nabojem  $+Ze_0$ .
- atom obravnavamo kot dvodelčni sistem (jedro z  $e^-$ ) z mirujočim težiščem. Ekvivalentno obravnavamo enodelčni sistem z reducirano maso

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$$

Kjer je  $m_e$  masa elektrona in  $M \geq m_e$  masa jedra. Praktično velja  $\mu \approx m_e$ , ampak te razlike se zavedamo, kajti meritve so (več kot) dovolj občutljive, da med tema ločijo.

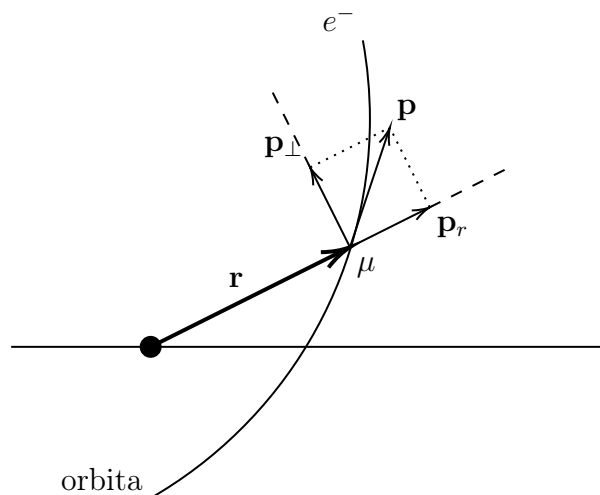
- potencialna energija sistema je

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad Z = 1 \text{ za } H \text{ atom}$$

Zdaj pa vrtilna količina. Ta se ohranja, ker imamo elektron v centralnem potencialu. Enako kot Zemlja-Luna, Sonce-Zemlja itd.

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \quad \text{tirna vrtilna količina}$$

kjer je  $\mathbf{p} = m \left( \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right)$ . Trajektorija  $e^-$  leži v ravnini, pravokotni na  $\mathbf{L}$



Imamo

$$p_r = \mu \frac{dr}{dt}$$

$$p_{\perp} = \mu r \frac{d\phi}{dt}$$

$$L = rp \sin \phi = rp_{\perp}$$

Kinetična energija elektrona:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} = \frac{\mathbf{p}_r^2 + \mathbf{p}_\perp^2}{2\mu} = \frac{\mathbf{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2}$$

Kvantno:

$$\hat{T} = \frac{1}{2\mu} (\hat{\mathbf{p}}_r^2 + \hat{\mathbf{p}}_\perp^2) = \frac{1}{2\mu} \left( \hat{\mathbf{p}}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \right)$$

Rešujemo torej stacionarno Schrödingerjevo enačbo v krogelnih koordinatah

$$\left( \frac{1}{2\mu} \left( \hat{\mathbf{p}}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

Poskusimo s produktnim nastavkom  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ .

$$\frac{1}{2\mu} \hat{\mathbf{p}}_r^2 R(r) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R(r) + \frac{1}{2\mu r^2} \frac{R(r)}{Y(\theta, \phi)} \hat{\mathbf{L}}^2 Y(\theta, \phi) = E R(r)$$

$Y(\theta, \phi)$  nastopa le v zadnjem členu na levi in je očitno konstanta, če vse skupaj velja za poljuben  $r$ , dobimo  $Y = Y_{lm}(\theta, \phi)$ , kajti:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$\hat{\mathbf{p}}_r^2 = (-i\hbar\Delta)^2$  potrebujemo v sferičnih koordinatah.

$$\Delta^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} \frac{\partial f}{\partial r}$$

kjer je  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{x^2}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3} \frac{\partial f}{\partial r} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} &= \frac{y^2}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{y^2}{r^3} \frac{\partial f}{\partial r} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} &= \frac{z^2}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{z^2}{r^3} \frac{\partial f}{\partial r} \end{aligned} \right\} \Delta^2 f(r) = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rf)$$

Torej za  $R(r)$  dobimo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left( V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) R = ER$$

Kjer je  $V(r) < 0$  običajno potencialna energija in  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} > 0$  videti kot klasična centrifugalna potencialna energijam v resnici pa izvira iz pravokotnega gibanja na  $\mathbf{r}$  (to je kinetična energija!). Najprej poskusimo najti sferično simetrično rešitev

$$l = 0, m = 0 \left( Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( R'' + \frac{2}{r} R' \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R = ER$$

Hočemo  $\lim_{r \rightarrow \infty} R(r) = 0$  zaradi normalizabilnosti, zato poskusimo kar

$$R(r) = Ae^{-\frac{r}{a}}$$

kjer  $a$  postavi radialno skalo v problemu  $H$ -atoma. Vstavimo v prvotno enačbo

$$\begin{aligned} R' &= -\frac{A}{a} e^{-\frac{r}{a}} = -\frac{R}{a} \\ R'' &= \frac{A}{a^2} e^{-\frac{r}{a}} = \frac{R}{a^2} \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{1}{a^2} - \frac{2}{ar} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} &= E \end{aligned}$$

To velja za vse  $r$ , če je koeficient pred  $\frac{1}{r}$  enak nič

$$\frac{\hbar^2}{\mu a} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} = 0$$

Od tu dobimo

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Ze^2 \mu} \equiv \frac{m_e}{\mu} \frac{r_B}{Z}$$

Kjer je  $r_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 \mu} \approx 0.0529 nm$  Bohrov radij. Faktor  $\frac{m_e}{\mu}$  je praktično 1. Lastna energija je

$$E = -\frac{\mu}{m_e} Z^2 \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{m_e}{2\hbar^2}$$

Kompaktna verzija:

$$E = -\frac{\mu}{m_e} Z^2 E_0 \quad E_0 = \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{m_e}{2\hbar^2}$$

Kjer je  $E_0$  Ryderbergova energija ( $13.6 eV$ ). To pa postavi skalo na energijsko lestvico (v spektru). Zdaj pa še neizotropne rešitve ( $l \neq 0$ ).

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{d^2}{dr^2} (rR) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1)R = ER$$

Reskaliramo

$$\begin{aligned} r &= a\rho \\ E &= -\frac{\mu}{m_e} Z^2 E_0 \eta \end{aligned}$$

Kjer je  $\rho$  brezdimenzijski radij in  $\eta$  brezdimenzijska energija. Dobimo

$$\frac{d^2}{d\rho^2} (\rho R) + 2R - \frac{l(l+1)}{\rho} R = \eta \rho R$$

Poskusimo

$$R(\rho) = \frac{F(\rho)}{\rho} e^{-\sqrt{\eta}\rho}$$

Dobimo

$$F'' - 2\sqrt{\eta}F' + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)F = 0$$

Od prej za stanje z  $l = 0$  vemo  $R(\rho) = Ae^{-\rho}$  kar pomeni  $F(\rho) = A\rho$  in  $\sqrt{\eta} = 1$ . Pri  $l = 0$  imamo preprosto  $F'' - 2\sqrt{\eta}F' + \frac{2}{\rho}F = 0$ . Če je  $F$  polinom spremenljivke  $\rho$ , je tole rešljivo samo če  $\sqrt{\eta} = \frac{1}{n}, n \in \mathcal{N}$ .

$$E_{n00} = -\frac{\mu}{m_e} Z^2 \frac{E_0}{n^2}$$

Za  $H$ -atom v približku velja  $E_n = -\frac{E_0}{n^2}$ , natanko tako kot v Bohrovem modelu. Ustrezna valovna funkcija za  $n, l = m = 0$

$$Y_{n00}(\mathbf{r}, t) = R_{n0}(r)Y_{00}(\theta, \phi)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad R_{n0} = \frac{F(\rho)}{\rho} e^{-\frac{\rho}{n}}$$

Tudi v primeru  $l \neq 0$  ugotovimo

$$E_{nl} = -\frac{\mu}{m_e} Z^2 \frac{E_0}{n^2} \quad \forall l$$

$n$  je glavno kvantno število (principal quantum number).

$$\begin{aligned} n = 1, l = 0 : \quad R_{10} &= \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-\rho} \\ n = 2, l = 0 : \quad R_{20} &= \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\frac{\rho}{2}} \\ n = 2, l = 1 : \quad R_{21} &= \frac{1}{2\sqrt{6a^3}} \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Vse so normirane

$$\int_0^\infty (R_{nl})^2 r^2 dr = 1$$

Kjer je  $\rho = \frac{r}{a}$  in  $a \approx r_B$  za  $H$ -atom ( $a = \frac{\mu}{m_e} \frac{r_B}{Z}$ ). Celotna valovna funkcija za  $H$ -atom ima obliko

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}, t) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

Normalizacija

$$\iiint |\Psi|^2 dV = \int R_{nl}^2(r)r^2 dr \iint |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta d\phi = 1$$

Ortogonalnost

$$\iiint \psi_{n'l'm'}^* \psi_{nlm} dV = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\int R_{n'l'}(r) R_{nl}(r) r^2 dr = \delta_{nn'}$$

Nismo utemeljevali, ampak iz konstrukcije diferencialne enačbe za  $F(\rho)$  lahko pokažemo, da morajo rešitve zadoščati

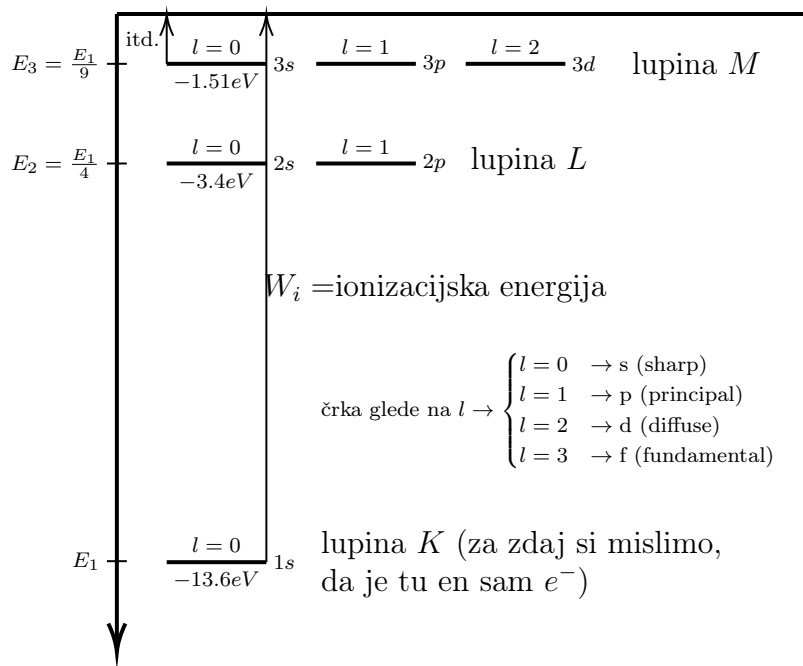
$$0 \leq l \leq n-1 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

in

$$|m| \leq l$$

Degeneracija pri danem  $n$  je

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$





To bo prišlo prav kasneje, nekaj pričakovanih vrednosti

$$\begin{aligned}\langle r \rangle &= \iiint |\psi_{nlm}|^2 r \cdot r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \int R_{nl}^2(r) r^3 dr = an^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right) \\ \text{kotni del je že sam zase normiran} \quad \iint |Y_{lm}|^2 d\Omega &= 1\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle r \rangle &= \frac{3}{2} r_B \quad \text{za } H\text{-atom v osnovnem stanju } (n=1, l=0) \\ \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle &= \frac{1}{an^2} \quad \frac{1}{r^2} = \frac{2}{a^2 n^3 (2l+1)} \quad \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2}{a^3 n^3 l(l+1)(2l+1)} \\ \langle V \rangle &= -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 an^2} = -Z^2 \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2 n^2}\end{aligned}$$

Spomnino se

$$\langle E \rangle = -\frac{\mu}{m_e} \frac{Z^2}{n^2} E_0 = -\frac{Z^2}{2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2 n^2}$$

Torej

$$\langle T \rangle = \langle E \rangle - \langle V \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle = -\langle E \rangle \quad \text{virialni teorem}$$

## 5.1 Sevalni spekter vodika

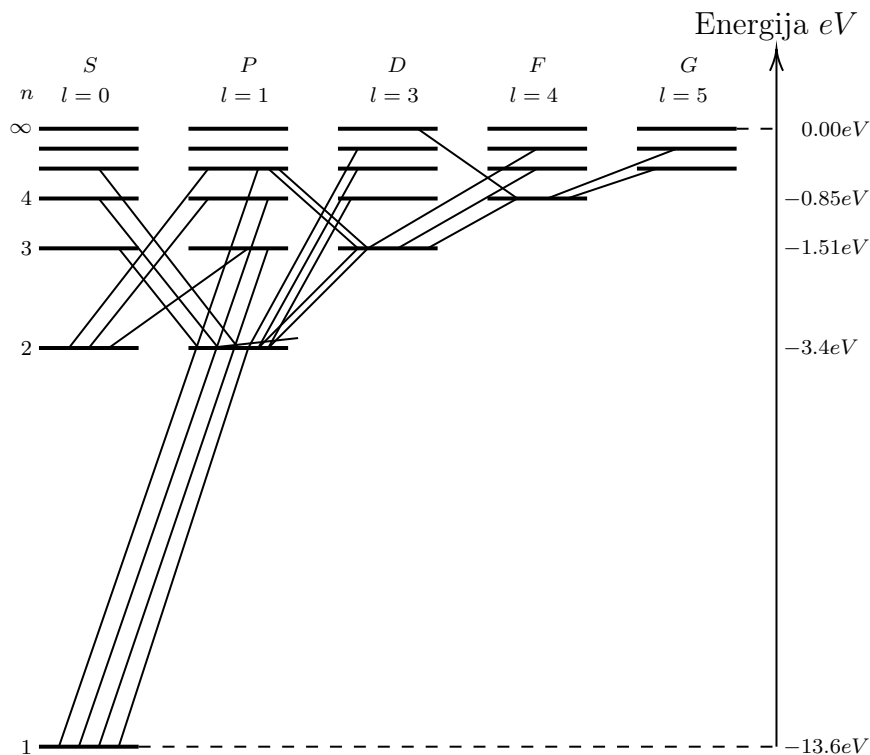
Ena od eksperimentalnih potrditev lastnih energij (nivojske sheme) oziroma ionizacijskih energij.

$$\begin{aligned}H - \text{atom} : 13.6 \text{ eV} \quad He^+ (Z=2, W_i = 4E_0 = 54.4 \text{ eV}) \\ Li^+ (Z=3, W_i = 9E_0 = 122.4 \text{ eV}) \\ Be^+ (Z=4, W_i = 16E_0 = 217.7 \text{ eV})\end{aligned}$$

Mnogo natančneje to ugotavljamo z meritvijo sevalnih prehodov.  $e^-$  preide iz višjega vzbujenega stanja v nižje (lahko tudi osnovno) in odvečno energijo odda v obliki fotona.

$$\begin{aligned}\frac{hc}{\lambda} &= E_{n'} - E_n = E_0 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \\ \frac{1}{\lambda} &= \frac{E_0}{hc} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) = Ry \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)\end{aligned}$$

Kjer je  $Ry = 10977576 m^{-1}$  Ryderbergova konstanta. Velja za točen račun ( $\mu \neq m_e$ ) sicer je treba vzeti  $Ry_\infty = 10973731.513 m^{-1}$ .



Iz slike vidimo, da je vedno  $\Delta l = \pm 1$ . To je t.i. izbirno pravilo (selection rule), poleg tega velja še  $\Delta m = 0, \pm 1$ . Za  $n$  ni izbirnega pravila. K temu se bomo še vrnili v razpravi o sevanju.

## 5.2 Tirni magnetni moment

Slika atoma v magnetnem polju je sicer nerelativistična, a bodo potrebni relativistični popravki. Tirna vrtilna količina ne bo zadoščala za opis pojavov v magnetnem polju, potreben bo spin. Zanima nas tirni magnetni moment (orbital magnetic moment). Imamo “tokovno zanko”:

$$\mu = IS$$

Naboj  $e^-$  je razmazan po  $2\pi r$ , torej je linearna gostota naboja enaka  $-\frac{|e|}{2\pi r}$ . Tok je tako

$$\mu = \frac{|e|v}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{|e|m_e v r}{2m_e} = \frac{|e|\Gamma}{2m_e}$$

Oziroma vektorsko

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\Gamma}$$

Kvantno pomeni  $\boldsymbol{\Gamma} \rightarrow \hat{\mathbf{L}}$ , torej operator magnetnega dipolnega momenta postane

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \hat{\mathbf{L}} = -\frac{1}{\hbar} \mu_B \hat{\mathbf{L}}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 2.27 \cdot 10^{-24} \left[ \frac{J}{T} = Am^2 \right] = 5.79 \cdot 10^{-5} \frac{eV}{T}$$

Za bodoče potrebe rajši napišimo takole

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{1}{\hbar} g_l \mu_B \hat{\mathbf{L}}$$

$$\hat{\mu}_z = -\frac{1}{\hbar} g_l \mu_B \hat{L}_z$$

Kjer je  $g_l = 1$  giromagnetno razmerje ali preprosto “g-faktor”. Velikosti

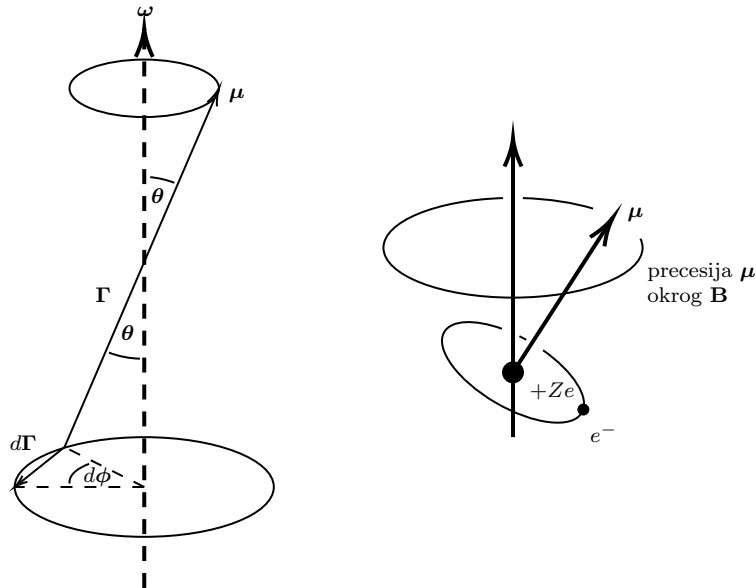
$$\langle \hat{\mathbf{L}}^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1) \Rightarrow \langle \mu \rangle = \langle \|\boldsymbol{\mu}\| \rangle = g_l \sqrt{l(l+1)} \mu_B$$

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \hbar m \Rightarrow \langle \mu_z \rangle = g_l m_l \mu_B, \quad |m_l| \leq l$$

Magnetizem “pride” od tirne vrtilne količine  $e^-$  v atomih. Kaj se zgodi, ko damo  $\boldsymbol{\mu}$  v magnetno polje? Klasično imamo

$$d\boldsymbol{\Gamma} = \mathbf{M} dt \quad \text{kjer je} \quad \mathbf{M} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$$

$$\frac{d\boldsymbol{\Gamma}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} = -\frac{e}{2m_e} \boldsymbol{\Gamma} \times \mathbf{B} = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\Gamma}$$



Iz klasične fizike imamo precesijo magnetnega momenta ( $\boldsymbol{\Gamma}$ ) okrog osi  $\boldsymbol{\omega}$  z Larmorjevo frekvenco

$$\nu_L = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{eB}{4\pi m_e}$$

Energija tega magnetnega momenta v magnetnem polju je

$$E_{mag} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B$$

Tudi kvantno

$$\hat{H}_{mag} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \mathbf{B} = -\hat{\mu}_z B = \frac{\mu_B B}{\hbar} \hat{L}_z$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{H}_{mag}$$

Lastna stanja  $\hat{H}$  pri  $B = 0$  so  $\psi_{nlm_l}$  so že lastna stanja  $\hat{L}_z$

$$E_{mag} = m_l g_l \mu_B B$$

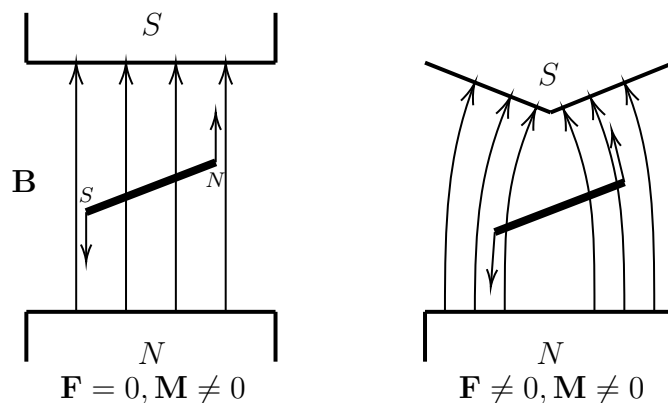
Magnetno polje delno odpravi degeneracijo, kajti lastne energije so zdaj odvisne ne le od  $n$  ampak tudi od  $m_l$

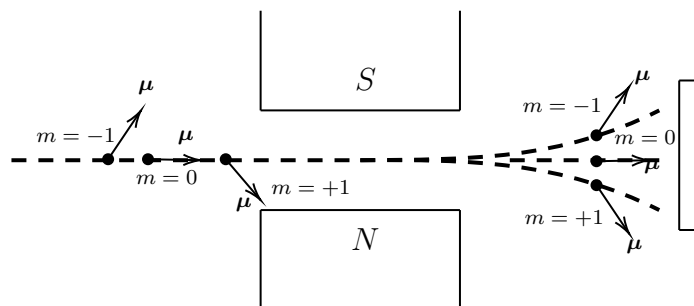
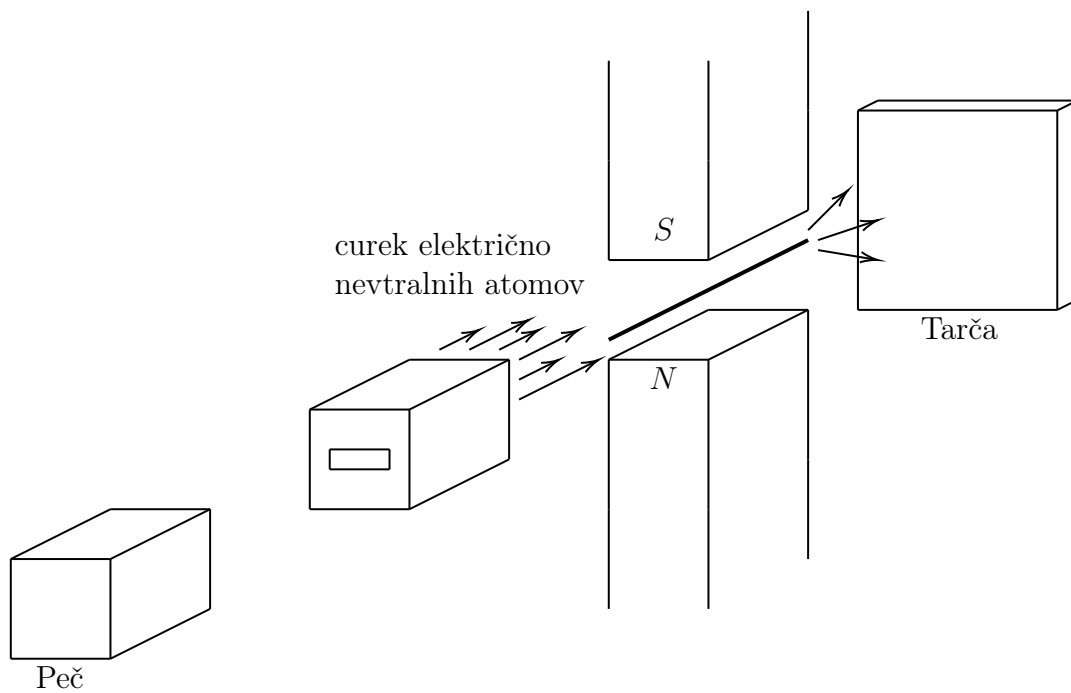
$$E_{nm_l} = -\frac{E_0}{n^2} + m_l g_l \mu_B B$$

V zunanjem magnetnem polju se prej degenerirana stanja (energijski nivoji) razcepijo (Zeemanov pojav). Razcepi se na  $0 \leq l \leq n-1$ , kjer  $m_l$  ima  $2l+1$  možnih vrednosti. Pričakujemo  $2(n-1)+1$  nivojev, pri  $n=1$  pa bi pričakovali, da se nič ne razcepi.

### 5.3 Spin elektrona

Stern, Gerlach (1922) sta pokazala, da se tudi osnovno stanje vodika ( $n=1$ ,  $l=0$ ) razcepi na dve. Najprej sta naredila s srebrnimi atomi ( $Ag$ ).





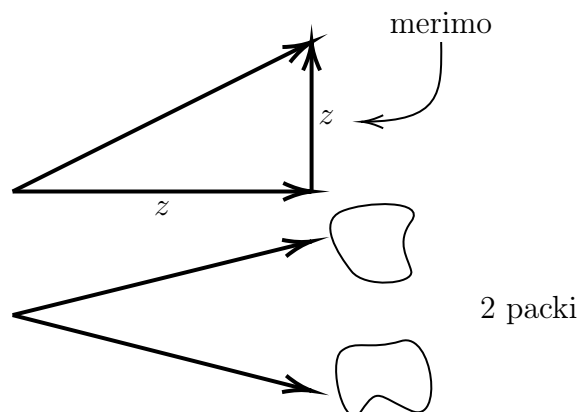
Atomi iz pečice s temperaturo  $T$

$$\frac{1}{2}Mv^2 = \frac{3}{2}k_B T$$

Kjer je  $M$  masa atoma ( $\approx$  masa jedra).  $y$  je razdalja, ki jo atom preleti skozi magnet, dobimo odmik na zaslonu

$$z = \frac{1}{2}at^2 = \frac{1}{2} \frac{F_z}{M} t^2 = \frac{1}{2M} \mu_z \frac{\partial B}{\partial z} \frac{y^2}{v^2}$$

Poznala sta vse količine razen  $\mu_z$ ,  $z$  pa sta merila  $\mu_z \approx \pm \mu_B$ .



To ni moglo ustrezati tirnemu magnetnemu momentu in ne tirni vrtilni količini. Torej obstaja še neka druga vrtilna količina, spinska (spinski magnetni moment). Doslej smo shajali le z tirno vrtilno količino

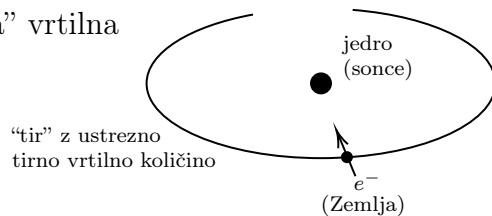
$$\langle \hat{L}^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1) \quad \langle L_z \rangle = m_l \hbar \quad |m_l| \leq l$$

Zdaj imamo še spinsko vrtilno količino

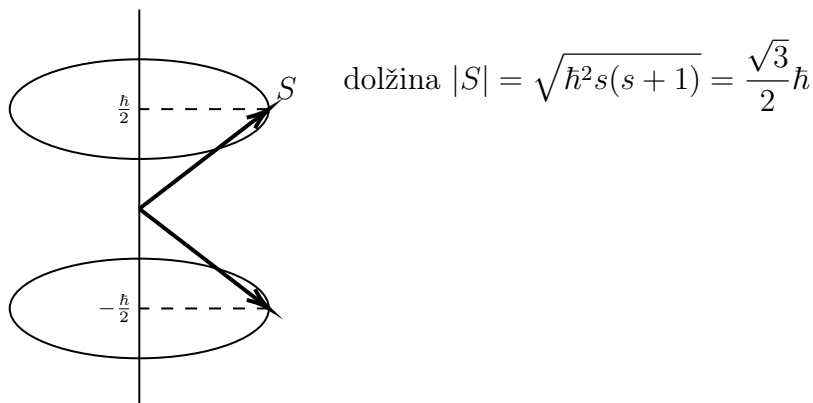
$$\langle S^2 \rangle = \hbar^2 s(s+1) \quad s = \frac{1}{2} \quad \text{in nič drugega}$$

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

spin kot "lastna" vrtilna količina?



Še enkrat: imamo  $2s + 1 = 2$  projekciji (dva delna curka po izstopu iz  $\frac{\partial B}{\partial z}$ ). Spin  $e^-$  ni celoštevilski ( $s = \frac{1}{2}$ ).



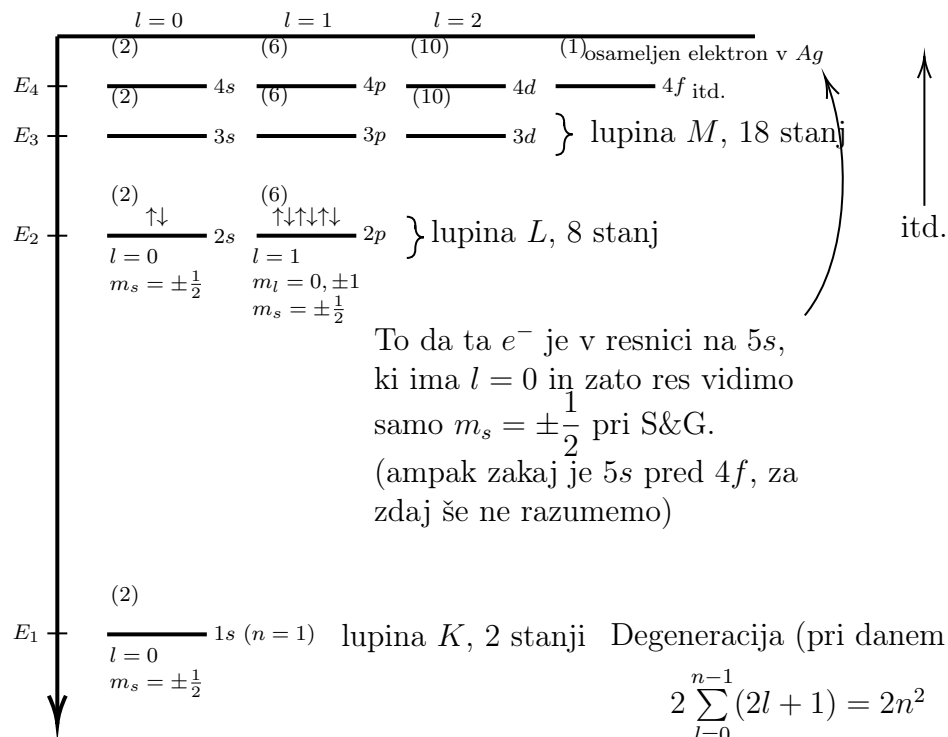
Celotna valovna funkcija vodikovega atoma po novem spoznanju

$$\Psi_{nlm_l m_s}(\mathbf{r}, t) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \chi_{m_s} e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$$

Kjer je  $\chi_{m_s}$  lastna funkcija operatorja spina in je samo “ $\uparrow$ ” ali “ $\downarrow$ ”.

$$\hat{S}^2 \chi_{m_s} = \hbar^2 s(s+1) \chi_{m_s} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{m_s}$$

$$\hat{S}_z \chi_{m_s} = m_s \chi_{m_s} = \pm \frac{1}{2} \chi_{m_s}$$



Zakaj sta S&G vzela ravno Ag atome ( $Z = 47$ )  $\Rightarrow Z e_0$  jedro,  $Z$  elektronov

Nauk Stern-Garlachovega poskusa: poleg  $\mathbf{L}$  obstaja tudi  $\mathbf{S}$ , ki je prav tako kvantizirana, in tako  $\mathbf{L}$  kot tudi  $\mathbf{S}$  pripadajo edinstveni magnetizacijski momenti z ustreznimi  $g$ -faktorji.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_l &= -g_l \mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar} & g_l &= 1 \\ \boldsymbol{\mu}_s &= -g_s \mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar} & g_s &= 2 \end{aligned}$$

Kjer je  $g_s$  spinsko giromagnetno razmerje (spinski  $g$ -faktor). O tem, da je  $g_s = 2$ , nam nič ne pove ne klasična mehanika in ne nerelativistična kvantna mehanika. Šele relativistična kvantna mehanika (Diracova enačba)

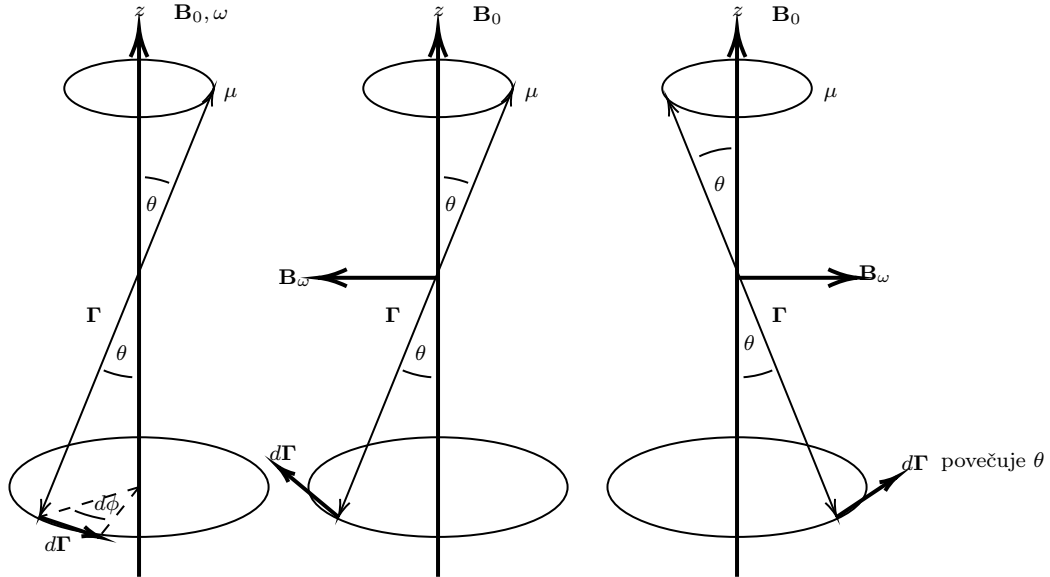
nam dejansko napove  $g_s = 2$  za elektron. To moramo verjeti, a obenem vemo

$$\frac{\mu_e}{\mu_B} - 1 = \frac{g_s - 2}{2} = 0.00115965218091 \pm 0.00000000000026 \quad \text{PDG 2018}$$

i.e. magnetni moment elektrona je določen tako natančno. Dejstvo, da to eksperimentalno in teoretično določimo na  $\approx 12$  decimal, je eden od velikih triumfov moderne fizike. Od tu sledi teorija kvantne elektrodinamike (QED). Težave pa bo povzročalo ravno to, da je  $g_l = 1$  in  $g_s = 2$ :

$$\boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s = -(g_l \mathbf{L} + g_s \mathbf{S}) \frac{\mu_B}{\hbar} = -(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \frac{\mu_B}{\hbar}$$

## 5.4 Magnetna resonanca - seminar



$$d\Gamma = \mathbf{M} dt \quad \mathbf{M} = \mu \times \mathbf{B}_\omega$$

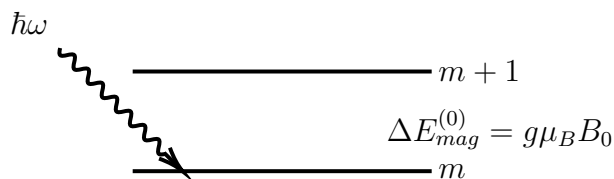
$\mathbf{B}_0$  je statično zunanje magnetno polje (čim bolj homogeno). Larmorjeva precesijska frekvenca je  $\omega_0 = \frac{eB_0}{2m_e}$ . Velja

$$E_{mag}^{(0)} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_0$$

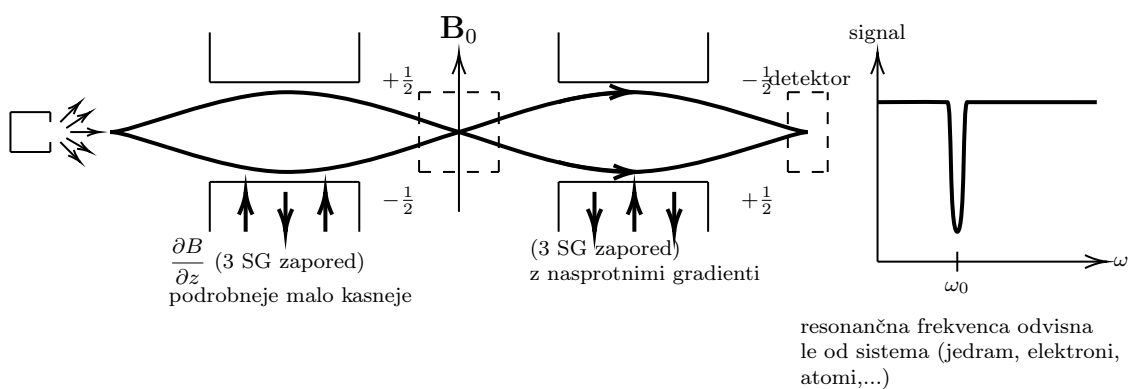
Kaj bi se zgodilo, če na  $\mathbf{B}_0$  superpoziramo še časovno spremenljivo polje  $\mathbf{B}_\omega$  in sicer pravokotno nanj. Če bo  $\omega$  primerno izbrana (v bližini  $\omega_0$ ) lahko spremenimo smer  $\boldsymbol{\mu}$  z dovajanjem ustrezne energije

$$\hbar\omega = \Delta E_{mag}^{(0)} = g \frac{e\hbar}{2m_e} B_0 = gh\omega_0$$



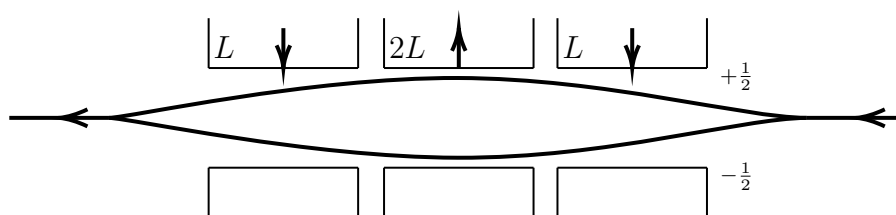


Ko s  $\hbar\omega$  to;no ulovimo razliko  $\Delta E_{mag}^{(0)}$ , dobimo resonanco in preskočimo v višje magnetno stanje. Zančilni razmiki so  $\Delta E_{mag}^{(0)} \approx 10^{-4}$  kar pomeni, da je  $B_\omega$  v področju  $GHz$  (mikrovalovi), tipično  $B_0 \approx 1T$ . Če natančno poznamo  $B_0$  lahko merimo  $g$ . Če delamo to z  $e^-$  (ne z jedri), točno poznamo  $g_s$ , in če merimo resonančno frekvenco,  $\omega \approx \omega_0$ , lahko določimo  $B_0$ . To kemiki uporabljajo za meritev lokalnih polj v molekulah. Tipična meritev:

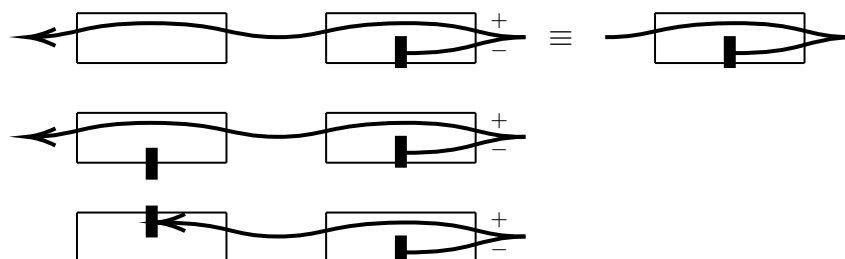


MRI oziroma NMR (magnetic resonance imaging, nuclear magnetic resonance) če delamo z  $e^-$ : ESR (elektronska spinska resonanca).

## 5.5 Miselni poskus s spinom $\frac{1}{2}$ (gedankenexperimente)



Polarizator (oziroma filter):



V vseh teh S&G je kvantizacijska os ista ( $z$ ).

Opisujemo to dogajanje z verjetnostnimi amplitudami:

$$\chi(d, p)$$

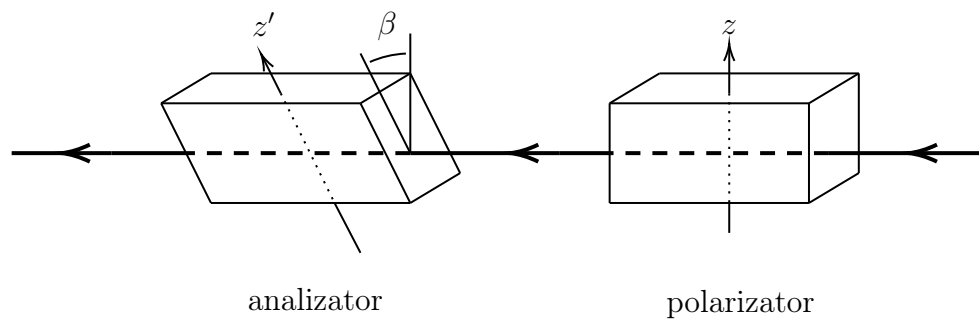
Kjer sta  $d$  detektirano (detected) in  $p$  pripravljeno (prepared) stanje, pošiljamo v SG. Verjetnost za detekcijo je  $|\chi(d, p)|^2$ . Sliki b) in c)

$$\begin{aligned} p = \pm z \quad d = \pm z \\ |\chi(+z, +z)|^2 = 1 \\ |\chi(-z, +z)|^2 = 0 \end{aligned}$$

Podobno (zrcalna slika)

$$\begin{aligned} |\chi(+z, -z)|^2 = 0 \\ |\chi(-z, -z)|^2 = 1 \end{aligned}$$

Kaj pa, če analizator (drugi SG) zasukamo glede na polarizator (prvi SG):



$\beta$  je zasuk analizatorjeve kvantizacijske osi glede na polarizatorjevo. Ko je  $\beta \neq 0$ , dobimo dve kvantizacijski osi (odlikovani smeri) in pričakujemo

$$\begin{aligned} |\chi(+z', +z)|^2 \neq 1 \\ |\chi(-z', +z)|^2 \neq 0 \end{aligned}$$

zato ker  $\pm$  vedno specificirajo projekcije  $m_s$  glede na lokalno os. Spin je vedno kvantiziran (samo “gor” ali “dol”), važno je le to, ob kateri osi to “pogledamo” in ker imamo vselej samo dve možnosti (in pričakujemo ohranitev verjetnosti).

$$\begin{aligned} |\chi(+z', +z)|^2 + |\chi(-z', +z)|^2 = 1 \\ |\chi(+z', -z)|^2 + |\chi(-z', -z)|^2 = 1 \end{aligned}$$

Zaradi periodičnosti v  $\beta$  ne ostane drugega kot

$$\begin{aligned} |\chi(+z', +z)|^2 = |\chi(-z', -z)|^2 = \cos^2 \frac{\beta}{2} \\ |\chi(-z', +z)|^2 = |\chi(+z', -z)|^2 = \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{aligned}$$

**Zgled**

a  $Z'$  zasukamo za  $180^\circ$  glede na  $Z$ , polarizator pripravi atome v stanju s spinom “dol” vzdolž  $Z$ . Torej

$$|\chi(-z', -z)|^2 = \cos^2 \frac{\pi}{2} = 0 \quad |\chi(+z', -z)|^2 = \sin^2 \frac{\pi}{2} = 0$$

b  $Z'$  zasukamo za  $90^\circ$  glede na  $Z$ , polarizator pripravi atome s spinom “gor” v  $Z$

$$|\chi(+z', +z)|^2 = \cos^2 \frac{\pi}{4} = \frac{1}{2} \quad |\chi(-z', +z)|^2 = \sin^2 \frac{\pi}{4} = \frac{1}{2}$$

## 5.6 Seštevanje vrtilnih količin

Enoelektronski atom ima dve vrsti vrtilnih količin, eno, ki vključuje orbitalno gibanje (“kroženje”) in elektronski spin (spinska vrtilna količina). Vsaki ustreza svoj magnetni moment in svoja interakcija z magnetnim poljem. Stern-Garlach: ugodno  $l = 0$ , da vidimo samo efekt spina  $s = \frac{1}{2}$ . Splošnejše rezultate dobimo, če znamo sešteti  $\mathbf{L}$  in  $\mathbf{S}$ :

$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  celotna vrtilna količina (total angular momentum)

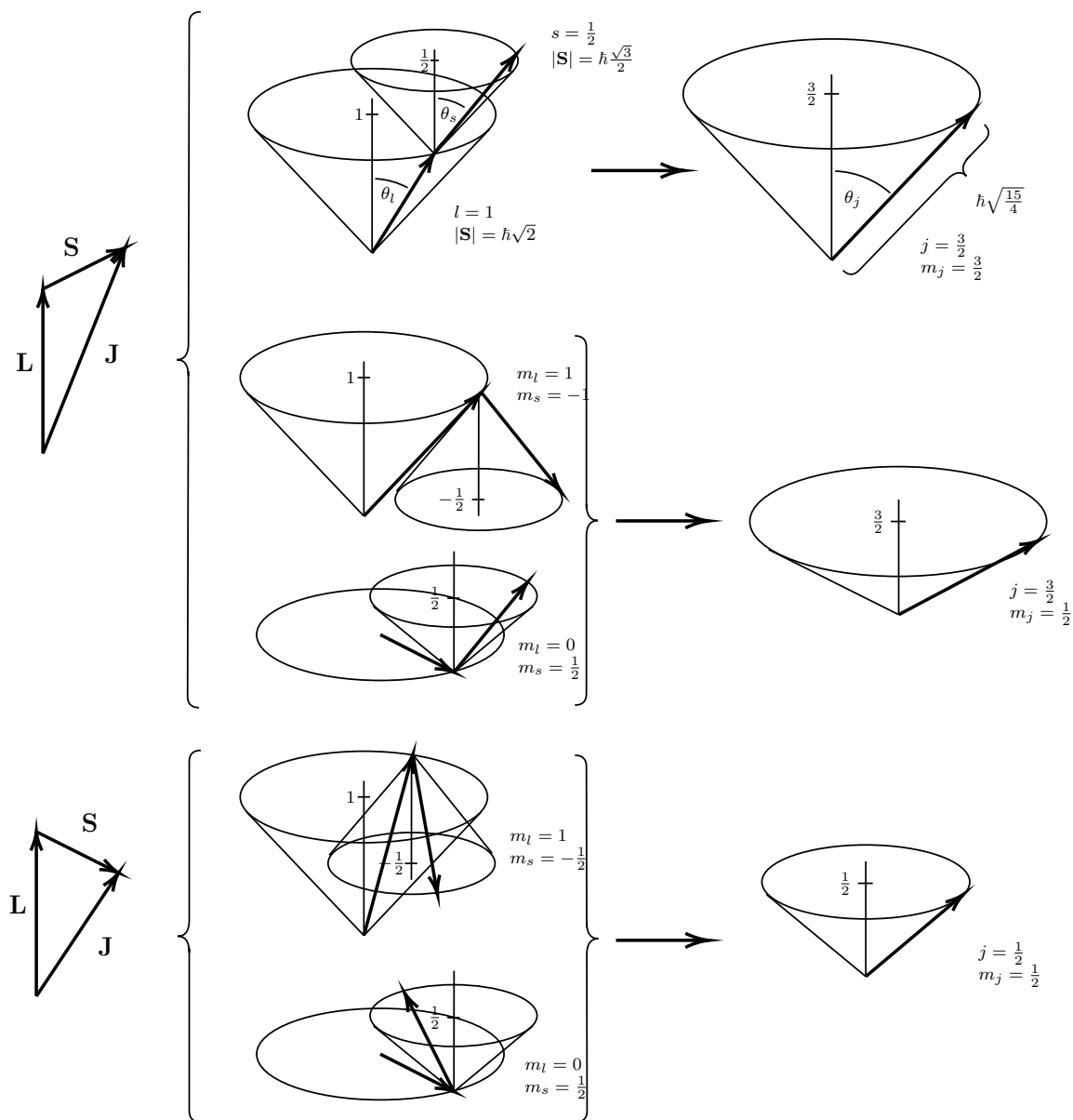
Seštevanje vektorjev  $||\mathbf{L}| - |\mathbf{S}|| \leq |\mathbf{J}| \leq |\mathbf{L}| + |\mathbf{S}|$ . Tudi za  $\mathbf{J}$  bi radi imeli kvantizirane vrednosti in ustrezna kvantna števila, tako da bo

$$|\mathbf{J}|^2 = \hbar^2 j(j+1) \\ J_z = \hbar m_j$$

Kjer je  $j$  kvantno število celotne vrtilne količine in velja  $|m_j| \leq j$  in imamo  $2j + 1$  vrednosti. Za tretjo komponento je očitno

$$J_z = L_z + S_z \Rightarrow m_j = m_l + m_s$$

$m_j$  so samo polštevilske. Dovoljene vrednosti  $j$  pa se spreminjajo z  $l$ . Lažji primer:  $l = 0 \Rightarrow \mathbf{L}$  ne prispeva k  $\mathbf{J}$  zato  $\mathbf{J} = \mathbf{S}$ . Dobimo  $j = \frac{1}{2}$ ,  $m_j = \pm \frac{1}{2}$  za katerokoli stanje z  $l=0$ . Za  $l \neq 0$  ker  $s = \frac{1}{2}$  vedno, je lahko le  $j = l \pm \frac{1}{2}$  za katerokoli stanje z  $l \neq 0$ .

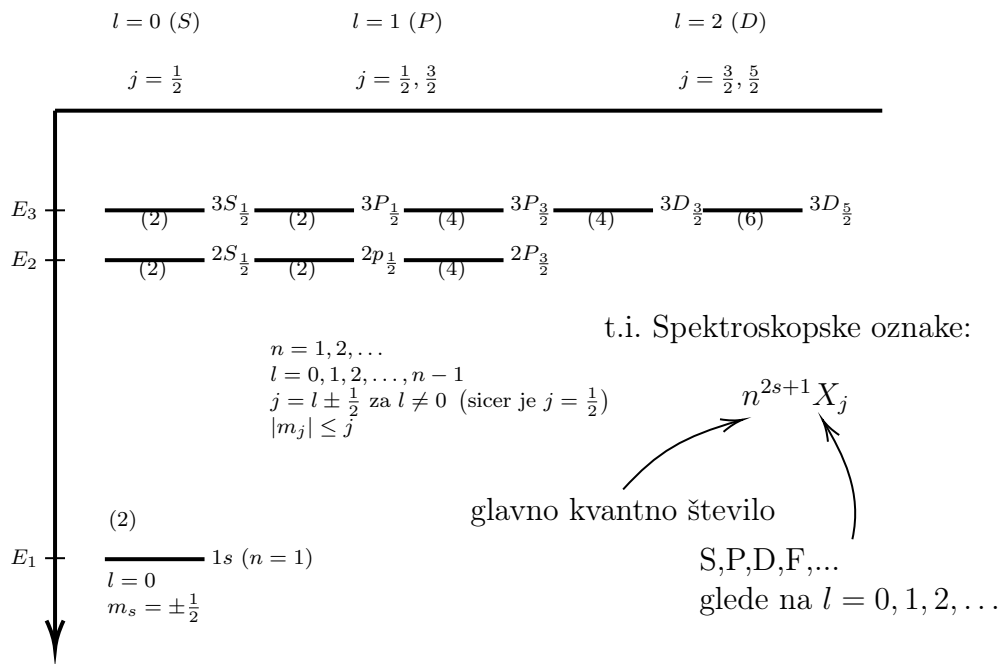


Kaj to pomeni za organizacijo energijskih nivojev?

$$\text{Kvantna števila } n, l, m_l, m_s (s = \frac{1}{2}) \Rightarrow \psi_{nlm_l m_s}$$

$$\text{ali } n, l, j, m_j \Rightarrow \psi_{nlj m_j}$$

$$l = 0(S), j = \frac{1}{2} \quad l = 1(P), j = \frac{1}{2}, j = \frac{3}{2} \quad l = 2(D), j = \frac{3}{2}, j = \frac{5}{2}$$



### 5.6.1 Seštevanje poljubnih vrtilnih količin

Max  $m_j = j$ , max  $m_l = l$ , max  $m_s = s$ . Trikotniška neenakost  $||\mathbf{L}| - |\mathbf{S}|| \leq |\mathbf{J}| \leq |\mathbf{L}| + |\mathbf{S}|$ . Kvadriramo prvi del neenačbe

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{J}|^2 &\geq (|\mathbf{L}| - |\mathbf{S}|)^2 \\
 \hbar^2 j(j+1) &\geq \left( \hbar\sqrt{l(l+1)} - \hbar\sqrt{s(s+1)} \right)^2 \\
 j(j+1) &\geq \left( \sqrt{l(l+1)} - \sqrt{\frac{3}{4}} \right)^2 \\
 j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} &\geq -\sqrt{3l(l+1)}
 \end{aligned}$$

Izpolnujemo samo za  $j = l \pm \frac{1}{2}$  za poljuben  $l$ . Če seštevamo poljubni  $\mathbf{L}_1$  in  $\mathbf{L}_2$  (to sta katerikoli vrtilni količini, spinski/tirni/celotni) tu smo le izbrali oznake, ki ustrezata tirni vrtilni količini. Projekcije niso problematične:

$$L_z = L_{1z} + L_{2z} = \hbar(m_1 + m_2) = \hbar m$$

Velikosti pa so:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{L}^2 &= (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2 = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2 \\
 &= \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2(L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y} + L_{1z}L_{2z})
 \end{aligned}$$

$L_{\alpha x}$  in  $L_{\alpha y}$  komponente so popolnoma nedoločene (azimutalni kot). Lastne vrednosti  $\mathbf{L}^2$  so dane s celim številom  $l$  in so  $\hbar l(l+1)$ , ustrezna lastna stanja pa ne morejo biti lastna stanja  $\mathbf{L}_1^2$  in  $\mathbf{L}_2^2$ , temveč njihove linearne kombinacije. Vedno velja trikotniška neenakost.

$$|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2 \quad m_1 + m_2 = m$$

Stanje z danim  $l, m$  je linearna kombinacija stanj  $l_1, m_1$  in  $l_2, m_2$ , tako da je izpolnjeno:

$$\left| \underbrace{lm}_{\text{ali } \psi_{lm}} \right\rangle = \sum_{m_1+m_2=m+\text{trikotniška neenakost}} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm} |l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle$$

ali  $|l_1 m_1, l_2 m_2\rangle$   
ali  $\psi_{l_1 m_1, l_2 m_2}$

Kjer so  $C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm}$  Clebsch-Gordanovi koeficienti. Intermezzo: Diracova bra-ket notacija.

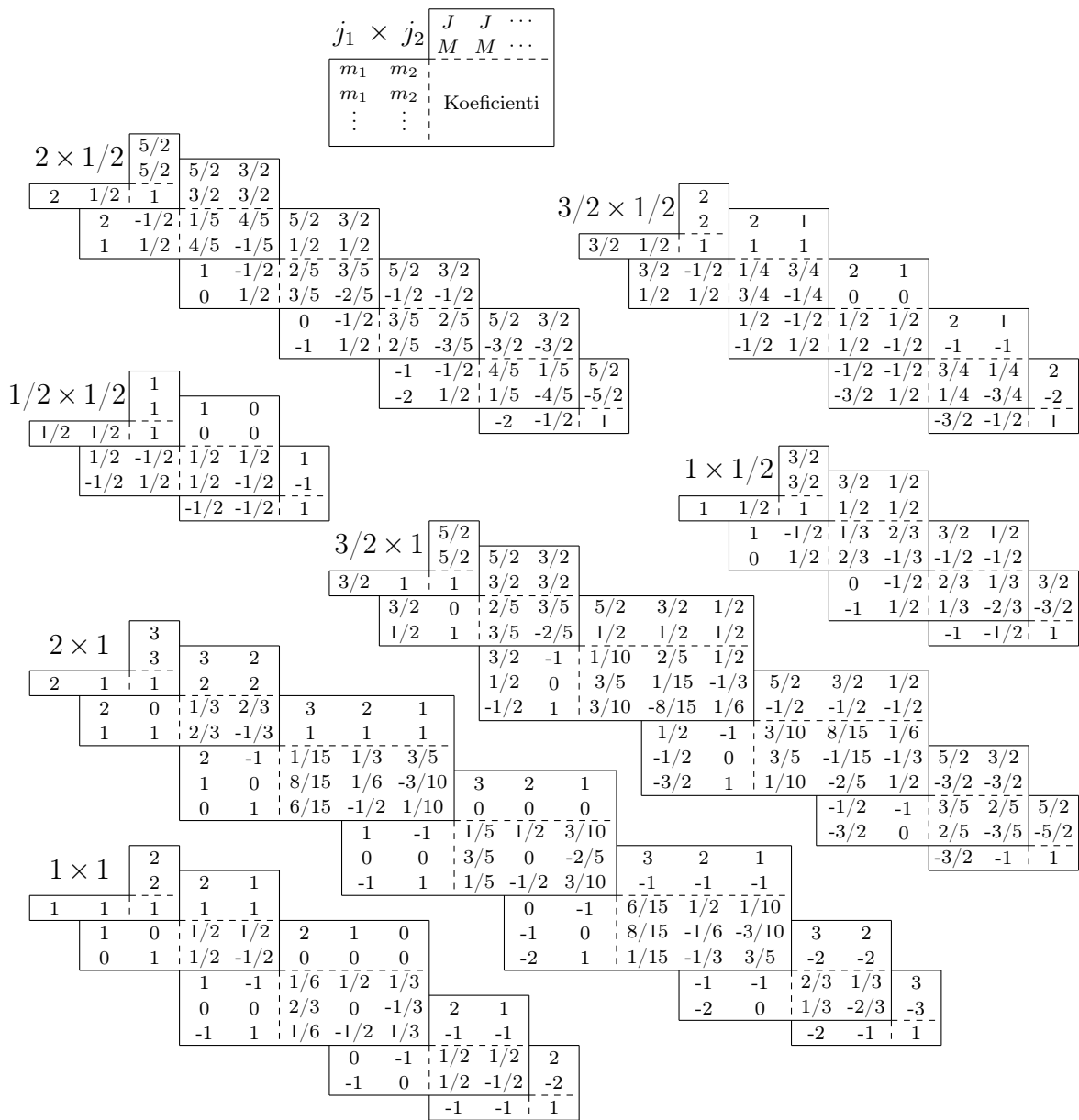
$$\psi_n = |n\rangle$$

$$\int \psi_m^* \psi_n^* dx = \langle m | n \rangle$$

Naprimer:

$$\begin{aligned} |10\rangle &= C_{1-121}^{10} |1-1, 21\rangle + C_{1020}^{10} |10, 20\rangle + C_{112-1}^{10} |11, 2-1\rangle \\ &= \sqrt{\frac{3}{10}} |1-1, 21\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |10, 20\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |11, 2-1\rangle \end{aligned}$$

Seveda  $\left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{2}{5}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^2 = 1$

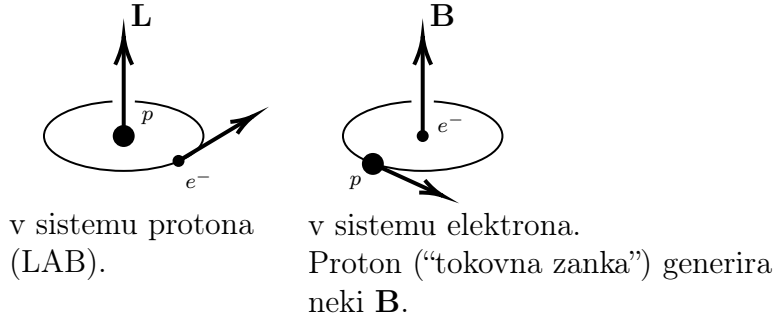


Sprememba faze:  $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M \rangle = (-1)^{J-j_1 j_2} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 J M \rangle$

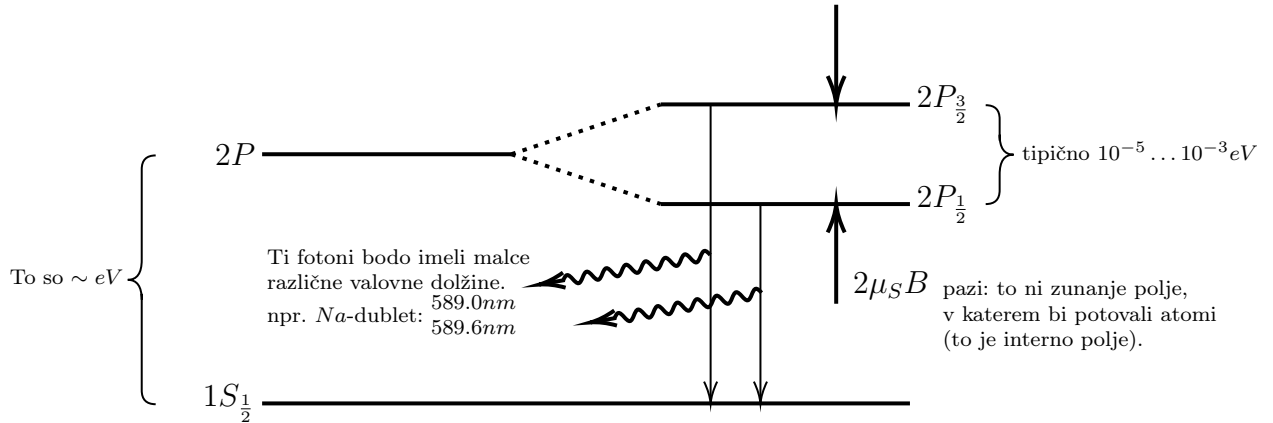
Slika 3: Clebsch-Gordan koeficienti. Vsak koeficient je mišljen pod korenom, torej  $-1/3$  pomeni  $-\sqrt{1/3}$ .

## 5.7 Sklopitev spin-tir

Oziroma spin-orbit coupling/interaction. Zaradi tega efekta stanja z istimi  $n$  in istimi  $l$ , toda različnimi  $j$ , dobijo malenkost drugačne energije, delno odpravimo degeneracijo po  $n$ . Osnovna ideja iz Bohrove slike:



Spin  $e^-$ , da spinski magnetni moment in ta interagira z magnetnim poljem  $\mathbf{B}$ . Interakcijska energija je  $-\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B$  (največja, ko sta  $\boldsymbol{\mu}$  in  $\mathbf{B}$  antiparalelna). Energija stanja  $2P_{3/2}$  postane nekoliko višja kot energija  $P_{1/2}$ :



### 5.7.1 Izpeljava prispevka $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ k energiji

$$\mathbf{B}_{\text{interno}} = -\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2} = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{v}}{c^2 r^3} = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e \mathbf{r} \times \mathbf{v}}{m_e c^2 r^3}$$

Vrednosti  $\mathbf{B}_{\text{interno}}$  so od  $0.1T$  to  $1T$ .

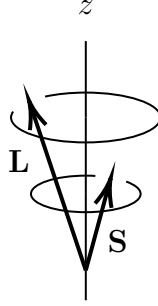
$$E_{ls} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{interno}} = \left(g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}\right) \cdot \left(\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r^3} \mathbf{L}\right) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{m_e c^2 r^3}$$

Tukaj je  $ls$  oznaka za "spin-tir" in nista kvantni števili. Še vedno dobimo klasični rezultat, osnovan na ideji, da  $e^-$  "kroži" in gledamo  $B_{\text{int}}$  od protona. Pridobljeno moramo transformirati nazaj v sistem protona ( $\approx LAB$ ) in rigorozna izpeljava da še faktor  $\frac{1}{2}$  ("Thomasova polovička"). Približen argument je v Strnad III. Končni rezultat

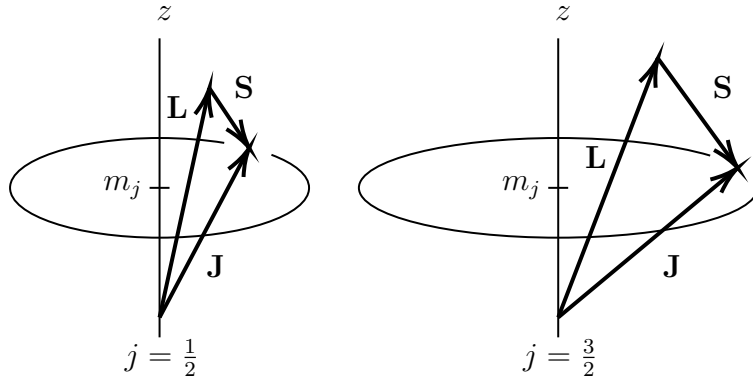
$$E_{ls} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{2m_e c^2 r^3}$$



Interakcija spin-tir prinese težave v knjigovodstvu stanj.  $\psi_{nlm_l m_s}$  kvantni števili  $m_l$  in  $m_s$  sta dobri za opis stacionarnih stanj, dokler lahko neodvisno določimo ustrezne lastne vrednosti operatorjev  $\hat{L}_z$  in  $\hat{S}_z$ .



Če sta razklopljena, vsak zase precesirata okrog osi  $z$  in je opis z  $m_l$  in  $m_s$  dober. Interakcija spin-tir implicira fiksno orientacijo  $\mathbf{L}$  glede na  $\mathbf{S}$ , ker je  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \propto E_{ls}$ ,  $\mathbf{L}$  in  $\mathbf{S}$  torej ne moreta več poljubno precesirati, ker sta sklopljena



Zaradi sklopitve spin-tir se sicer degenerirana stanja  $\psi_{nljm_j}$  razcepijo, tako da imajo atomi z istim  $n$  in  $l$  malenkost različne  $j$ . Govorimo o fini strukturi (atoma/spektra/spektralnih črt) (fine structure). Primerna brezdimenzijska količina, ki meri relativno velikost takšnih efektov glede na vodilni red, je

$$\alpha = \alpha_{em} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

konstanta fine strukture (fine structure constant), karakteristična za elektromagnetno interakcijo. V procesih tega reda nastopi  $\alpha^2 \approx 10^{-4}$  zato tudi takoj ocenimo, kolikšni bodo razcepni nivoji. Nivoji so narazen  $\approx 0.1$  do nekaj  $eV$  torej bodo fini razcepi  $\approx 10^{-4}$  do  $10^{-5}eV$ . Sklopitev spin-tir je eden od dveh relativističnih efektov, ki prispevata k fini strukturi atoma. Drugi še pride na vrsto. Vrnimo se k  $E_{ls}$

$$\hat{E}_{ls} = Z\alpha \frac{\hbar}{2m_e^2 c} \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{r^3} = Z\alpha \frac{\hbar}{4m_e^2 c} \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{r^3}$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad \mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{L}\mathbf{S} + \mathbf{S}^2 \Rightarrow \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$$

Pričakovane vrednosti  $\hat{E}_{ls}$  v stanju  $\psi_{nljm_j}$

$$\begin{aligned}\langle E_{ls} \rangle &= \int \psi_{nljm_j}^* \hat{E}_{ls} \psi_{nljm_j} dV \\ &= Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m_e^2 c} \left( j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle\end{aligned}$$

$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$  smo že nekoč zapisali 5. Izraženo z  $\alpha$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \left( \frac{Z\alpha m_e c^2}{n\hbar} \right)^3 \frac{2}{l(l+1)(2l+1)}$$

$$\begin{aligned}E_{ls} &= Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m_e^2 c} \left( j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \left( \frac{Z\alpha m_e c^2}{n\hbar} \right)^3 \frac{2}{l(l+1)(2l+1)} \\ &= \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} \\ \Rightarrow \langle E_{ls} \rangle &= \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} E_0 \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)}\end{aligned}$$

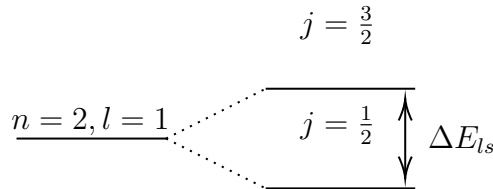
Kjer je  $E_0 = \frac{\alpha^2}{2} m_e c^2$  Rydbergova energija.

**Zgled:** stanja  $2P$ , torej  $n = 2, l = 1$ . Energijska razmika zaradi sklopitve  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  ( $j = l \pm 1/2$ ).

$$\begin{aligned}j = 1/2 : \quad \langle E_{ls} \rangle &= \frac{Z^4 \alpha^2}{8} E_0 \frac{\frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4}}{1 \cdot 2 \cdot 3} = -\frac{Z^4 \alpha^2 E_0}{24} \\ j = 3/2 : \quad \langle E_{ls} \rangle &= \frac{Z^4 \alpha^2}{8} E_0 \frac{\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4}}{1 \cdot 2 \cdot 3} = -\frac{Z^4 \alpha^2 E_0}{48}\end{aligned}$$

Za  $H$  atom ( $Z = 1$ ):

$$\begin{aligned}\Delta E_{ls} &= \alpha^2 E_0 \left( \frac{1}{48} - \left( -\frac{1}{24} \right) \right) = \frac{\alpha^2 E_0}{16} \\ &\approx 4.5 \cdot 10^{-5}\end{aligned}$$



## 5.8 Relativistični popravek h kinetična energiji

Namesto  $T = \frac{p^2}{2m}$  bi morali delati z relativističnim izrazom, če želimo isto natančnost kot ob upoštevanju sklopitve  $ls$ :

$$\begin{aligned} T &= \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2} - m_e c^2 = m_e c^2 \left( 1 + \frac{p^2}{m_e^2 c^2} \right)^{\frac{1}{2}} - m_e c^2 \\ &= m_e c^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_e^2 c^2} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_e^4 c^4} + \dots - 1 \right) \\ &= \frac{p^2}{2m_e} - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} + \dots \end{aligned}$$

$$\langle T_{rel} \rangle = -\frac{Z^4 \alpha^4}{n^3} m_e c^2 \left( \frac{1}{2l+1} - \frac{3}{8n} \right)$$

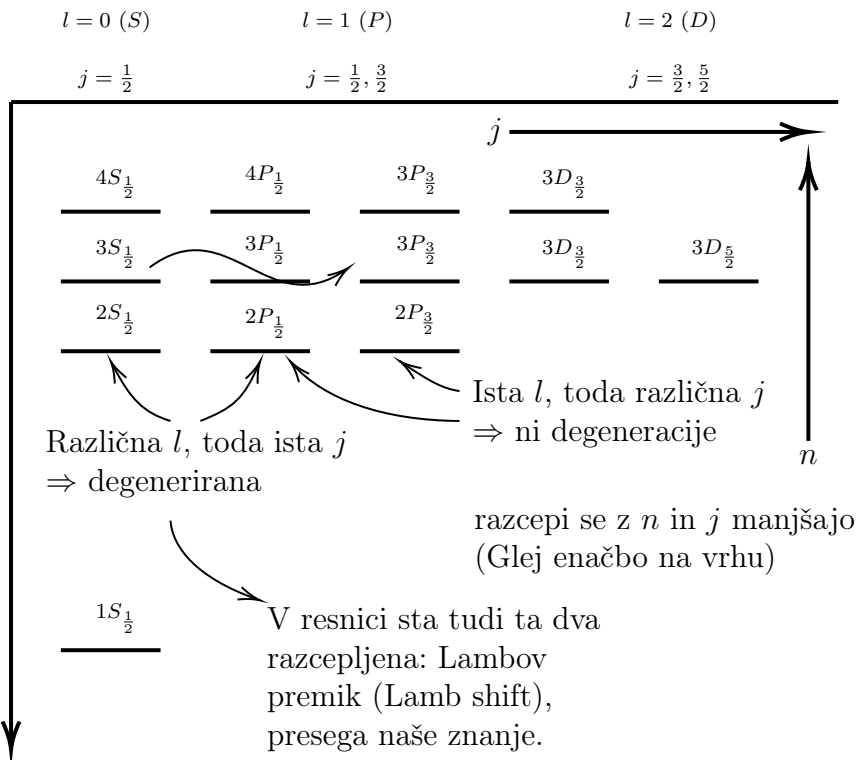
v stanju  $\psi_{nljm_j}$ . Skupni premiki nivojev ob upoštevanju fine strukture torej obeh relativističnih popravkov

$$\begin{aligned} \langle E_{ls} \rangle + \langle T_{rel} \rangle &= -\frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \left( \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} - \frac{2}{2l+1} + \frac{3}{4n} \right) \\ &= \dots = -\frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \left( \frac{2}{2j+1} - \frac{3}{4n} \right) \end{aligned}$$

in velja za  $l = 0$  ali  $l \neq 0$ . Za katerokoli stanje  $(n, j)$  enoelektronskega atoma:

$$E_{nj} = E_n - \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \left( \frac{2}{2j+1} - \frac{3}{4n} \right)$$

kjer je  $E_n$  osnovna formula z degeneracijo pri danem  $n$ .



## 5.9 Zeemaov pojav

Če damo atom v magnetno polje, bo njegov  $\boldsymbol{\mu}$  interagiral z  $\mathbf{B}$

$$E_{mag} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

$\boldsymbol{\mu}$  ima dva prispevka, od tirne in spinske vrtilne količine:

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s = -\frac{\mu_B}{\hbar} (g_l \mathbf{L} + g_s \mathbf{S}) = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$$

$$\langle E_{mag} \rangle = -\langle \mu_z \rangle B, \quad \text{kvantizacijska os} \quad \parallel \mathbf{B}$$

Obravnavamo dva režima:

1. močno zunanje polje,  $B \gg B_{int}$ .
2. šibko zunanje polje,  $B \ll B_{int}$ .

### Močno polje (Paschen-Backov pojav)

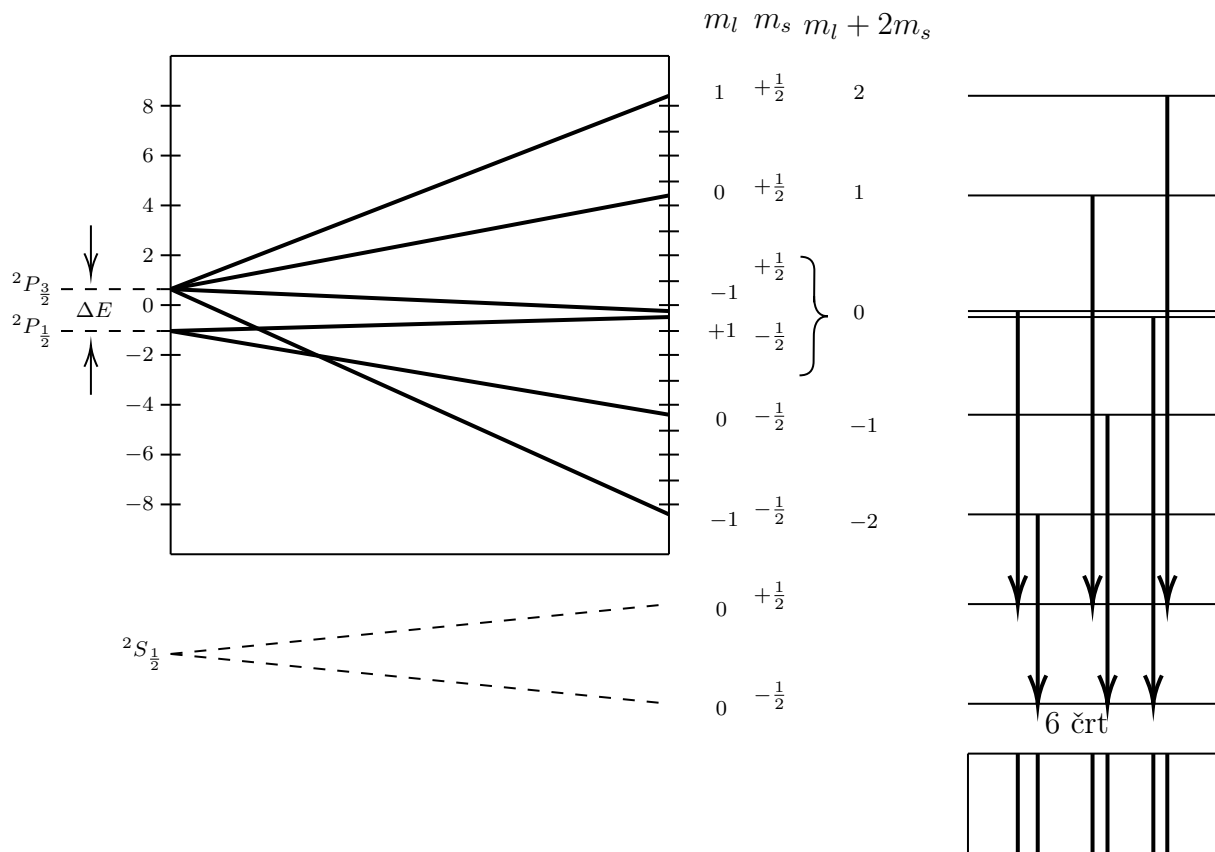
Interakcijo spin-tir zanemarimo. Vektorja  $\mathbf{L}$  in  $\mathbf{S}$  sta razklopljena in Larmorjevo precesirata okoli  $\mathbf{B}$ . Relevantni projekciji sta (v stanju  $\psi_{nlm_l m_s}$ )

$$\begin{aligned} \langle L_z \rangle &= \hbar m_l \\ \langle S_z \rangle &= \hbar m_s \end{aligned}$$

in torej

$$\begin{aligned} \langle E_{mag} \rangle &= \frac{\mu_B}{\hbar} \langle L_z + 2S_z \rangle \\ &= \mu_B B (m_l + 2m_s) \end{aligned}$$

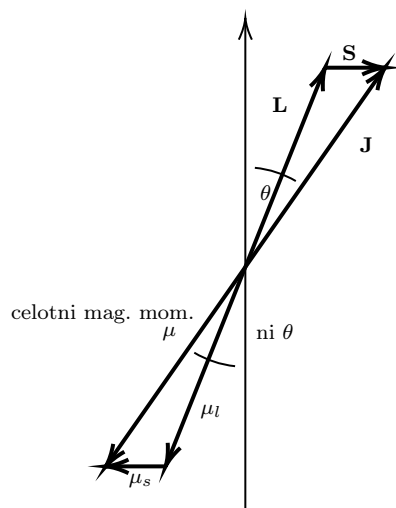
Danima  $n$  in  $l$  ustreza  $2(2l + 1)$  magnetnih podstanj.



## Šibko polje

$E_{ls}$  in  $E_{mag}$  sta primerljivi ali celo  $E_{mag} \ll E_{ls}$ . Dobra kvantna števila so  $j$  in  $m_j$  ( $\psi_{nljm_j}$ ). Komponenta  $\boldsymbol{\mu}$  (celotni magnetni moment) vzdolž  $\mathbf{J}$ :

$$\begin{aligned}
 \mu_j &= \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{J}}{|\mathbf{J}|} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) (\mathbf{L} + \mathbf{S}) \frac{1}{|\mathbf{J}|} \\
 &= -\frac{\mu_B}{\hbar|\mathbf{J}|} (\mathbf{L}^2 + 2\mathbf{S}^2 + 3\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) \\
 &= -\frac{\mu_B}{\hbar|\mathbf{J}|} \left( \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{S}^2 + \frac{3}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \right) \\
 &= -\frac{\mu_B}{2\hbar|\mathbf{J}|} (3\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 + \mathbf{L}^2)
 \end{aligned}$$

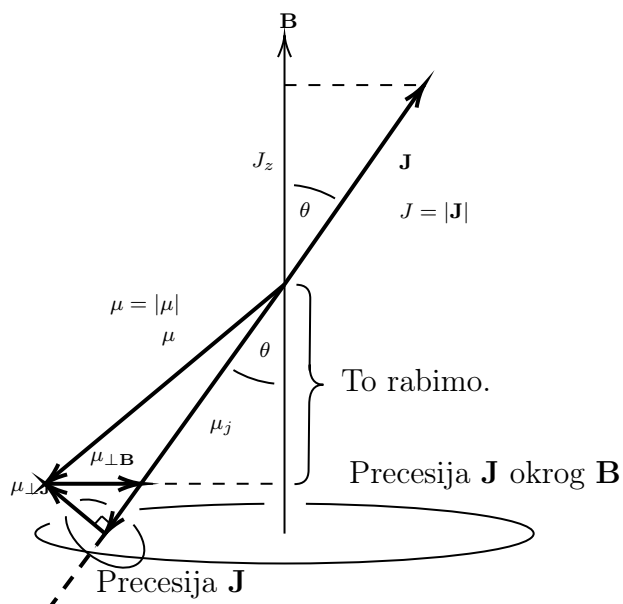


Toda  $\mu$  ni tisto, kar potrebujemo za izračun magnetne interakcijske energije. Potrebujemo  $\mu_z$ , komponento  $\boldsymbol{\mu}$  vzdolž  $\mathbf{B}$ .

$$\mu_z = |\boldsymbol{\mu}_J + \boldsymbol{\mu}_{\perp J} + \boldsymbol{\mu}_{\perp B}| \cdot \cos \theta$$

$$\cos \theta = \frac{J_z}{J}$$

Mislamo si, da ob sočasni precesiji  $\boldsymbol{\mu}_L$  in  $\boldsymbol{\mu}_S$  okrog  $\boldsymbol{\mu}$  in  $\mathbf{J}$  okrog  $\mathbf{B}$  povprečimo po vseh orientacijah  $\boldsymbol{\mu}_{\perp J}$  in  $\boldsymbol{\mu}_{\perp B}$ .



$$\mu_z \rightarrow \mu_J \cos \theta = \mu_J \frac{J_z}{J}$$

Izračunamo pričakovano vrednost ne  $\langle \mu_z \rangle$  temveč  $\langle \mu_z \mathbf{J}^2 \rangle$ .

$$\begin{aligned}
\langle \mu_z \mathbf{J}^2 \rangle &= \langle \mu_z \mathbf{J} \cdot \mathbf{J} \rangle = \langle J_z J_{\mu_J} \rangle \\
&= -\frac{\mu_B}{\hbar} \langle J_z (3\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2) \rangle \\
&= \langle \mu_z \rangle \hbar^2 j(j+1) \\
\text{in } \langle J_z (3\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2) \rangle &= \langle J_z \rangle \hbar^2 (3j(j+1) + s(s+1) - l(l+1))
\end{aligned}$$

Izenačimo levo in desno stran:

$$\begin{aligned}
\langle \mu_z \rangle &= -g\mu_B \frac{\langle J_z \rangle}{\hbar} \\
g &= 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}
\end{aligned}$$

Kjer je  $g$  Landéjevo giromagnetno razmerje (Landéjev  $g$ -faktor). Ta formula nadomešča našo prvotno  $\langle \mu_z \rangle = -g\frac{\mu_B}{\hbar} \langle L_z \rangle$ , preden smo kar koli vedeli o spinu, sklopitvi  $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$  itd. Iz te formule dobimo  $g_l = 1$ , če predpostavimo  $s = 0$  in si mislimo, da sta  $\mathbf{L}$  in  $\mathbf{J}$  identični stvari. Ampak pravilno je seveda  $s = \frac{1}{2}$  in to se reducira na  $g_s = 2$ , če postavimo  $l = 0$  in  $j = \frac{1}{2}$ . To lahko posplošimo na ves vektor:

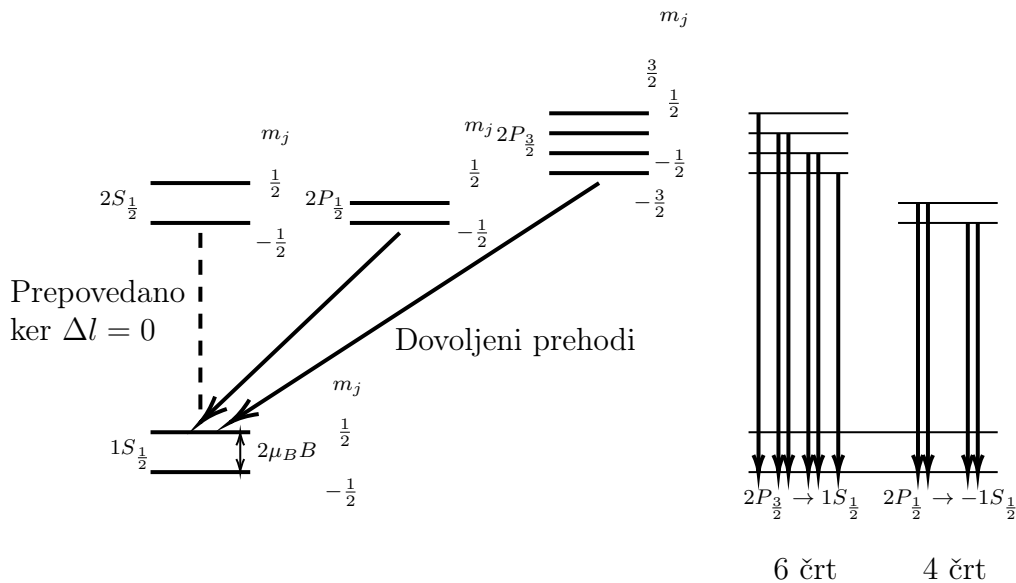
$$\langle \mu \rangle = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \langle \mathbf{J} \rangle$$

To lahko storimo, ker je opazljiv vektor magnetnega dipolnega momenta sorazmeren s celotno vrtilno količino, edini vektor, ki karakterizira stanje atoma ( $\psi_{nljm_j}$ ). Magnetna interakcijska energija:

$$\begin{aligned}
\langle E_{mag} \rangle &= -\langle \mu_z \rangle B = g\mu_B B \frac{\langle J_z \rangle}{\hbar} \\
&= g\mu_B B m_j
\end{aligned}$$

**Zgled:** Lymanovi prehodi  $2P_{3/2} \rightarrow 1S_{1/2}$  in  $2P_{1/2} \rightarrow 1S_{1/2}$  v prisotnosti zunanjega magnetnega polja  $B$ .

$$\begin{aligned}
\text{stanje } 2P_{3/2}: \quad g &= 1 + \frac{\frac{15}{4} - 2 + \frac{3}{4}}{2 \cdot \frac{15}{4}} = 1 + \frac{1}{3} = \frac{4}{3} \\
m_j &= \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2} \Rightarrow \langle E_{mag} \rangle = \frac{4}{3} \mu_B B \left\{ -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\} \\
\text{stanje } 2P_{1/2}: \quad g &= 1 + \frac{\frac{3}{4} - 2 + \frac{3}{4}}{2 \cdot \frac{3}{4}} = 1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3} \\
m_j &= \pm \frac{1}{2} \Rightarrow \langle E_{mag} \rangle = \frac{2}{3} \mu_B B \left\{ -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \\
\text{stanje } 1S_{1/2}: \quad g &= 1 + \frac{\frac{3}{4} - 0 + \frac{3}{4}}{2 \cdot \frac{3}{4}} = 1 + 1 = 2 \\
m_j &= \pm \frac{1}{2} \Rightarrow \langle E_{mag} \rangle = 2\mu_B B \left\{ -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\}
\end{aligned}$$



## 5.10 Sevanje atomov

Doslej smo obravnavali lastna stanja energije kot strogo stacionarna:

$$|\Psi_n(x, t)|^2 = |\psi_n(x)|^2 = \text{neodvisna od } t$$

Načeloma atom v takšnem stanju vztraja  $\infty$  dolgo. V resnici pa ga zmotijo motnje, trki (drugi  $e^-$  v atomu), končna razsežnost jedra, trki v plinih... Pri opisu sevanja se omejimo le na dve stanji

1. končno stanje (nižja energija)
2. začetno stanje (višja energija)

Ustrezni valovni funkciji sta

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r})e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}}$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = \psi_2(\mathbf{r})e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}$$

in velja za kakršnkoli sistem (atom,  $\infty$  jama, LHO,...). “Trenutna” valovna funkcija naj ima obliko

$$\Psi_\alpha = \begin{cases} \Psi_2 & t \leq 0 \quad \text{do motnje, ki se zgodi ob } t = 0 \\ \Psi_1 & t \gg \tau \quad \tau = \text{čas, značilen za ta razpad} \end{cases}$$

$$\Psi_\alpha = C_1(t)\Psi_1 + C_2(t)\Psi_2$$

V splošnem  $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$ , a si poenostavimo življenje,  $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$  in seveda  $C_1^2(t) + C_2^2(t) = 1$  ob vseh časih. Ker imamo sama lastna stanja,

$$\langle E_\alpha \rangle = C_1^2(t)E_1 + C_2^2(t)E_2 = E_1 + C_2^2(t)(E_2 - E_1)$$

$$\text{Pred prehodom } 2 \rightarrow 1 \quad C_2 = 1, C_1 = 0$$

$$\text{Po prehodu } t \gg \tau \quad C_2 = 0, C_1 = 1$$



Omejimo se samo na električno dipolno sevanje

$$\begin{array}{ll} \text{Klasično} & \mathbf{p}_e = e(\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) \quad e > 0 \\ \text{Pri } H \text{ atomu} & \hat{\mathbf{p}}_e = -e_0 \mathbf{r} \quad \mathbf{r} \text{ od jedra do } e^- \end{array}$$

Pričakovana vrednost  $\hat{\mathbf{p}}_e$  v stanju z valovno funkcijo  $\Psi_\alpha$ :

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{p}}_e(\alpha) \rangle &= \int \Psi_\alpha^* \hat{\mathbf{p}}_e \Psi_\alpha d^3\mathbf{r} = \int (C_1 \Psi_1^* + C_2 \Psi_2^*) \hat{\mathbf{p}}_e (C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) d^3\mathbf{r} \\ &= C_1^2(t) \int \Psi_1^* \hat{\mathbf{p}}_e \Psi_1 d^3\mathbf{r} + C_1^2(t) \int \Psi_2^* \hat{\mathbf{p}}_e \Psi_2 d^3\mathbf{r} \\ &\quad + C_1(t)C_2(t) \left( \int \Psi_1^* \hat{\mathbf{p}}_e \Psi_2 d^3\mathbf{r} + \int \Psi_2^* \hat{\mathbf{p}}_e \Psi_1 d^3\mathbf{r} \right) \end{aligned}$$

Diagonalna člena: sode funkcije  $\Psi^* \Psi$ , pomnožene z lihimi  $(x, y, z)$ , in integrirane na simetričnih intervalih  $(-\infty, \infty), (-a, a)$

$$\int |\psi|^2 x d^3\mathbf{r} = 0 \quad \int |\psi|^2 y d^3\mathbf{r} = 0 \quad \int |\psi|^2 z d^3\mathbf{r} = 0$$

Pojasnimo, zakaj atom, ki vztraja v enem od svojih stanj, ne seva.

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_e^{(12)}(t) &= \int \Psi_1^* \hat{\mathbf{p}}_e \Psi_2 d^3\mathbf{r} = e^{-i \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \int \psi_1^* \hat{\mathbf{p}}_e \psi_2 d^3\mathbf{r} \\ \mathbf{p}_e^{(21)}(t) &= \int \Psi_2^* \hat{\mathbf{p}}_e \Psi_1 d^3\mathbf{r} = e^{i \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \int \psi_2^* \hat{\mathbf{p}}_e \psi_1 d^3\mathbf{r} \end{aligned}$$

Op. in velja  $\mathbf{p}_e^{(12)}(t) = \mathbf{p}_e^{(21)}(t)$ , sledi

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_e(\alpha) \rangle &= C_1 C_2 \mathbf{p}_e^{(12)}(t) \left( e^{-i \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} + e^{i \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \right) \\ &= 2C_1 C_2 \mathbf{p}_e^{(12)}(t) \cos \left( \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} \right) \end{aligned}$$

Pričakovana vrednost električnega dipolnega momenta niha (ko)sinusno, kakor niha tudi klasični dipol:

$$\mathbf{p}_e = \mathbf{p}_{e0} \cdot \cos \omega t$$

Frekvenca izsevanega fotona je

$$\omega_{12} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad \nu_{12} = \frac{\omega_{12}}{2\pi} = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

Kaj pa izsevana moč? Klasično dipol zvezno oddaja energijo, kvantno pa ne moremo navesti eksplcitne časovne odvisnosti, le verjetnost za prehod na časovno enoto. Klasični izraz za energijski tok, ki ga seva dipol je

$$P = \frac{\omega^4 \mathbf{p}_{e0}}{12\pi \epsilon_0 c^3} = -\frac{dE}{dt}$$

Opazujejo toliko časa, da je večina atomov že v končnem stanju in le še malo v začetnem  $C_1 \approx 1$  in  $C_2 = \sqrt{1 - C_1^2} \ll 1$

$$-d\langle E_\alpha \rangle = -(E_2 - E_1) \quad \frac{dC_2^2(t)}{dt} = -\hbar\omega_{12} \frac{dC_2^2(t)}{dt}$$

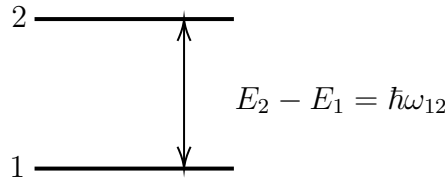
V enačbo za  $P$  damo  $\omega_{12}$  namesto  $\omega$  in  $2C_1C_2\mathbf{p}_e^{(12)}$  namesto  $\mathbf{p}_{e0}$  ter postavimo  $C_1 = 1$ . Dobimo

$$P = \frac{4\omega_{12}^4 C_2^2(t) (\mathbf{p}_e^{(12)})^2}{12\pi\epsilon_0 c^3} = -\hbar\omega_{12} \frac{d}{dt} C_2^2(t)$$

$$\Rightarrow \frac{dC_2^2(t)}{C_2^2(t)} = -\frac{\omega_{12}^3 (\mathbf{p}_e^{(12)})^2}{3\pi\epsilon_0 c^3 \hbar} dt$$

To ima rešitev  $C_2^2(t) = C_2^2(0)e^{-\frac{t}{\tau}}$ . "Zasedenost" zgornjega stanja eksperimentalno pojema (vedno imamo zelo veliko atomov). Dobimo verjetnost za električni dipolni prehod  $2 \rightarrow 1$  na časovno enoto

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\omega_{12}^3 (\mathbf{p}_e^{(12)})^2}{3\pi\epsilon_0 c^3 \hbar}$$



## 5.11 Izbirna pravila

v angleščini selection rules. Za izračun  $\frac{1}{\tau}$  je bil odločilen matrični element električnega dipolnega momenta, naprimer med stanjema  $n$  in  $m$ .

$$\int \psi_m^*(-e_0\mathbf{r})\psi_n d^3\mathbf{r} = -e_0 \langle m|\mathbf{r}|n \rangle$$

Prehodi, za katere je to  $\neq 0$  so dovoljeni (allowed), za tiste, ko pa je  $= 0$  pa so prepovedani (forbidden).

$\infty$  jama

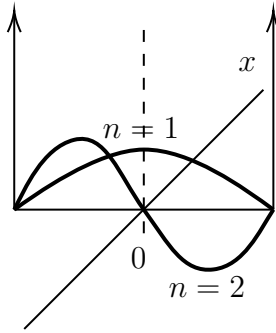
$$\langle p \rangle_{mn} = \langle m|x|n \rangle = \int_0^a \psi_m(x)x\psi_n(x) dx \quad \langle p_{mn} \rangle = -e_0 \langle x_{mn} \rangle$$

Za splošna  $m$  in  $n$  (Strnad III, str. 163):

$$[\langle x \rangle] = \frac{8a}{\pi^2} \begin{bmatrix} 0 & \frac{2}{9} & 0 & \frac{4}{225} & 0 & \dots \\ \frac{2}{9} & 0 & \frac{6}{25} & 0 & \frac{10}{441} & \dots \\ 0 & \frac{6}{25} & 0 & \frac{12}{49} & 0 & \dots \\ & & \vdots & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$\langle x_{mn} \rangle = 0$ , če  $m$  in  $n$  oba soda ali oba liha (prepovedani) torej so dovoljeni, če velja  $\Delta n = \text{liho}$ . Lepše bi bilo za jamo izbrati simetričen interval, naprimer  $[-a, a]$ ,  $[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$ :

$$p_e \propto \int_{-a}^a \begin{matrix} \text{liha} \\ \text{soda} \end{matrix} \cdot x \cdot \begin{matrix} \text{liha} \\ \text{soda} \end{matrix} dx \neq 0 \quad \text{le ob sodem integrandu}$$



### H-atom

začetna valovna funkcija:  $\psi_2(\mathbf{r}) = R_{n'l'}(r)Y_{l'm'_l}(\theta, \phi)\chi_{m'_s}$

končna valovna funkcija:  $\psi_1(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)\chi_{m_s}$

sferične koordinate:  $\nabla \hat{p}_{ex}^{(12)}, \hat{p}_{ey}^{(12)}, \hat{p}_{ez}^{(12)}$  nastopajo

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \\ d^3\mathbf{r} &= r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \end{aligned}$$

V kotnih delih nastopajo faktorji  $e^{im'_l\phi}$  in  $e^{im_l\phi}$ . Dobimo integrale tipa (naprimer za  $x$  komponento):

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} e^{-im_l\phi} \cos \phi e^{im'_l\phi} d\phi &= \int_0^{2\pi} e^{-im_l\phi} \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} e^{im'_l\phi} d\phi \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} e^{i(m'_l-m_l+1)\phi} d\phi + \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} e^{i(m'_l-m_l-1)\phi} d\phi \end{aligned}$$

In analogno za komponenti  $y$  in  $z$ :

$$y : \int_0^{2\pi} e^{-im_l\phi} \sin \phi e^{im'_l\phi} d\phi = \dots$$

$$z : \int_0^{2\pi} e^{-im_l\phi} \cdot 1 \cdot \phi e^{im'_l\phi} d\phi = \int_0^{2\pi} e^{i(m'_l-m_l)\phi} d\phi$$

Vsaj eden od zgronjih treh integralov mora biti različen od nič, če naj bo električni dipolni prehod v vodikcu dovoljen. To pomeni, da velja  $m_l - m'_l = 0$  ali  $\pm 1$  oziroma  $\Delta m_l = 0, \pm 1$ . Izbirno pravilo za kvantno število  $l$  izpeljemo na podlagi simetrijskih argumentov. Valovne funkcije imajo namreč določeno parnost (parity)

$$\text{soda parnost: } \psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$$

$$\text{liha parnost: } \psi(-\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r})$$

Atomske valovne funkcije imajo določeno parnost, ker je  $\hat{H}$  neobčutljiv na operacijo zrcaljenja prostora ( $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ) moramo spet pogledati le kdaj dobimo lih oziroma sodi integrand:

$$\mathbf{p}_e^{(12)} = -e_0 \int \psi_1^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

Če imata obe valovni funkciji isto parnost bo matrični element enak nič, naprimer

$$\int \text{soda} \cdot \mathbf{r} \cdot \text{soda} d^3\mathbf{r} = 0$$

$\psi_1$  in  $\psi_2$  imata različno parnost, če je  $\mathbf{p}_e^{(12)} \neq 0$ . Krogelne funkcije ( $Y_{lm}$ ) imajo sodo parnost za sode  $l$  in liho za lihe  $l$ . Tako dobimo  $l - l' = \pm 1$  oziroma  $\Delta l = \pm 1$  (zakaj ne  $\pm 3, \pm 5, \dots$ , malo kasneje). Operator  $\mathbf{p}_e^{(12)}$  nima zveze s spinom, tako imamo  $m_s - m'_s = 0$  in  $s - s' = 0$ . Izbirnega pravila za glavno kvantno število  $n$  ni ker:

$$\int_0^\infty R_{nl}(r) r R_{n'l'}(r) r^2 dr \neq 0 \quad \forall n, n'$$

Pri absorpciji očitno ne velja vse ravno v obratnem smislu kot pri emisiji.

### Rotator

$$\Delta l = \pm 1 \quad \text{drugega kvantnega števila ni}$$

### Linearni harmonični oscilator

$$\Delta n = \pm 1 \quad \begin{array}{l} \text{električni dipolni prehodi so dovoljeni samo} \\ \text{med sosednjimi energijskimi nivoji} \end{array}$$

## 5.12 Spin fotona

Ta odnese vrtilno količino, ki se spremeni ob prehodu elektrona z višjega v nižje stanje. Očitno moramo fotonu pripisati vrtilno količino "ena". Nima "tirne" vrtilne količine (je ne more imeti) torej ima le "lastno" vrtilno količino, raje ji rečemo kar celotna oziroma spinska. Ker je spin fotona enak ena  $S = 1$ , obstajajo tri podstanja  $m_s = 0, \pm 1$

$$\begin{aligned} m_s &= -1 && \text{levo krožno polarizirani fotoni} \\ &= +1 && \text{desno krožno polarizirani fotoni} \\ &= 0 && \text{longitudinalno polarizirani (t.i. virtualni fotoni)} \end{aligned}$$

Eliptično ali linearno polarizirani pa je superpozicija  $m_s = \pm 1$ .

## 5.13 Širina spektralnih črt

Energija stanj, ki smo jih imeli za stacionarna, ni popolnoma ostro določena. Atom spontano seva in v povprečju v času  $\tau$  preide iz vzbujenega stanja v nižje (ali osnovno). Po Heisenbergu:

$$E_{\frac{1}{2}}\tau \approx \hbar$$

Kjer je  $E_{\frac{1}{2}}$  razpolovna širina stanja (ki razpada), merilo za nedoločenost energije. Klasično dipolno sevanje: jakost električnega polja v dani točki v valovanju je:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 e^{-\omega_0 t - \beta t} \quad t \geq 0$$

Fourierjeva transformacija polja:

$$\tilde{\mathcal{E}}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \mathcal{E}_0 e^{-i\omega_0 t - \beta t} \cdot e^{i\omega t} dt = \frac{\mathcal{E}_0}{\sqrt{2\pi}} (\beta + i\omega_0 - i\omega)$$

Spektralna črta moči je:

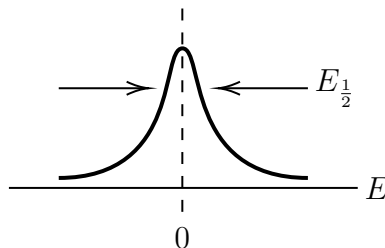
$$\propto \left| \tilde{\mathcal{E}}(\omega) \right|^2 \propto \frac{\mathcal{E}_0^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \beta^2} = \text{Lorentz (oz. Cauchy)}$$

Kvantno:

$$\beta \rightarrow \frac{1}{\tau}$$

$$E \rightarrow \hbar\omega$$

$$E_0 = \hbar\omega_{12} = E_2 - E_1 \text{ energijska razlika med nivojema pri prehodu}$$



$$P(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(E_0 - E)^2 + \left(\frac{\hbar}{2\tau}\right)^2}$$

Maksimalno vrednost doseže pri  $E = E_0$  in ima polovico te vrednosti pri  $\frac{\tau}{\pi\hbar}$ , tedaj

$$E = E_0 \pm \frac{\hbar}{2\tau}$$

Celotna širina je  $E_{\frac{1}{2}} = 2\frac{\hbar}{2\tau} = \frac{\hbar}{\tau}$ . To nam določa naravno širino spektralne črte.

**Zgled:** H atom, prehod iz  $n = 2$  v  $n = 1$  (osnovno stanje). Po formuli imamo  $\frac{1}{\tau} \approx 6.3 \cdot 10^8 \frac{1}{s}$ . Naravna širina je:

$$\begin{aligned} E_{\frac{1}{2}} &= \frac{\hbar}{\tau} = 4.1 \cdot 10^{-7} eV \\ \omega_{\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\tau} = 6,3 \cdot 10^8 \frac{1}{s} \\ \nu_{\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2\pi\tau} = 1.0 \cdot 10^8 \frac{1}{s} \\ \lambda_{\frac{1}{2}} &= \frac{\lambda^2}{c} \nu_{\frac{1}{2}} = 4.9 \cdot 10^{-6} nm \end{aligned}$$

Relativne širine so enake ne glede na skalo v kateri jih gledamo:

$$\frac{E_{\frac{1}{2}}}{E} = \frac{\omega_{\frac{1}{2}}}{\omega} = \frac{\nu_{\frac{1}{2}}}{\nu} = \frac{\lambda_{\frac{1}{2}}}{\lambda} = 4 \cdot 10^{-8}$$

Naravne širine so izredno majhne in jih v praksi zaradi motenj zelo težko vidimo. V resnici se spektralne črte razširijo dosti bolj, kot to kaže naravna širina (Dopplerjev pojav, trki med atomi).

## Doppler

Ko merimo svetlobo, ki prihaja iz gibajočega se atoma (ki seva), izmerimo premik v frekvenci:

$$\delta\omega_D = \frac{v_x}{c} \omega_0$$

Kjer je  $v_x$  hitrost gibanja atoma ( $x$ , 1d) in veliko manjše kot hitrost svetlobe, zato nerelativistično.

$$\begin{aligned} f_{v_x}(v_x) &= A e^{-\frac{mv_x^2}{2k_B T}} \\ 0 \neq \sqrt{\langle v_x \rangle} &\propto \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \\ \Rightarrow \delta\omega_D &\approx \frac{1}{c} \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \omega_0 \end{aligned}$$

Dobili smo Dopplerjevo razširitev spektralnih črt.

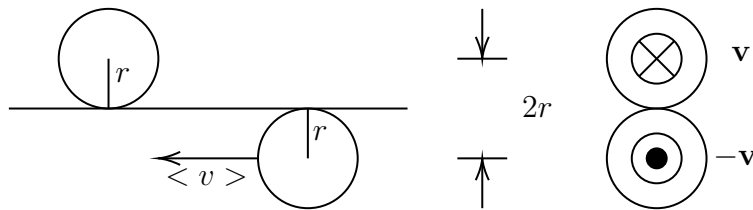
**Zgled:**  $H_2$  pri sobni  $T$ :

$$\delta\omega_D \approx 1.5 \cdot 10^{11} \frac{1}{s} \quad \delta\lambda_D \approx 2 \cdot 10^{-3} nm$$

Kar je veliko več (1000x) kot naravna širina.

### Trki

Imamo  $\delta\omega_C = \frac{1}{\tau_C}$  s karakterističnim časom  $\tau_C$  med dvema trkoma (c= collision). Ta je enak  $\tau_C = \frac{\langle l \rangle}{\langle v \rangle}$ , kjer je  $\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}$  (ali  $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$ ) in  $\langle l \rangle = \frac{1}{\pi(2r)^2 n} = \frac{k_B T}{\pi(2r)^2 p}$ .



Torej

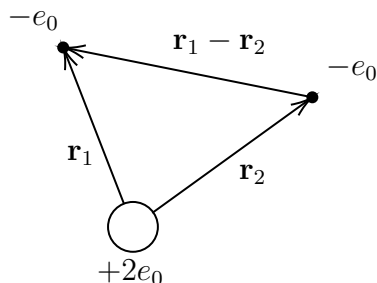
$$\delta\omega_C = \frac{1}{\tau_C} = 2\sqrt{\frac{2\pi}{mk_B T}} (2r)^2 p$$

je razširitev črte zaradi trkov.

**Zgled:** vodik pri sobni  $T$  in  $p = 1bar$  in dobimo  $\delta\omega_C \approx 1.4 \cdot 10^{10} \frac{1}{s}$ , kar je  $\approx 20x$  več kot naravna širina prve Lymanove črte. Oziroma  $\delta\lambda_C \approx 1.1 \cdot 10^{-4} nm$ . Vzeli smo kar  $r = r_0 = 0.137 nm$ .

## 6 Večelektronski atomi

Obravnava atomov v Schrödingerjevi teoriji postane bistveno zahtevnejša, ko imamo opravka z  $\geq 2$  elektronoma. Začnimo z  $Z = 2$  (Helij):  $2p^+2e^-2n$ .



Dvoelektronska valovna funkcija  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  mora zadoščati Schrödingerjevi stacionarni enačbi:

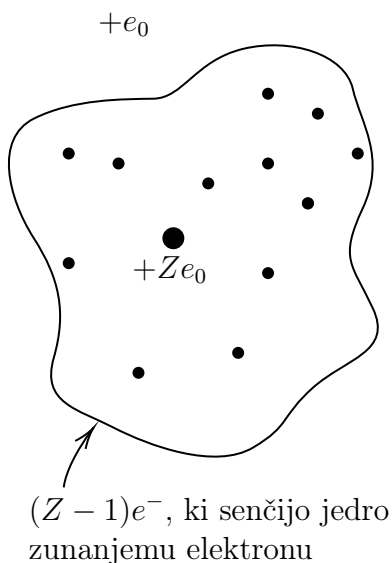
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \psi + V\psi = E\psi$$

Še splošnejši problem (poljuben  $Z$ ) je hujši:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \dots + \nabla_Z^2) \psi + V\psi = E\psi$$

$$V = -\frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^Z \frac{1}{r_i} + \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j}^Z \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

kjer je drugi del enačbe necentralni del,  $\frac{Z(Z-1)}{2}$  prispevkov. Privzemimo, da je odboj  $e^- - e^-$  samo popravek (da privlačni del gotovo prevlada, je na dlani, sicer ne bi imeli atomov). Lahko separiramo koordinate  $\mathbf{r}_1$  in  $\mathbf{r}_2$  in oba  $e^-$  obravnavamo kot neodvisna (independent particle model - IPM). To je zelo grobo, a lahko reč bistveno izboljšamo: mislimo si da ostalih  $Z - 1$  elektronov senči jedro izbranemu elektronu:

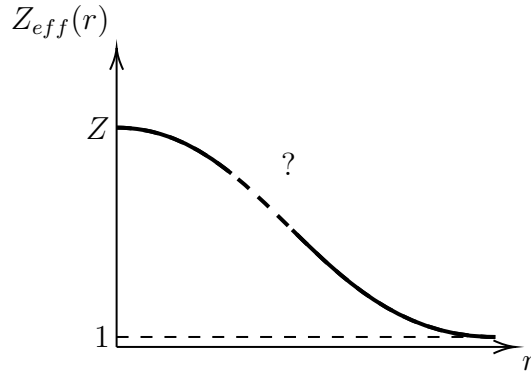




$$V_c(r) = \begin{cases} -\frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0} & r \rightarrow 0 \\ -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} & r \rightarrow \infty \end{cases}$$

Kjer je  $V_c(r)$  centralni potencial, ki ga v tem približku čuti vsak  $e^-$ . Oziroma

$$V_c(r) = -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} Z_{eff}(r)$$



Zdaj so elektroni razklopljeni, in neodvisno stanje vsakega od teh elektronov opisuje

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \psi_i(\mathbf{r}_i) + V_c(r_i) \psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \psi_i(\mathbf{r}_i)$$

in celotna potencialna energija sistema je  $V = \sum_{i=1}^Z V_i(\mathbf{r}_i)$ . Očitno je rešitev takšne separabilne Schrödingerjeve stacionarne enačbe kar valovna funkcija

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = \psi_1(\mathbf{r}_1), \psi_2(\mathbf{r}_2), \dots, \psi_Z(\mathbf{r}_Z)$$

in njena celotna energija je  $E = \sum_{i=1}^Z E_i$ . Vsaka od teh enodelčnih valovnih funkcij ima obliko

$$\psi_{nlm_l m_s}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \psi) \chi_{m_s}$$

in temu pravimo spinska orbitala. Posameznemu elektronu smo pripisali  $l, m_l$  ker smo delali s centralnim potencialom. Zato  $R_{nl}(r)$  zadoščajo enačbi

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} R_{nl} + \left( V_c(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} \right) R_{nl} = E_{nl} R_{nl}$$

Energije niso odvisne od  $m_l$ , ker imamo sferično simetrijo in hkrati tudi niso odvisne od  $m_s$ , ker nismo vključili spinskih efektov. Enoelektronske valovne funkcije ne bodo enake analognim rešitvam v  $H$ -atomu, ker  $V_c(r)$

ni coulombski. (Višji letniki): lasno valovno funkcijo  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$  se dejansko lahko poišče za skoraj poljuben (smiseln) potencial  $V_c(r)$  (Hartree-Fock).

**Zgled:**  $Z=2$  (Helij). Osnovno stanje  $He$  (ničla energije ustreza stanju  $He^{++}$  =jedro in dva elektrona, ki mirujeta v  $\infty$ ) ima  $-79.0eV$ . Najbolj grob približek je Schrödingerjeva stacionarna enačba z samo dvema privlačnima členoma:

$$V(r_1, r_2) = -\frac{2e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}$$

Osnovno stanje opišemo kot produkt dveh  $n = 1$  vodikovih valovnih funkcij:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) = \frac{e^{-\frac{r_1+r_2}{a}}}{\pi a^3}$$

kjer je  $a = \frac{a_0}{2} \approx \frac{r_B}{2}$ , ker je  $Z = 2$ . Potem je energija osnovnega stanja kar

$$E = 2E_1 = -2Z^2 E_{O0} = -108.8eV$$

Zanemarili smo odboj med elektronoma. Ocenimo (zelo grobo!):  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = 2a = a_0 = r_B$  in dobimo

$$\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = \alpha\hbar c \frac{\alpha m_e c}{\hbar} = \alpha^2 m_e c^2 = 2E_0 = 27.2eV$$

Z upoštevanjem tega zelo grobega ocenjenega odboja:  $-108.8eV + 26.2eV = -81.6eV$  (bolj srečno naključje kot ne). Rezultat lahko izboljšamo in uporabimo boljši približek za  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ . Predpostavimo, da je  $r_{12}$  povprečna razdalja med elektronoma, sorazmerna z oddaljenostjo od jedra  $r_{12} = \frac{r}{k}$ . Tako je celotna energija:

$$E = 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - (4 - k) \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Kjer je del enačbe dvakratna kinetična energija posameznega elektrona à la Bohr. V drugem členu sta združena dva coulombska privlaka in en odbojni člen.

$$\frac{\partial E}{\partial r} = 0 \Rightarrow r_0 \frac{2}{4 - k} k_B$$

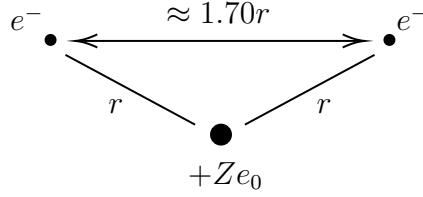
in

$$E = 2 \left( \frac{4 - k}{2} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2m_e r_B^2} - \frac{(4 - k)^2}{2} \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} = \frac{(4 - k)^2}{2} E_1$$

Od tod lahko "nafitamo"  $k$ :

$$E = \frac{(4 - k)^2}{2} E_1 \equiv -79.0eV \Rightarrow k \approx 0.59$$

Od tod sledi slikica  $r_{12} = \frac{r}{k} \approx 1.70r$



To je vse samo ilustracija jakosti efekto/za občutek.

## 6.1 Paulijevo izključitveno načelo

Pauli exclusion principle. V izbranem enodelčnem stanju je lahko en sam elektron oziroma posamezni elektroni morajo biti v enodelčnih stanjih, ki se med seboj razlikujejo vsaj po enem kvantnem številu. V kvantni mehaniki so delci nerazločljivi (indistinguishable), zaradi te lastnosti pa morajo imeti valovne funkcije določeno simetrijo, in za delce s polštetijskim spinom ( $1/2, 3/2, \dots$  to so Fermioni) mora biti valovna funkcija antisimetrična na zamenjavo dveh delcev:

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

Takoj se vidi, zakaj  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)$  ni dobra za  $2e^-$  v  $He$  atomu. Dobra je:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1))$$

ta je antisimetrična. Razvidna je tudi Paulijeva prepoved. V primeru  $\psi_1 = \psi_2$  dobimo  $\psi = 0$ . Posplošitev za večje  $Z$  potrebujemo Slaterjevo determinanto:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) \propto \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_1(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_1(\mathbf{r}_Z) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_2(\mathbf{r}_Z) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_Z(\mathbf{r}_1) & \psi_Z(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_Z(\mathbf{r}_Z) \end{vmatrix}$$

Polnjenje orbital:

$$H = (1s)^1$$

$$He = (1s)^2$$

$$Li = [He](2s)^1$$

$$Be = [He](2s)^2$$

$$B = [Be](2p)^1 \quad \dots \quad Ne = [Ne](2p)^6$$

toda:

$$Cr = [Ar](4s)^1(3d)^5$$

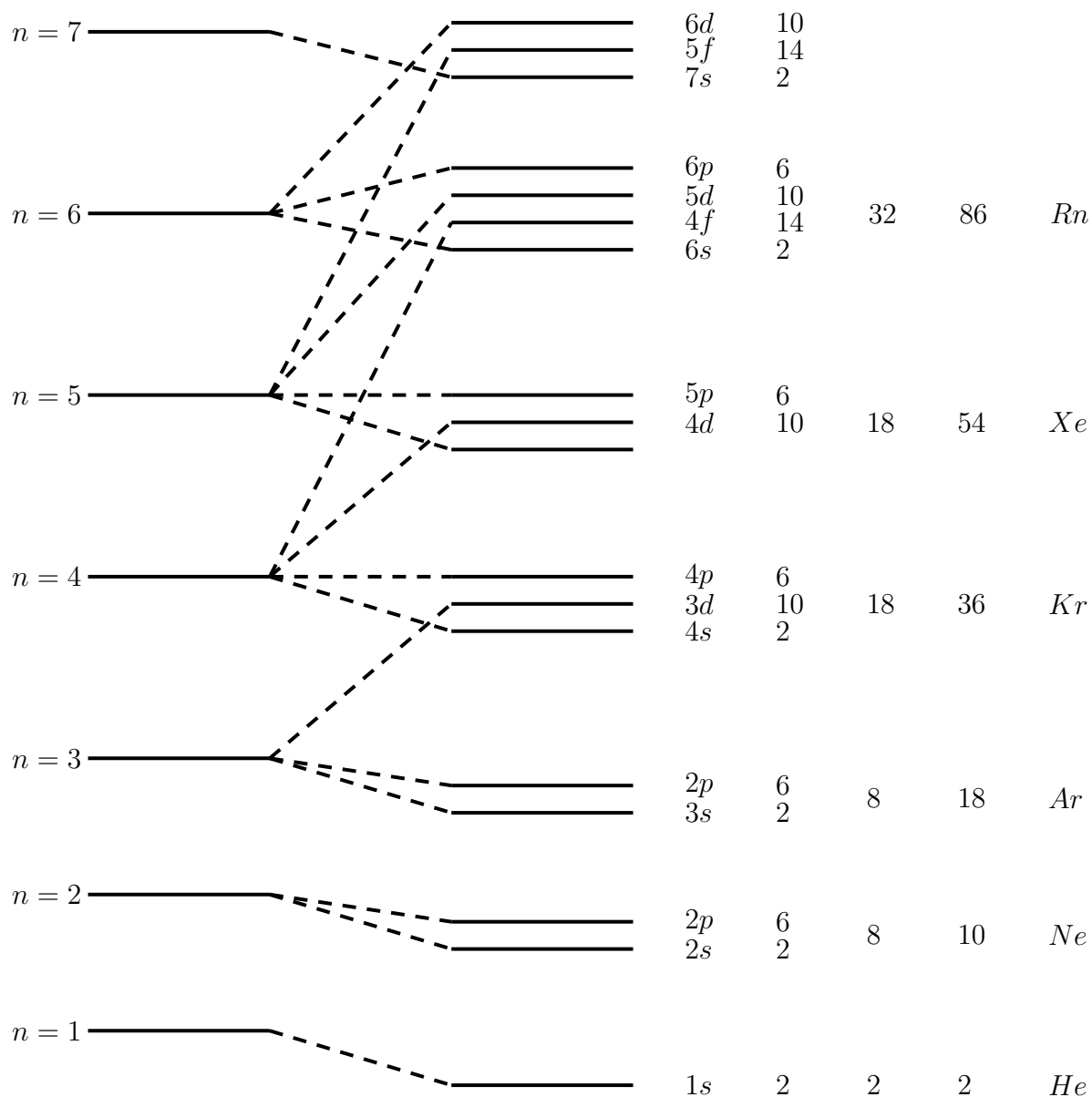
$$Mn = [Ar](3d)^5$$

$$Fe = [Ar](3d)^6$$

$$Co = [Ar](3d)^7 \quad \dots \quad Ni = [Ar](3d)^8$$

$$Cu = [Ar](4s)^1(3d)^{10}$$

$$Zn = [Ar](3d)^{10}$$



## 6.2 Vrtilna količina atomov

Skupna vrtilna količina v atomu je vektorska vsota vrtilnih količin posameznih elektronov:

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^Z \mathbf{L}_i \quad \mathbf{S} = \sum_{i=1}^Z \mathbf{S}_i \quad \mathbf{J} = \sum_{i=1}^Z \mathbf{J}_i$$

$L = 0, 1, 2, \dots$        $S = 0, 1, 2, \dots$  če  $Z$  sodo       $J =$  odvisno od  $Z$  liho/sodo  
 $S = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$  če  $Z$  liho

Trikotniška neenakost:

$$|L - S| \leq J \leq L + S$$

Tudi atome označujemo s spektroskopskimi oznakami:

$$^{2S+1}L_J$$

Kjer velja  $S(L=0), P(L=1), D(L=2), \dots$ . Naprimer

$$\begin{aligned} {}^2P_{3/2} : \quad & S = 1/2, L = 1, J = 3/2 \\ {}^1P_3 : \quad & S = 0, L = 3, J = 3 \end{aligned}$$

### 6.3 Ortohelij in parahelij

$Z = 2(2e^-)$ , dajemo jih na  $n = 1$  in  $n = 2$ . Skupni spin:

$$\begin{array}{cc} S = 0 & S = 1 \\ \text{spina } \uparrow\downarrow & \text{spina } \uparrow\uparrow \\ \text{parahelij} & \text{ortohelij} \end{array}$$

1. Oba elektrona v osnovnem stanju ( $n = 1 \rightarrow l = 0$ ):

$$S = 0 \quad L = 0 \quad J = 0$$

= 0 zaradi Paulija, ker je zadnja možnost, da se po čem razlikujeta  
 $\uparrow\downarrow m_s = \pm 1/2$ .

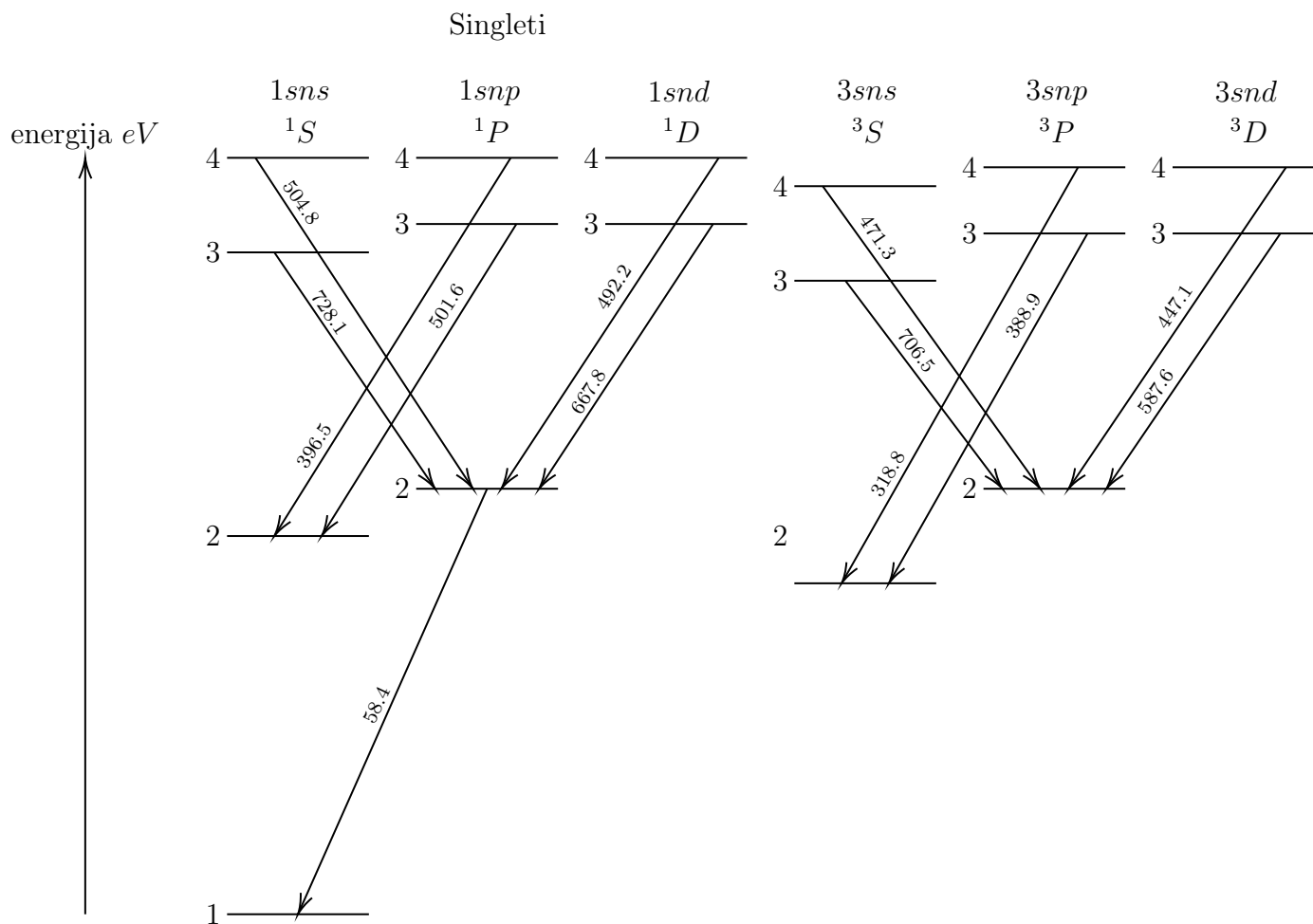
$$\Rightarrow {}^1S_0$$

2. enega od elektronov vzbudimo v  $n = 2 \rightarrow l = 0$  ali  $l = 1$ : Zato sta možni  $S = 0, 1$ , potem takem tudi  $J = 0, 1$ .

$$\begin{array}{ll} \text{parahelij } S = 0 : & J = L \rightarrow {}^1S_0, {}^1P_1 \\ \text{ortohelij } S = 1 : & \rightarrow {}^3S_1, {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \end{array}$$

3. Oba elektrona v stanju z  $n = 2$ :

$$\begin{array}{ll} \text{parahelij } S = 0 : & J = L \rightarrow {}^1S_0, {}^1P_1, {}^1D_2 \\ \text{ortohelij } S = 1 : & L = 0 \rightarrow {}^3S_1 \\ & L = 1 \rightarrow {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \\ & L = 2 \rightarrow {}^3D_1, {}^3D_2, {}^3D_3 \end{array}$$



## 6.4 Spektri sevanja atomov

Zaradi raznovrstnih možnih kombinacij  $L, S, J$  so spektri večine atomov zelo zapleteni, razen pri alkalnih atomih (en sam zunanji elektron).

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^Z \mathbf{L}_i + \mathbf{L}_e \quad \mathbf{S} = \sum_{i=1}^Z \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_e$$

Kjer  $\mathbf{L}_e$  in  $\mathbf{S}_e$  predstavljata valenčni elektron. Olajševalna okoliščina: sredica ne prispeva ne k  $\mathbf{L}$  ne k  $\mathbf{S}$ . Naprimer pri  $Na$ :

$$Na = \underbrace{(1s)^2(2s)^2(2p)^6}_{\text{sredica}}(3s)^1$$

$$(1s)^2 \uparrow\downarrow, (2s)^2 \uparrow\downarrow, (2p)^6 \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$$

Za projekcije velja

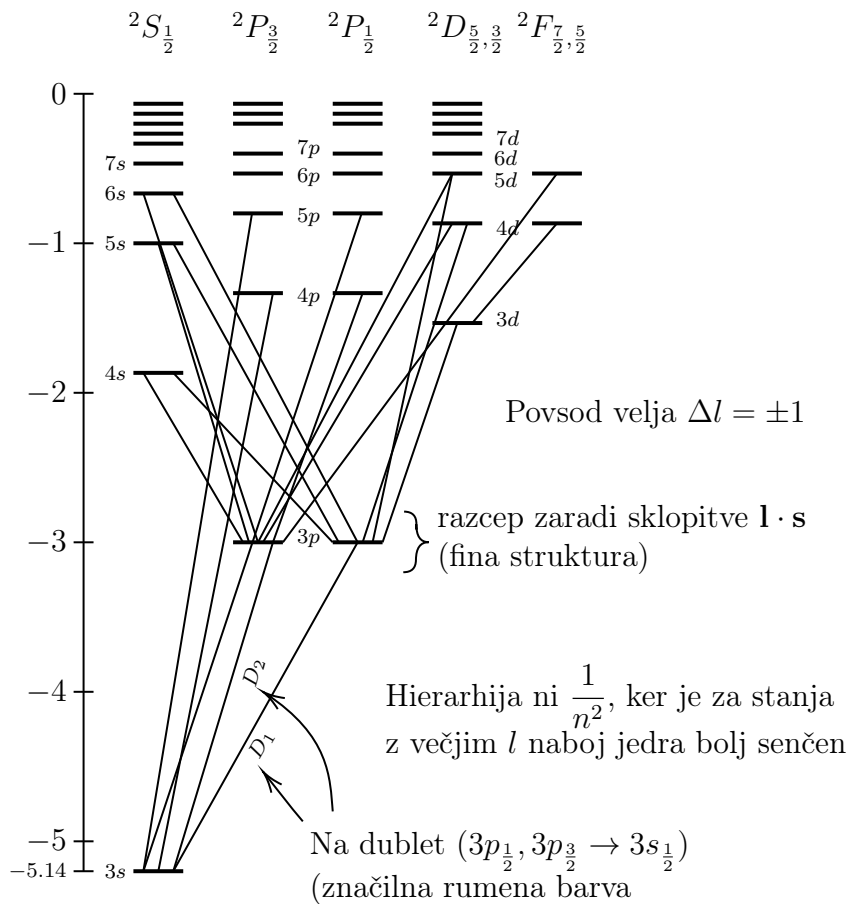
$$\sum_{i \in \text{sredica}} m_{l,i} = 0$$

$$\sum_{i \in \text{sredica}} m_{s,i} = 0$$

Torej tudi

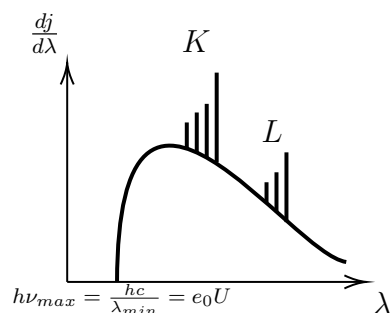
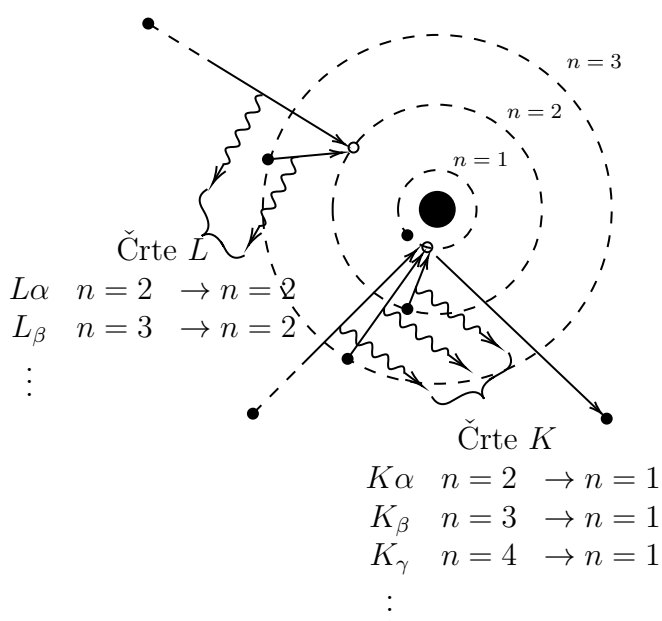
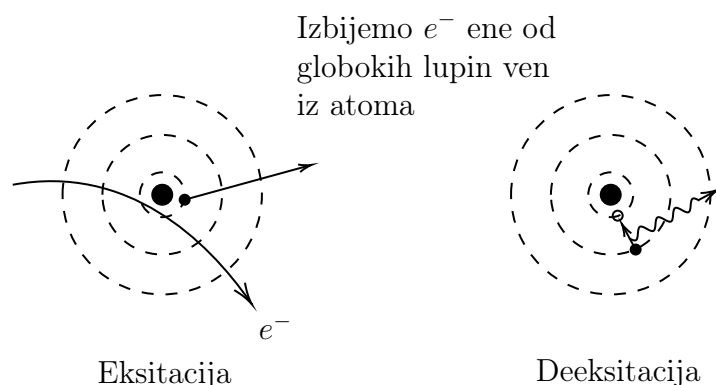
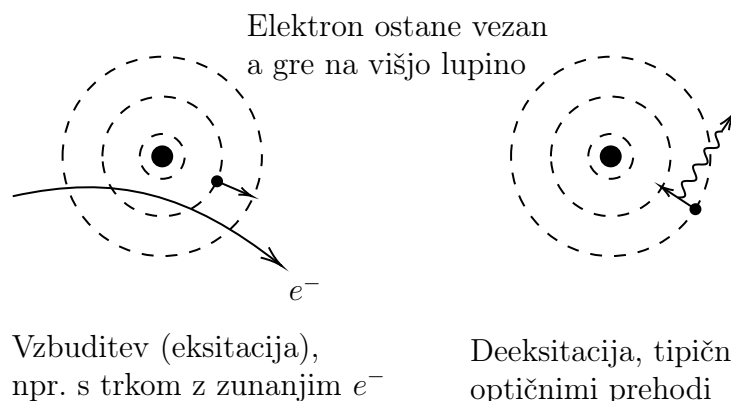
$$\sum_{i \in \text{sredica}} \mathbf{L}_i = \sum_{i \in \text{sredica}} \mathbf{S}_i = 0$$

sicer bi obstajale neničelne komponente. Pri alkalnih atomih imamo sredico zaključenih podlupin, ki jo lahko opišemo kot sistem v stanju z ničelno tirno in spinsko vrtilno količino, torej z oznako  $^1S$



## 6.5 Rentgenski spektri (drugič)

Pri prehodih, v katerih so udeleženi elektroni iz notranjih lupin, so energijske razlike bistveno večje in valovne dolžina izsevane svetlobe je tipično v UV ali celo v rentgenskem področju. Tipični mehanizmi:



To nam da špice na zvezni del RTG spektra, ki smo ga obravnavali na začetku leta (karakteristični vrhovi, naloženi na zvezni del spektra, ki ga povzroča zavorno sevanje

Pri črti  $K_\alpha$  tisti elektron na  $1s$ , ki čaka, da se k njemu naseli nov sosed z lupine  $2s$ , senči jedro. Torej elektron, ki pride iz  $2s$  vidi le  $(Z - 1)$  elektronov. To je Moseleyjev približek.

$$\Delta E = h\nu_{K_\alpha} = (Z - 1)^2 |E_1| \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3(Z - 1)^2}{4} |E_1|$$



tako dobimo Moseleyev zakon

$$\lambda_{K_\alpha} = \frac{4hc}{3(Z-1)^2|E_1|}$$

in bolj praktično:

$$\frac{1}{\lambda_{K_\alpha}} = \frac{(Z-1)^2}{\lambda_0}$$

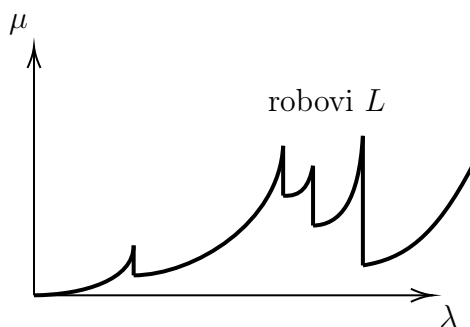
kjer je  $\lambda_0 = 121nm$  in ustreza  $\frac{3}{4}E_0 = 10.2eV$ .

### 6.5.1 Absorpcija rentgenskih žarkov

V bistvu gre za fotoefekt, svetloba izbija delce. Absorpcijo fotonov opišemo z eksperimentalnim zakonom:

$$\frac{dj}{j} = -\mu dx \rightarrow j(x) = j_0 e^{-\mu x}$$

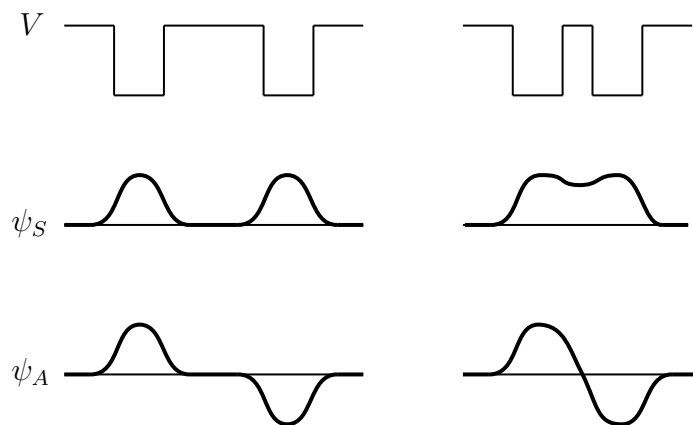
Absorpcijski koeficient  $\mu$  je odvisen od energije. Tipičen graf (na primer za svinec *Pb*)



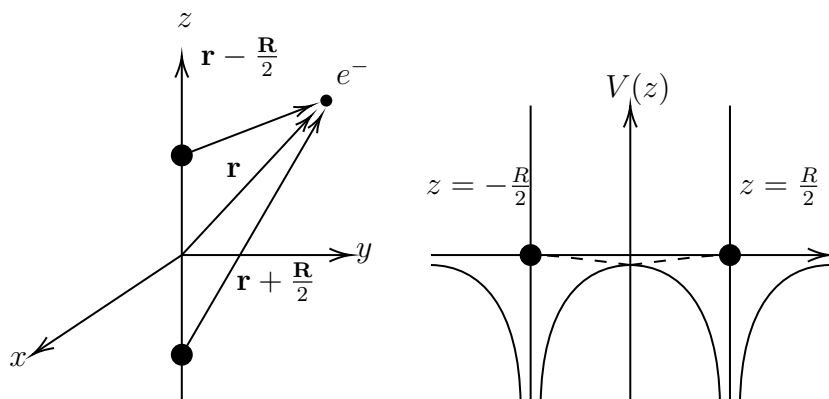
To so absorpcijski robovi (absorption edges), kjer  $\mu$  sunkovito naraste. Ker elektron izbijemo iz njegove lupine v  $\infty$ , je uporabna kar Moseleyjeva formula brez  $\frac{3}{4}$  oziroma dobimo  $\lambda_0 = 121nm \rightarrow 91.2nm$ .

## 7 Molekule

Predstava z dvema končnima potencialnima jamama



Born-Oppenheimer: razdaljo med jedroma fiksiramo ( $R$ ), ker so elektroni dosti lažji od protonov, zato se bistveno hitreje prilagodijo kakršn koli spremembi.



Schrödingerjeva stacionarna enačba:

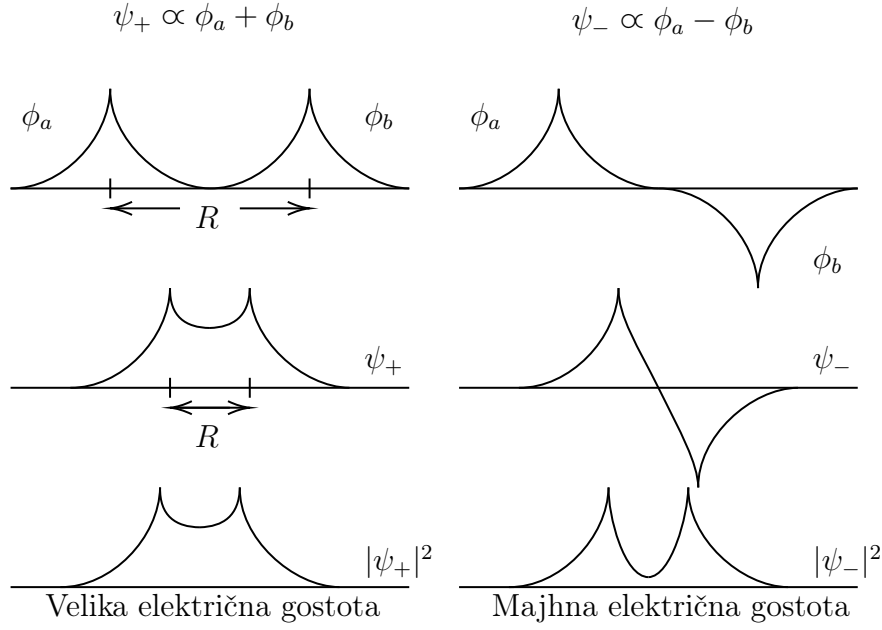
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}|} + \frac{ke^2}{R} \right) \psi_e(\mathbf{r}) = E_e \psi_e(\mathbf{r}) \quad k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

Iz simetrije vidimo

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}) &= P(-\mathbf{r}) \\ \Rightarrow |\psi(-\mathbf{r})|^2 &= |\psi(\mathbf{r})|^2 \\ \Rightarrow \psi(-\mathbf{r}) &= \pm \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Lastni valovni funkciji, ki zadoščata tej zahtevi:

$$\begin{aligned} \psi_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \phi_{1s} \left( \mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) + \phi_{1s} \left( \mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_a + \phi_b) \\ \psi_- &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \phi_{1s} \left( \mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) - \phi_{1s} \left( \mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_a - \phi_b) \end{aligned}$$



Tako zasnovani  $\psi_+$  in  $\psi_-$  nista eksaktni rešitvi stacionarne Schrödingerjeve enačbe (s tem potencialom). Takšni rešitvi obstajata, a tu nam gre za ilustracijo (Preceč računa za premalo haska).

$$E_{\pm} = \int \psi_{\pm}^*(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi_{\pm}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

Oznake:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 \quad V_a = -\frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}|} \quad V_b = -\frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}|} \quad V_R = \frac{ke^2}{R}$$

$$V = V_a + V_b + V_R$$

energija:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \int (\phi_a \pm \phi_b) (T + V_a + V_b + V_R) (\phi_a \pm \phi_b) d^3\mathbf{r}$$

$$\begin{aligned} \phi \text{ so lastne valovne funkcije za } H\text{-atom} &\Rightarrow (T + V_a)\phi_a = E_{1s}\phi_a \\ &\quad (T + V_b)\phi_b = E_{1s}\phi_b \end{aligned}$$

Povprečni coulumbski potencial med elektronom in jedrom na položaju  $a$  (pri  $\frac{\mathbf{R}}{2}$ ) in jedrom na položaju  $b$  (pri  $-\frac{\mathbf{R}}{2}$ ) in obratno:

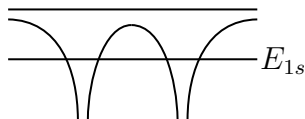
$$G = \int \phi_a^2 (V_b + V_R) d^3\mathbf{r} = \int \phi_b^2 (V_a + V_R) d^3\mathbf{r}$$

Tako imenovani prekrivalni člen (integrali), angleško overlap terms (integrals), in so ključni za vezavo:

$$S = \int \phi_a (V_a + V_R) \phi_b d^3\mathbf{r} = \int \phi_b (V_b + V_R) \phi_a d^3\mathbf{r}$$

Skupaj dobimo:

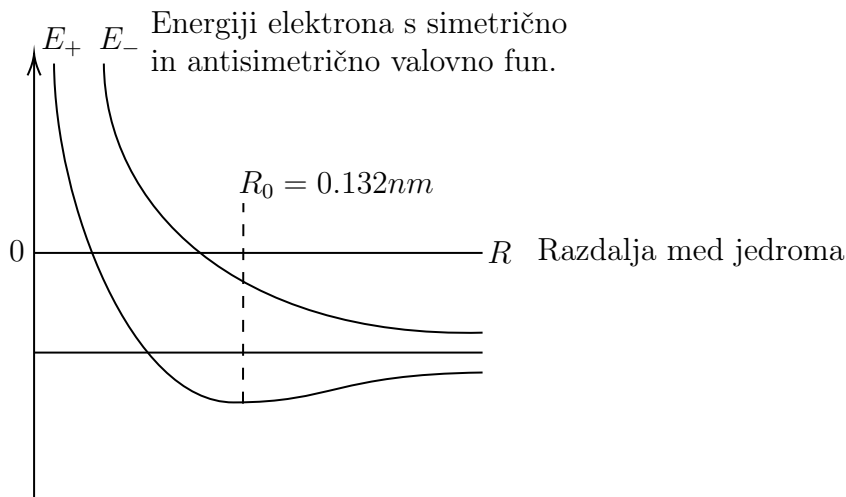
$$E_{\pm} = E_{1s} + G + S$$



Račun pokaže:

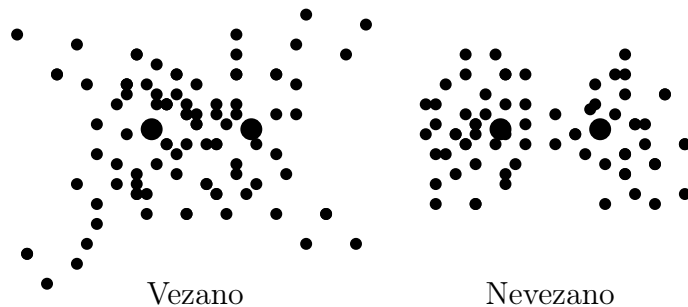
$$R \rightarrow \infty \Rightarrow \begin{matrix} G \rightarrow 0 \\ S \rightarrow 0 \end{matrix} \Rightarrow E_{\pm} \rightarrow E_{1s}$$

kot pričakujemo. Ko  $R$  zmanjšujemo,  $E_+$  in  $E_-$  začneta razlikovati in sta razmaknjeni za  $2S$ . Z vodikovimi valovnimi funkcijami je  $S < 0$ . Energija  $E_+$ , ki ustreza  $\psi_+$ , je nižja kot energija  $E_-$ , ki ustreza  $\psi_-$ . Čeprav je  $G > 0$ , je  $E_+$  nižja od  $E_{1s}$ , kjer je  $E_{1s}$  energija disociirane molekule (nevtralen  $H$  atom in preostali protoni v  $\infty$  razdalji). Molekulski ion  $H_2^+$  z valovno funkcijo  $\psi_+$  je vezan, stanje s  $\psi_-$  pa ne.



Pod črto:

$$|\psi_{\pm}|^2 = \frac{1}{2} (\phi_a^2 + \phi_b^2 \pm 2\phi_a\phi_b)$$

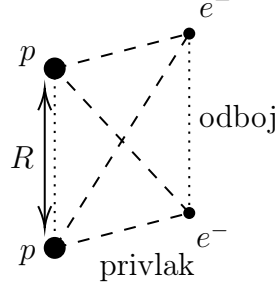


Lepotna napaka:

$$R \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_+ \rightarrow \phi_{1s} + \phi_{1s} = 2\phi_{1s}$$

Toda  $e^{-\frac{r}{r_B}}$  radi bi pa  $e^{-\frac{r}{2r_B}}$ .

## 7.1 Kovalentna vez: $H_2 = p + p + e^- + e^-$



1) Prvi približek: oba protona pri  $\mathbf{r} = 0$ : dva protona in dva elektrona kot v  $He$  atomu:

$$\psi(1, 2) = \phi_{1s}(\mathbf{r}_1)\phi_{1s}(\mathbf{r}_2)\chi^A(1, 2)$$

$$\chi^A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow_1\downarrow_2 - \downarrow_1\uparrow_2)$$

Kjer je  $\chi^A(1, 2)$  antisimetrična (singletna) spinska valovna funkcija.

$$\chi^A(2, 1) = -\chi^A(1, 2)$$

2) protona razmaknemo na  $\pm \frac{\mathbf{R}}{2}$ . Ali bi bila dobra takšna valovna funkcija:

$$\psi(1, 2) = \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2})\phi_{1s}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2})\chi^A(1, 2)$$

Nima "features", ki jih že poznamo in ni antisimetrična, torej ne bo dobra. Popravimo jo:

$$\psi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2})\phi_{1s}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) + \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2})\phi_{1s}(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \right) \chi^A(1, 2)$$

Kjer  $S$  pri  $\psi_S$  označuje singletno spinsko stanje.

3) druga varianta: simetrično tripletno spinsko stanje in antisimetrični krajevni del:

$$\chi_{m_s}^S(1, 2) = \begin{cases} \uparrow_1\uparrow_2 & m_s = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow_1\downarrow_2 + \downarrow_1\uparrow_2) & m_s = 0 \\ \downarrow_1\downarrow_2 & m_s = -1 \end{cases}$$

$$\psi_T(1, 2) = \frac{1}{2} \left( \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2})\phi_{1s}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) - \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2})\phi_{1s}(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \right) \chi_{m_s}^S(1, 2)$$

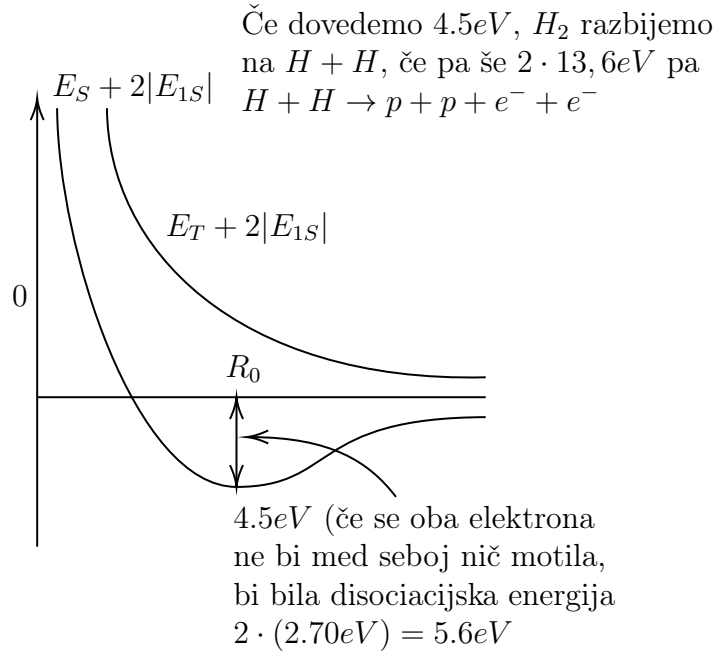
Kjer je  $T$  za tripletno spinsko stanje. Katera je dobra? (Katera naredi vezano stanje  $H_2$ :  $\psi_S$  ali  $\psi_T$ ?)

$$\begin{aligned}\rho_{S,T}^{(1,2)} &= |\psi_{S,T}(1,2)|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left( \phi_{1s}^2 \left( \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{1s}^2 \left( \mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) + \phi_{1s}^2 \left( \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{1s}^2 \left( \mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. \pm 2 \left( \phi_{1s} \left( \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{1s} \left( \mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right) \left( \phi_{1s} \left( \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{1s} \left( \mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right) \right)\end{aligned}$$

tretji člen je dodatna ali zmanjšana elektronska gostota med obema protonoma. Spet računamo energijo elektrona v stanjih  $\psi_S$  in  $\psi_T$ . Dobimo

$$E_{S,T} = 2E_{1s} + G' \pm S'$$

Izkaže se, da je  $E_S < E_T$ .  $E_T$  nima minimuma saj ni vezano,  $E_S$  ima minimum kot funkcijo  $R$  (in  $R_0$  definira medjedrski razmik).



4) Kaj pa če damo oba elektrona k “zgornjemu” ali oba k “spodnjemu” protonu?

$$\begin{aligned}\psi_S(1,2) &\rightarrow \psi_S(1,2) + \gamma \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \phi_{1s}^2 \left( \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{1s}^2 \left( \mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \phi_{1s}^2 \left( \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{1s}^2 \left( \mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right) \chi^A(1,2)\end{aligned}$$

Dobimo “ionsko strukturo”:  $(H^+, H^-)$  ali  $(H^-, H^+)$



Ionska vez

$$\gamma \approx 0.2$$

vez v  $H_2$  pretežno kovalentna,  
le čisto malo ionska

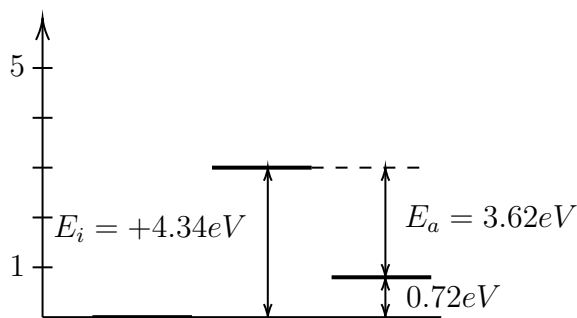
## 7.2 Ionska vez

Vodik ( $H$ ) in alkalni atomi ( $Li, Na, K, Rb, Cs$ ) imajo en sam elektron na zadnji lupini in eden od teh interagira s halogenim elementom ( $F, Cl, Br, I$ ), ki jim manjka en elektron do zaključene lupine. Prvi odda elektron drugemu, ki ga sprejme. Zakaj se to sploh zgodi?

**Primer:**  $KCl$ : da bi pokazali, da to lahko obstaja in je stabilno moramo pokazati, da je

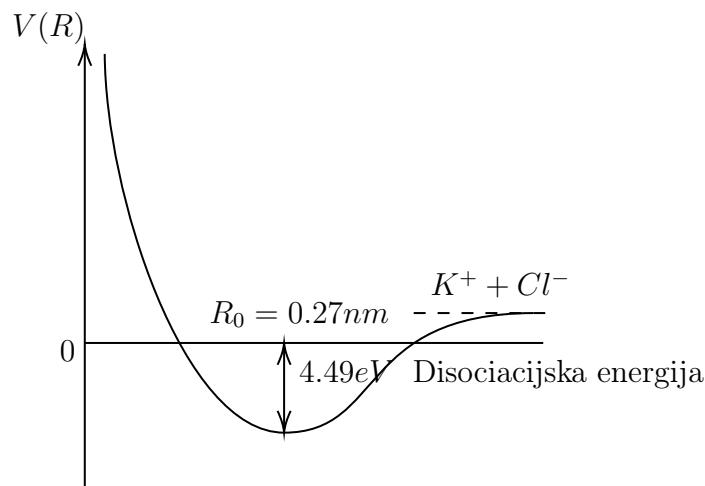
$$E(KCl) < E(K) + E(Cl)$$

atoma daleč vsaksebi in mirujeta temu rečemo energija  $\equiv 0$ .



Če bi bila to vsa zgodba,  $KCl$  ne bi nastala sama od sebe! Toda zdaj imamo elektrostatični privlak  $K^+ - Cl^-$ :  $-\frac{ke_0^2}{R}$  in  $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ . Ko je  $R \leq 2.8nm$ , postane ta negativni prispevek po absolutni vrednosti večji od  $0.72eV$ . Ko gre  $R \rightarrow 0$ , je sicer potencialna energija vedno bolj negativna (in ugodna za vezavo), toda pride do elektrostatskega odboja med elektroni iz oblakov in začne prijemati Paulijeva prepoved. Vse te efekte pospravimo pod streho v efektivni potencial:

$$V(R) = -\frac{ke_0^2}{R} + V_{odbojni}(R) + E_{ion} - E_{afin}$$



Ali je ta slika res tako preposta?

### Primer:

$$\begin{array}{ll} LiF & Li = (1s)^2(2s)^1 \quad F = (1s)^2(2s)^2(2p)^5 \\ W_i(Li) = 5.4eV & W_a(F) = 3.4eV \end{array}$$

En strošek je  $2eV$  kompenzira ga elektrostatski privlak. Če “bivši” litijev elektron res ves čas tiči ba fluoru, bi morala imeti molekula  $LiF$  ( $Li^+F^-$ ) električni dipolni moment:

$$p_e = -e_0 \left( -\frac{R_0}{2} \right) + e_0 \frac{R_0}{2} = e_0 R_0$$

Medatomska razdalja:  $R_0 = 0.156nm \rightarrow p_e = 2.5 \cdot 10^{-29} As \cdot m$  toda pričakovano je  $p_e = 2.11 \cdot 10^{-29} As \cdot m$ . To nakazuje, da je vez v  $LiF$  samo delno ionska in da se  $(2s)^1$  elektron iz litija sprai s fluorovimi iz  $(2p)$  orbitale in tvori kovalentno vez.

$$\begin{aligned} \psi(1,2) = & \left( A \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \phi_{2s} \left( \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{2p} \left( \mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) + \phi_{2s} \left( \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{2p} \left( \mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right) \right. \\ & + B \phi_{2s} \left( \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{2s} \left( \mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \\ & \left. + C \phi_{2s} \left( \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \phi_{2s} \left( \mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2} \right) \right) \chi^A(1,2) \end{aligned}$$

Normalizacija  $A^2 + B^2 + C^2 = 1$ . Pri  $H_2$  smo imeli  $B = C$  (tam vse  $1s$ ). Tu ni razloga za  $B = C$ , zato gotovo  $B \neq C$ , mi pa rečemo  $B = 0$  (da bi bila dva elektrona na  $Li$ , je zelo neverjetno). Pokažemo lahko:  $p_e = e_0 R_0 (C^2 - B^2)$ , kjer bi za  $H_2$  imeli  $B = C$  in  $p_e = 0$ , kaj je ok. Za  $LiF$  ostane le  $p_e = e_0 R_0 C^2$ , če nafitamo

$$e_0 R_0 C^2 = p_e(\text{pričakovano}) \Rightarrow C^2 \approx 0.85$$

$$C \approx 0.922$$

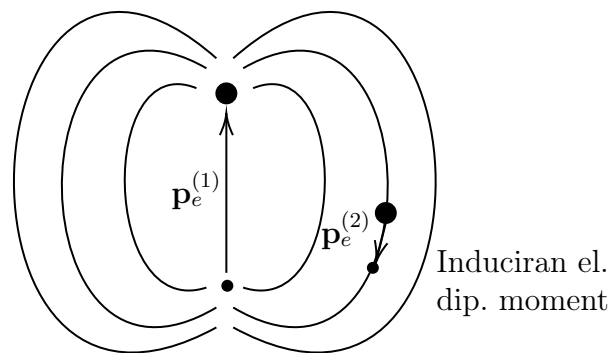
$$A^2 \approx 1 - C^2 = 0.15 \Rightarrow A \approx 0.387$$



Vez v  $LiF$  je  $\approx 85\%$  ionska in  $\approx 15\%$  kovalentna. Podobno igrico bi se lahko šli za druge dvoatomne molekule.

### 7.3 Van der Waalsova interakcija

Po zaslugi te interakcije imamo  $Ne_2, Ar_2, Kr_2, Xe_2$  in sorodne reči. Temelji na interakciji dveh dipolov. Ideja: v električno nevtralnem atomu imamo ves čas  $\sqrt{\langle p_e^2 \rangle} \neq 0$  (čeprav  $\langle p_e \rangle = 0$ ).



Dipolno polje:

$$E_d = \frac{p_e^{(1)}}{4\pi\epsilon_0 R^3}$$

$$\mathbf{p}_e^{(2)} = \alpha \mathbf{E}_d$$

Energij drugega dipola v polju prvega:

$$V = -\mathbf{p}_e^{(2)} \cdot \mathbf{E}_d$$

samo velikost:  $V = p_e^{(2)} E_d = -\alpha E_d^2 = -\alpha \frac{(p_e^{(1)})^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{R^6} = -\frac{\alpha q^2 a^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{R^6}$

$$V \propto -\frac{1}{R^6} \quad \Rightarrow \quad F = -\frac{dV}{dR} \propto \frac{1}{R^7}$$

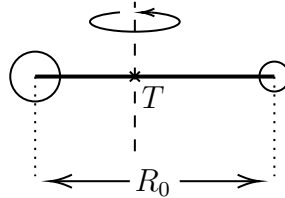
Van der Waalsova interakcija je sicer šibka, vendar ima daljši doseg kot eksponentno padajoča kovalentna vez. Pri žlahtnih atomih je to edina interakcija. Obratno pa Van der Waalsova interakcija obstaja tudi v molekula, ki se vežejo kovalentno ali ionsko, a tam je efekt zanemarljiv. Priljubljen potencial:

$$V(R) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\delta}{R} \right)^n - \left( \frac{\delta}{R} \right)^6 \right)$$

se imenuje Lennard-Jonesov potencial.

## 7.4 Vzbujena stanja in spektri molekul

### Rotacija



Rotacijska energija dvoatomne molekule:

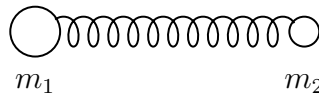
$$E_{rot} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_0^2} \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Ocena (red velikosti) za molekulo  $H_2$ :  $\mu = \frac{m_H}{2} \approx 469 \frac{MeV}{c^2}$ ,  $R_0 \approx 0.07 nm$  in  $\frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} \approx 7 \cdot 10^{-3} eV$ . Tipično:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} = \mathcal{O}(10^{-4} - 10^{-3} eV)$$

imamo rotacije (daljni IR ali mikrovalovi).

### Vibracija



Molekulske vibracije = 1d linearni harmonični oscilator. Stacionarna Schrödingerjeva enačba: po analogiji s  $H$  atomom pišemo  $U(R) = RF(R)$  in dobimo

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} d^2 U(R) R^2 + V(R)U(R) = E_{vib}U(R)$$

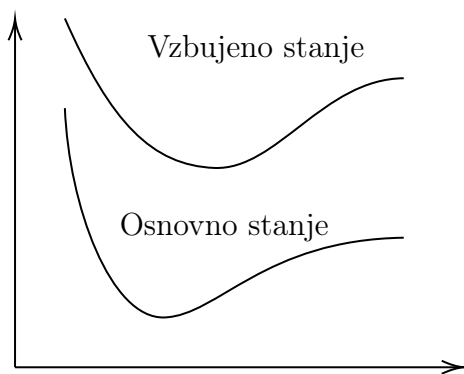
Odličen opis dovimo, če si namesto  $V(R) = \frac{1}{2}kR^2$  izberemo nekaj bolj realističnega: najbolj priljubljena oblika je (Morse)

$$V(R) = A \left( e^{-2a(R-R_0)} - e^{-a(R-R_0)} \right)$$

in dobimo  $E_{vib} = \mathcal{O}(10^{-1} eV)$  oziroma  $E_{vib} = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})$ , kjer je  $n$  vibracijsko kvantno število.

### 7.4.1 Spektri (dvoatomnih) molekul

- I čisti rotacijski ( $\Delta l = \pm 1$ ), brez spremembe vibracijskega ali elektronskega stanja, značilno  $\Delta E \approx 10^{-3}$
- II rotacijsko-vibracijski prehodi z  $\Delta n = \pm 1$  in  $\Delta l = \pm 1$ , značilne  $\Delta E \approx 10^{-1} eV$ .
- III elektronski prehodi (z možnimi dodatnimi rotacijskimi ali vibracijskimi) značilni  $\Delta E \approx 10 eV$ . Opomba: potencialna funkcija za vzbujena stanja ( $V(R)$ ) je v splošnem drugačna od tiste za osnovno stanje, drug  $R_0$  in druga konstanta vzmeti.



Energija splošnega molekulskega nivoja:

$$E = E_{el} + \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} l(l+1)$$

#### Prehodi I

Ti zahtevajo, da ima molekula neničelne  $\mathbf{p}_e$ .  $H_2$  ne gre,  $LiF$  je ok. Imamo izbirno pravilo

$$\Delta l = \pm 1$$

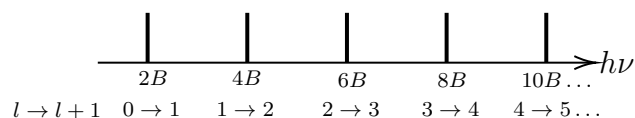
Absorpcija:  $l \rightarrow l+1 \Rightarrow$  energije prehodov:

$$h\nu = B((l+1)(l+2) - l(l+1)) = 2B(l+1)$$

Emisija:  $l \rightarrow l-1 \Rightarrow$  energije prehodov:

$$h\nu = B(l(l+1) - (l-1)l) = 2Bl$$

V obeh primerih se frekvence spreminjajo linearno z  $l$ . Spektralne črte so ekvidistančne, s frekvenčnim razmikom  $\Delta\nu = \frac{2B}{h}$ .



#### Prehodi II

Vibracijski prehodi ne morejo poteči v homonuklearni (dvoatomni) molekuli, naprimer  $H_2$ , če ni sočasno še spremembe elektronskega stanja. Lahko pa se zgodijo v molekulah s permanentnim  $\mathbf{p}_e$ , naprimer  $LiF$ , in v tem primeru sta izbiri pravili

$$\Delta n = \pm 1 \quad \Delta l = \pm 1$$

$$\text{Absorpcija: } \Delta n = +1 \quad \Delta l = +1$$

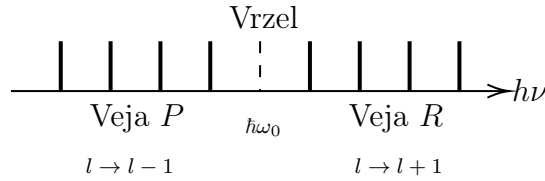
$$\begin{aligned} \text{Energijska razlika: } h\nu_R &= \hbar\omega_0 \left(1 + \frac{1}{2}\right) + B(l+1)(l+2) \\ &\quad - \hbar\omega_0 \frac{1}{2} - Bl(l+1) \\ &= \hbar\omega - 2B(l+1) \end{aligned}$$

ali

$$\text{Absorpcija: } \Delta n = +1 \quad \Delta l = -1$$

$$\begin{aligned} \text{Energijska razlika: } h\nu_P &= \hbar\omega_0 \left(1 + \frac{1}{2}\right) + B(l-1)l \\ &\quad - \hbar\omega_0 \frac{1}{2} - Bl(l+1) \\ &= \hbar\omega - 2Bl \end{aligned}$$

Indeksa  $P$  in  $R$ : dve veji spektra (P,R branch):



To je dobro za določitev konstante vzeti, kajti  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ .

### Prehodi III

$$\begin{aligned} h\nu_R &= E'_{el} - E_{el} + \hbar\omega'_0 \left(n' + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) + B'(l+1)(l+2) - Bl(l+1) \\ h\nu_P &= E'_{el} - E_{el} + \hbar\omega'_0 \left(n' + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) + B'l(l-1) - Bl(l+1) \end{aligned}$$

Ker je  $B \neq B'$ , se kvadratični členi v  $l$  ne pokrajšajo, spektri torej niso več ekvidistančni.