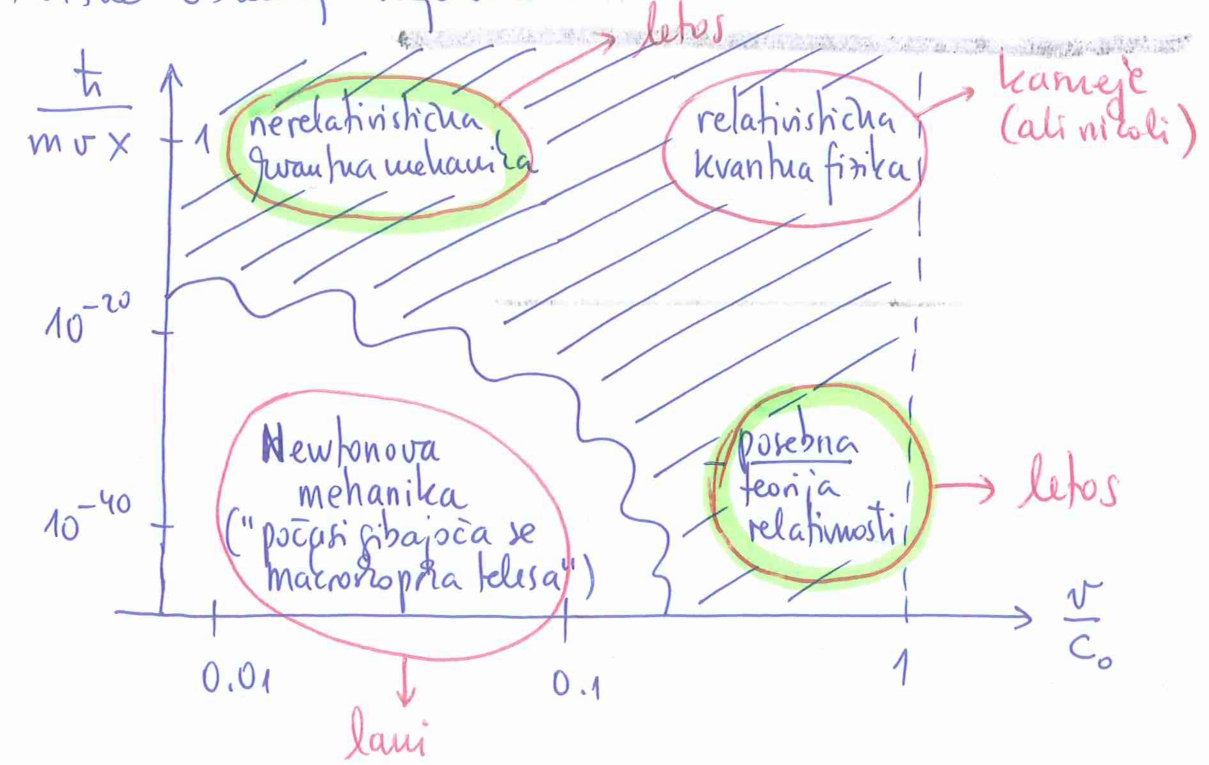
MODERNA FIZIKA I

Klasična fizika (1. letnik) obravnava — klasično fiziko :)

časovna opredelitev: pribl. do konca 19. stoletja

Glavne pridobitve: Newtonova (klasična) mehanika, termodinamika, Maxwellova teorija elektromagnetizma. Pri vseh teh se pojavijo težave pri opisu pojavov, ko pridemo do višjih hitrosti (primerljivih s svetlobno hitrostjo) in na majhne prostorske skale (primerljive z velikostjo atomov in molekul). Klasična fizika ima približno takšno območje veljavnosti:



(mvx) = produkt značilne gibalne količine telesa in njegove poti ali razsežnosti območja, kjer delec "biva"

$(\hbar) = h/2\pi$, kjer je h Planckova konstanta ($h = 6.6 \cdot 10^{-34}$ Js), ki je osnovna konstanta kvantnega sveta, o kateri bomo govorili. Za zdaj lahko povemo, da je zelo majhna, in to ima svoj pomen! O vsem tem kasneje.

(v/c_0) = razmerje značilne hitrosti za pojav, c_0 pa je hitrost svetlobe v vakuumu. Ta je definirana kot natančno

$c_0 \equiv 299\,792\,458$ m/s $\approx 3 \cdot 10^8$ m/s.

Najprej bomo govorili o posebni teoriji relativnosti. Obstaja namreč tudi splošna, ki vsebuje gravitacijo.

Teorija relativnosti

posebna (brez gravitacije) LETOS

splošna (z gravitacijo) HUDO

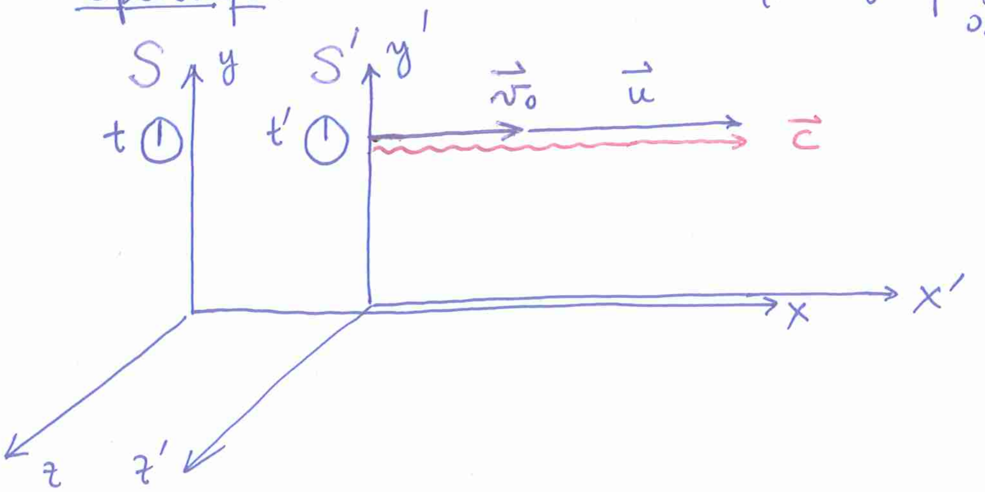
POSEBNA TEORIJA RELATIVNOSTI

V izhodišču vsega našega razmišljanja v tem poglavju je vprašanje veljavnosti fizikalnih zakonov za različne opazovalce, zlasti kadar se eden od njiju giblje glede na drugega. Iz klasične fizike vemo, da veljajo Galilejeve transformacije, na primer za zvok:

— hitrost zvoka za opazovalca, ki miruje glede na zrak (to je sredstvo, po katerem se zvok širi), je enaka $\vec{c}$

— za opazovalca, ki se giblje s hitrostjo $\vec{v}_0$ v smeri širjenja zvoka, pa je hitrost širjenja valovanja $\vec{u} = \vec{c} - \vec{v}_0$ (relativna hitrost sledi iz preproste aditivne operacije)

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



* S in S' se prekrivata ob $t=t'=0$ in tudi kasneje $\boxed{t=t'}$
To je "absolutni čas" in naša vsakdanja izkušnja!

* za izmerjene krajevne koordinate velja

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

obratna transformacija je seveda

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

Ker privzamemo $t' = t$ (!), je

$$\dot{x}' = \dot{x} - v_0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\ddot{x}' = \ddot{x}} \quad (!)$$

"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 reč.

To je galilejska invarianca:

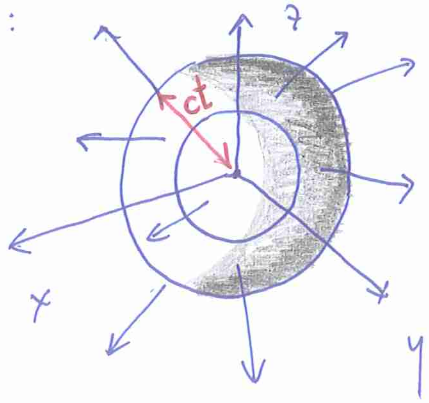
zaenkrat točneje: "mehanike"

Osnovni zakoni fizike so enaki v vseh sistemih, ki se drug glede na drugega gibljejo nepospešeno.

∴ Opazovalec v zaprti škatli ne more z nobenim (mehanskim) poskusom ugotoviti, ali miruje ali se giblje glede na npr. "absolutno mirujoč" sistem, kakršne so npr. zvezde stalnice. Tudi če vidi skozi okno, ne more ugotoviti, ali se gibljejo zvezde ali on.
$\Rightarrow$ "absolutna hitrost" je pojem, ki nima smisla

12'

Na težave pa naletimo v elektrodinamiki: Maxwellove enačbe in enačba za Lorentzovo silo, $\vec{F} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$, niso invariantne na Galilejeve transformacije! To bomo morda večkrat preverili (seminar, vaje, domača naloga), zaenkrat pa se zadovoljimo z naslednjim zgledom. Predstavljajmo 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 $x^2+y^2+z^2=c^2t^2$ ali

$$-c^2t^2+x^2+y^2+z^2=\cancel{0},$$

"ugotovljeno" v sistemu $S=(t,x,y,z)$. V sistemu $S'=(t',x',y',z')=(t,x-v_0t,y,z)$ pa "ugotovimo"

$$-c^2t'^2+x'^2+y'^2+z'^2 = -c^2t^2+(x-v_0t)^2+y^2+z^2$$

$$= \underbrace{-c^2t^2+x^2+y^2+z^2}_{0} + v_0t(v_0t-2x)$$

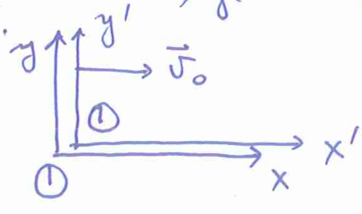
$$\neq 0 \; !$$

Pri svetlobi se torej 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! To nas bo pripeljalo do premišljanja, ali svetloba morda za svoje razširjanje prav tako ne potrebuje nekega sredstva. Temu hipotetičnemu sredstvu so sprva rekli: **ETER**. Preden se posvetimo vprašanju obstoja ali neobstoja oz. potrebnosti in nepotrebnosti etra, povejmo, kaj točno mislimo z nepospešenimi sistemi, ki smo jih obravnavali pri Galilejevih transformacijah.

15'

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. (Tedaj je potrebna splošna teorija relativnosti.) Ure moramo razmestiti po koord. sistemu in jih umeriti oz. sinhronizirati. Npr. v sistemih S in S' (hitrost v_0) glavni uri v izhodiščih umerimo pri $t=t'=0$



Ali je Zemlja "dober" inercialni sistem?

* Sam statični pospešek g je npr. pri poskusih s kitrimi delci popolnoma nepomemben, ker so spremembe težnostnih potenc. energij pri tako majhnih masah delcev povsem zanemarljive. (Masivnih teles pa ne moremo pospeševati $\to c$ razen v miselnih poskusih.)
* g (na polu) $= 9.83245\ m/s^2$ (@ sea level) + efekt zaradi rotacije Zemlje, na ekvatorju $-\omega^2 R_Z \approx -0.034 \frac{m}{s^2}$ kar lahko običajno zanemarimo

Kaj pa gibanje Zemlje okrog Sonca?

Zemlja okrog Sonca : $\omega \approx 2 \cdot 10^{-7}/s$, $-\omega^2 d_{ZS} \approx -0.006\ m/s^2$

(še en red velikosti manj)

$v = \omega d_{ZS} \approx 30\ km/s$ ← to bomo še večkrat potrebovali v nadaljevanju

$d_{ZS} = 150 \cdot 10^6\ km$

Naša galaksija?

Pospešek Sonca okrog središča galaksije je $\approx 3 \cdot 10^{-10} m/s^2$

$\Rightarrow$ sistem "zvezd stalnic" oz. sistem "povprečja porazdelitve snovi po vesolju" sta dobra inercialna sistema za praktično rabo! NB S tem nismo rekli, da je tak sistem "absoluten" ali "odlikovan"... samo to, da je inercialen.

Zakaj se toliko ukvarjamo s temi inercialnimi ali "absolutnimi", "odlikovanimi" sistemi? Ne glede na to, da so zvočni valovi longitudinalne oscilacije samega sredstva, elektromagnetni valovi pa oscilacije el. in mag. polj, so $\boxed{\text{podobnosti}}$ med obema tipoma valovanj sugerirale, da tudi EM valovanje (svetloba) za svoje razširjanje potrebuje sredstvo. To sredstvo je bilo znano kot ETER in naj bi imelo prav posebne lastnosti.

$\Downarrow$

ista (valovna) enačba, $u_{tt} = c^2 u_{xx}$, le c je drugačna...

20'

"Svetlobonosni eter" ("Luminiferous [A]ether")

Imeti bi moral neverjetne lastnosti:

→ prazen prostor bi moral izpolnjevati z neprisotno napetostjo (tension), da bi bila svetlobna hitrost povsod c_0 (kot v valovnu)
 ~ podobno kot napeta struna: po nenapeti se ne širi nič;

→ moral bi imeti ∞ togost (stiffness) in biti nestisljiv, tako da ne bi bile možne longitudinalne motnje, obenem pa ne bi smel pomeniti nobene ovire gibanju običajnih (makroskopskih, snovnih) teles.

⇒ $\boxed{\text{ETER = mehansko sredstvo za širjenje svetlobe brez mehanskih lastnosti v navzočnosti snovi (danes vemo, da je to ≈ VAKUUM)}}$

Eter implicira, da motnje v sredstvu potujejo skozi sredstvo. To pomeni, da lahko govorimo o hitrosti širjenja valovanja glede na to sredstvo. ⇒ Eter bi potemtakem lahko predstavljal absolutni koordinatni sistem, v katerem bi se EM valovi gibali s hitrostjo c_0. ⇒ Ker obstoj EM valov napovedujejo Maxwellove enačbe, bi to pomenilo, da eter predstavlja edinstveni sistem, v katerem te enačbe veljajo; v vsakem drugem (gibajočem se) sistemu pa bi imeli te takšni drugačno obliko in svetloba drugačno hitrost.

To je vodilo v vrsto poskusov, s katerimi so želeli potrditi ali zanikati obstoj etra. Glavni delovni hipotezi sta bili
a) eter je "pripet" na celotno vesolje (oz. na sončni sistem na naši skali) in b) eter je pripet na zemljo.

→ zvezdna aberacija (Bradley, Airy)
→ Fresnelov / Fizeaujev poskus (ether drag)
→ Michelson-Morleyjev poskus

Zvezdna aberacija

Leta 1725 je brit. astronom Bradley poskušal meriti oddaljenosti zvezd z meritvijo navidezne spremembe njihovega položaja, ko je zemlja krožila okrog sonca. Hotel je uporabiti premer zemljine orbite kot osnovnico za "triangulacijo". Opazil je efekt, vendar je ugotovil, da ni bil paralaksa: odvisen je bil ne od položaja zemlje, ampak od gibanja (= hitrosti) zemlje na vsaki točki na njeni orbiti. (Pravi efekt paralakse je za večino zvezd izredno majhen oz. nemerljiv.)

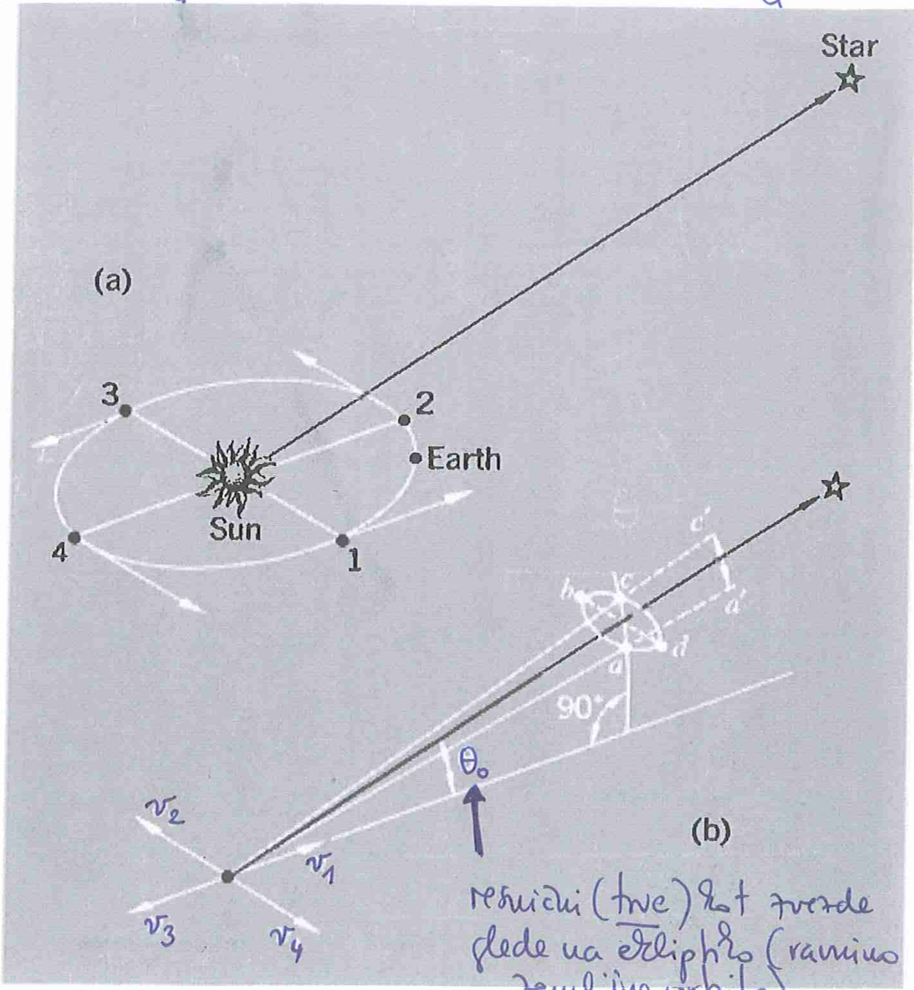
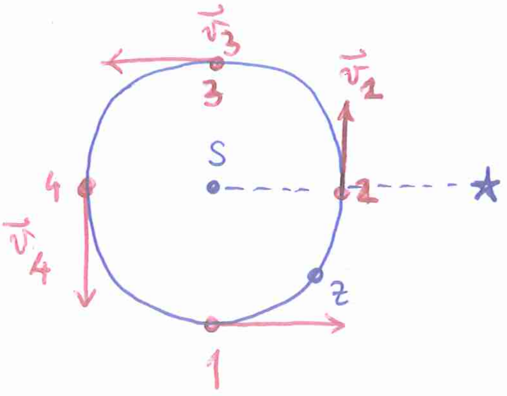
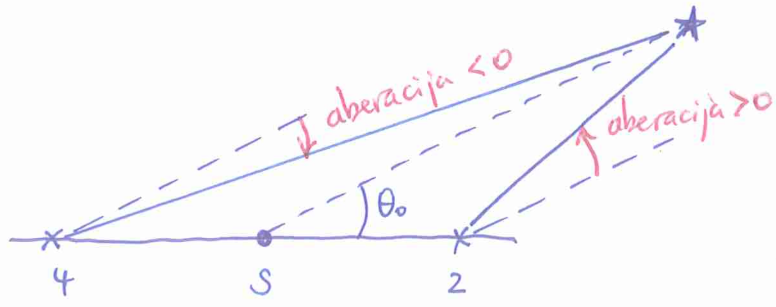


Fig. 2–1 Stellar aberration. (a) A distant star is viewed from the succession of positions 1-2-3-4 as the earth moves around the sun. (b) In a coordinate system attached to the earth (but with the direction of the axes fixed in space), the apparent position of the star follows the elliptical path a-b-c-d. The effect depends on the changes in the direction of the earth's velocity, not on the changes in its position as such.

Od zgoraj:

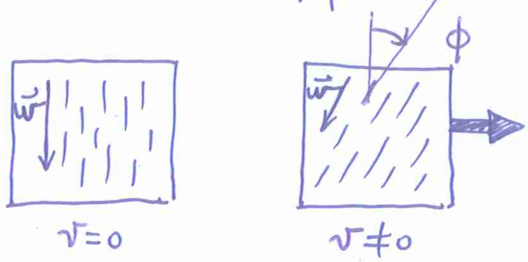


Od strani:



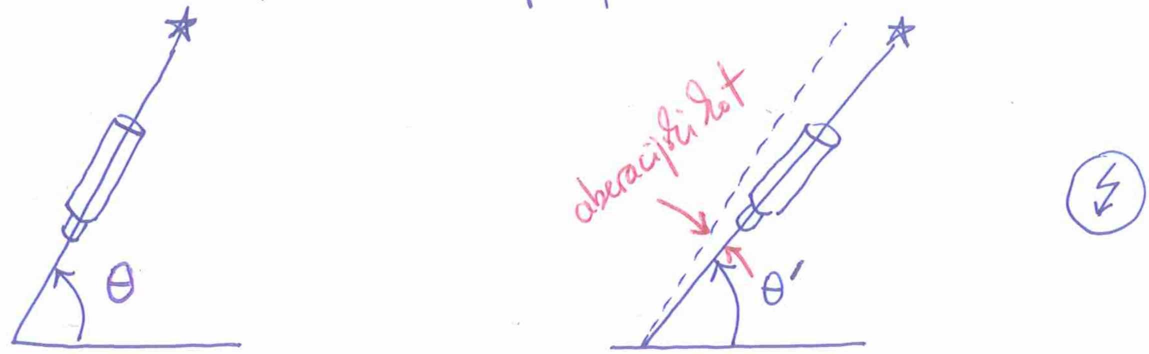
Ker Zemlja spreminja svoj položaj, bi pričakovali največjo višino (naklonski kot) z Zemljo na točki 2 in najmanjši z Zemljo na točki 4. Bradley pa je ugotovil, da je višina max. v točki 3 in najmanjša v točki 1.

Pojav ima klasično razlago, vsaj v vodilnem redu. Situacija je taka, kot da bi opazovali dežne kaplje skozi okno vlaka, ki se giblje ali ne giblje:



$$\tan\phi = \frac{v}{w}$$

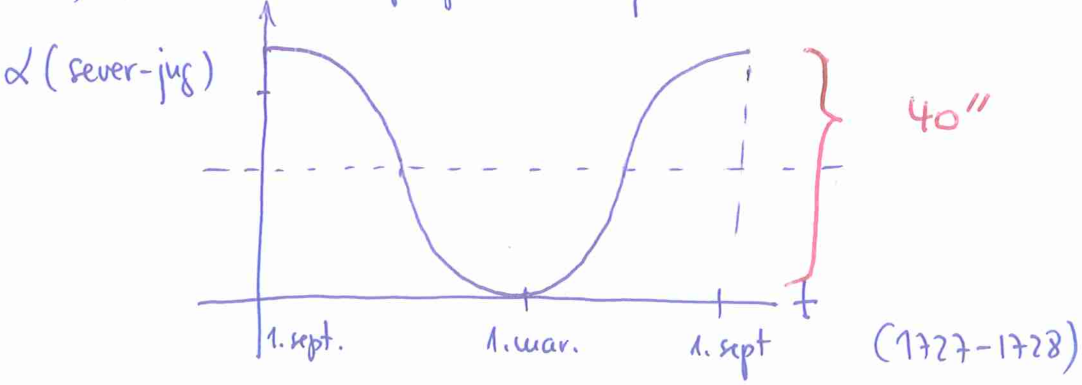
(ali pa če hodimo z dežnikom, ga moramo držati malo naprej, da nas ne zmoči). Pri teleskopu je enako:



če bi Zemlja mirovala — ker se Zemlja giblje

Aberacije ne bi nikoli zaznali, če bi se Zemlja glede na zvezdo vselej gibala z enako hitrostjo. Tako pa se spreminja skozi leto in navidezna lega zvezde opiše elipso (če pa je zvezda točno v zenitu, pa krožnico). Na položajih 2 in 4 je hitrost Zemlje $\perp$ na zveznico med Soncem in zvezdo, in tam ima aberacijski kot največji vrednosti $\pm v/c$ (velika polos elipse). Na položajih 1 in 3 imamo situacijo kot na sliki ⚡, tako da je tam aberac. kot omejen s $\pm v \sin\theta_0/c$ (mala polos elipse). Dolžina velike polosi $(2v/c)$ je enaka za vse zvezde; dolžina male polosi $(2v\sin\theta_0/c)$ je odvisna od dejanskega položaja θ_0; v limiti $\theta_0 = 90°$ dobimo krog.

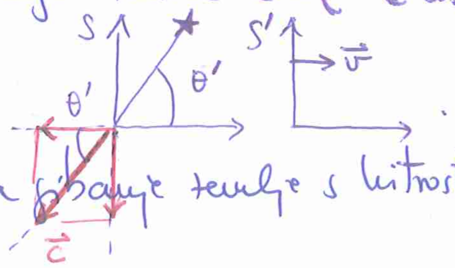
Bradley je opazoval γ Draconis in opazil letno oscilacijo aberac. kota natančno po pričakovanjih:



*(gledal je le sever-jug komponento, vzhod-zahod je težje, ker si enkrat na isti strani kot sonce). NB Tedaj c še ni bila dobro znana, zato je opaženi pojav izkoristil za "meritev" c, medtem ko je bila hitrost Zemlje, v, razmeroma dobro znana.

Danes vemo, da je Bradley izmeril samo nerelativistično limito pravilne transformacije med gibajočima se sistemoma. Če je S sistem, pripet na Sonce, S' pa sistem, pripet na Zemljo, bi v S izmerili komponenti hitrosti svetlobnega žarka $\vec{c} = (-c\cos\theta, -c\sin\theta)$

$$\tan\theta = \frac{c_y}{c_x}$$



in če bi upoštevali Galilejevo transf. za gibanje Zemlje s hitrostjo v, bi dobili

$$c'_x = c_x - v$$
$$c'_y = c_y$$

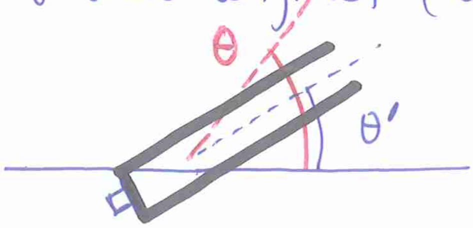
in na gibajoči se Zemlji bi ugotovili

$$\tan\theta' = \frac{c'_y}{c'_x} = \frac{c_y}{c_x - v} = \frac{-c\sin\theta}{-c\cos\theta - v} = \frac{+\sin\theta}{\cos\theta + \frac{v}{c}}$$

Če je zvezda pribl. v zenitu, se da tole malo razviti in dobimo

$$\boxed{\tan(\theta - \theta') \approx \frac{v}{c}} \qquad \theta' < \theta$$

kar je klasični rezultat. θ je malce večji kot θ', teleskop je treba pomakniti v malo nižji kot (kot pri dežju in dežniku):



Zanimivejša je morda obratna transformacija: kje je dejansko zvezda (θ), če jo vidimo s teleskopom točko pod kotom θ' z Zemlje? Dobimo jo tako, da enostavno obrnemo predznak hitrosti v in zamenjamo $\theta \Leftrightarrow \theta'$:

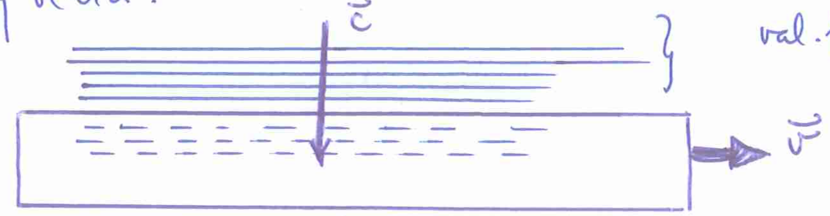
$$\tan\theta = \frac{\sin\theta'}{\cos\theta' - \frac{v}{c}}$$

Danes vemo, kot rečeno, da je Bradley izmeril le nerelativist. limito, pravilni izraz, ki pride od pravilnega relativističnega seštevanja hitrosti, je

$$\boxed{\tan\theta = \underbrace{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\,\frac{\sin\theta'}{\cos\theta' - \frac{v}{c}}}$$

tole je praktično 1 in neumerljivo majhno; ostalo pa je važno in tako moramo še danes pociljati teleskope – v sodobnih je to že sprogramirano, samo pritisnemo, katero zvezdo hočemo gledati.

Analogija z dežnimi kapljicami torej deluje. Kaj pa za valove? Tudi OK, če si mislimo, da valovi potujejo skozi eter, ki ga Zemljino gibanje popolnoma nič ne moti. Če pa bi se, denimo, eter "vozil" z Zemljo, da bi ga Zemlja "odnašala" s seboj, aberacije ne bi smeli videti! Groba analogija: valovi, ki vpadajo na gibajoč se vlak. Če bi spreminjali hitrost vlaka, ne bi smeli opaziti nobene spremembe v smeri širjenja vala znotraj vlaka:



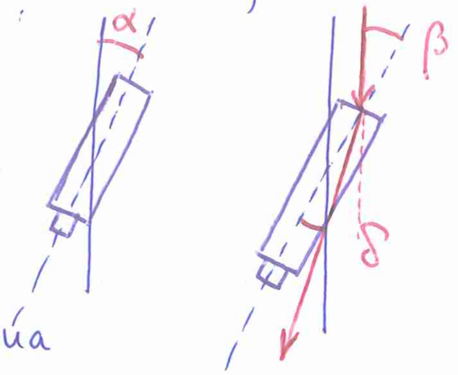
$\Longrightarrow$ etra, ki bi se "lepil" na Zemljo ali se ga fiksno držal, ni. Če že $\exists$, mora biti povsod po vesolju. A tako, da ga Zemlja ne moti?

Airyjev poskus z vodo v teleskopu

Denimo, da nas zanima zvezda, katere resnični elevac. kot je $\theta_0 = 90°$ glede na ekliptiko. Naj bo aberacijski kot α; od prej vemo, da je $\alpha \approx v/c$. Zdaj pa si zamislimo, da teleskop napolnimo z vodo ($n = 1.33$). Ker svetloba v snovi potuje počasneje kot v vakuumu ali zraku, bi pričakovali, da bo čas potovanja po cevi za faktor n daljši, torej bi morali nagniti teleskop za $\beta = nv/c$. Ampak žarek se pred vstopom v vodo lomi, tako da je

$$n = \frac{\sin\beta}{\sin\delta} \approx \frac{\beta}{\delta}$$

(koti na sliki močno povečani!)



Torej moramo popraviti kot δ na

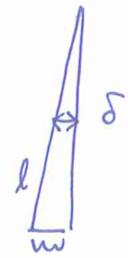
$$\delta \approx \frac{v}{c/n} = \frac{nv}{c} \Rightarrow \beta \approx n\delta \approx \frac{n^2 v}{c} \qquad \alpha \approx \frac{v}{c}$$

oziroma

$$\boxed{\beta - \alpha \approx (n^2 - 1)\frac{v}{c}}$$

Za toliko bi bilo treba še dodatno nagniti teleskop k manjšemu kotu. (torej povečati aberacijo). Airyjev poskus iz leta 1871 je pokazal, da ni bilo nobene spremembe v navideznem položaju zvezde!

~> Razlago je imel Fresnel že leta 1818, ko je predpostavil, da snov delno "vleče" eter s seboj (partial drag). Denimo, da voda "vleče" svetlobo v smeri z deležem f svoje hitrosti (v). Airyjev poskus je pokazal, da je β enak prvotnemu aberac. kotu, $\beta = \alpha$, torej $\delta = \alpha/n$ (samo zaradi loma, ki je dejstvo). Naj bo dolžina teleskopa l. Potem je čas t za potovanje svetlobe po z vodo napolnjeni cevi enak $t = nl/c$. V času t se teleskop premakne za razdaljo vt. Če naj pride svetloba ven na dnu, se mora premakniti žarek za to razdaljo. %

Ideja je ta, da to razdaljo nastane iz komponente zaradi loma, približno $l\delta$ v približku majhnih kotov, 

$l \tan\delta \approx l\delta$

⊕ $f \cdot v \cdot t$ zaradi "draga" v vodi:

$$vt = l\delta + fvt$$

ker je de facto $\alpha = \beta$!

A ker je $l = ct/n$ in $\delta = \alpha/n = v/nc$, dobimo

$$v\cancel{t} = \frac{\cancel{ct}}{n}\underbrace{\frac{v}{nc}}_{\frac{\alpha}{n}} + fv\cancel{t} \Rightarrow \boxed{f = 1 - \frac{1}{n^2}}$$

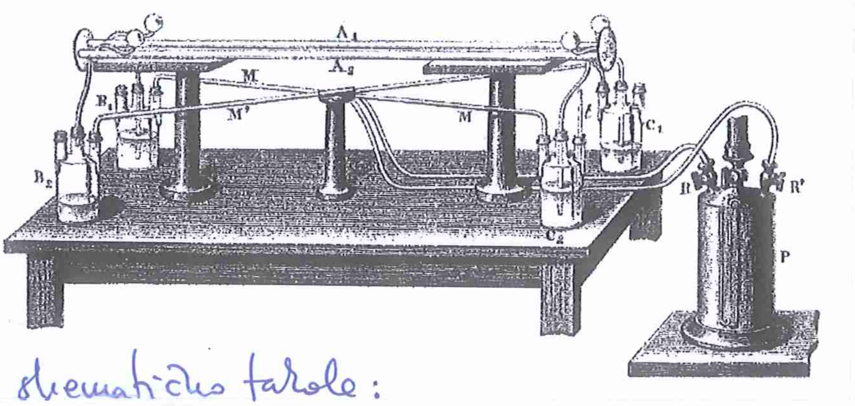
Fresnel's "drag coefficient"
(Fresnelov koeficient "vleka")

? Mar ni čudno, da bi narava zagotovila prav takšen koeficient, da bi Airyjev poskus (in še drugi) dal enak rezultat, kot da bi bila Zemlja negibna glede na eter? Ali obstaja kak eksperiment, ki bi potrdil "ether drag" kot pozitiven efekt, ne le kot izid ničelnega poskusa?

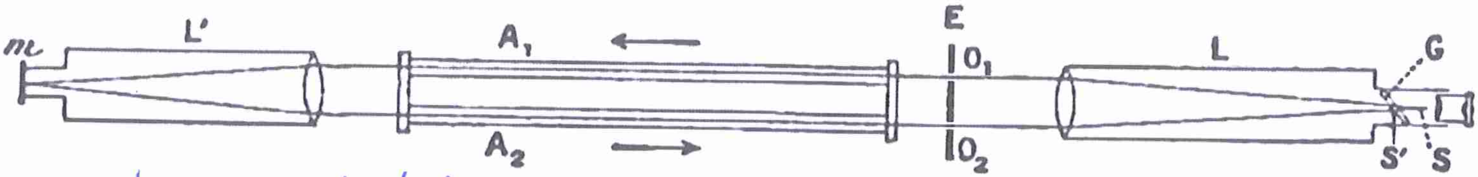
⇒ To se je res posrečilo Fizeauju v slavnem poskusu leta 1851.

Fizeaujeva meritev Fresnelovega koef. "vleka" (1851)

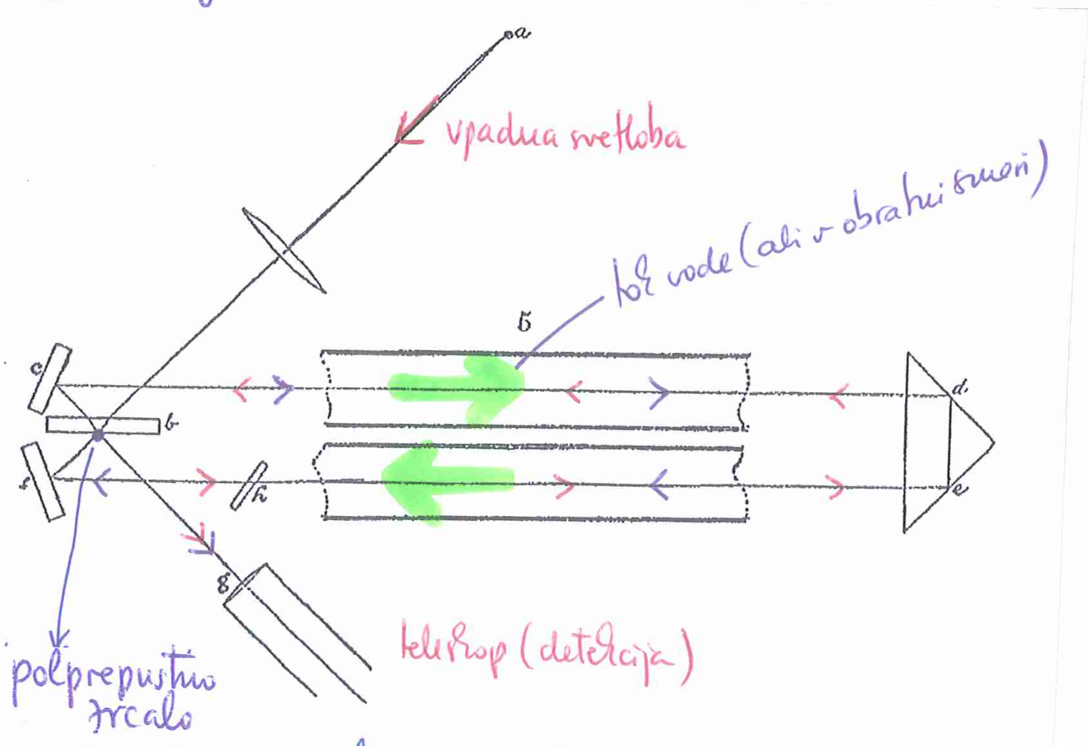
Prva verzija je bila videti takole:



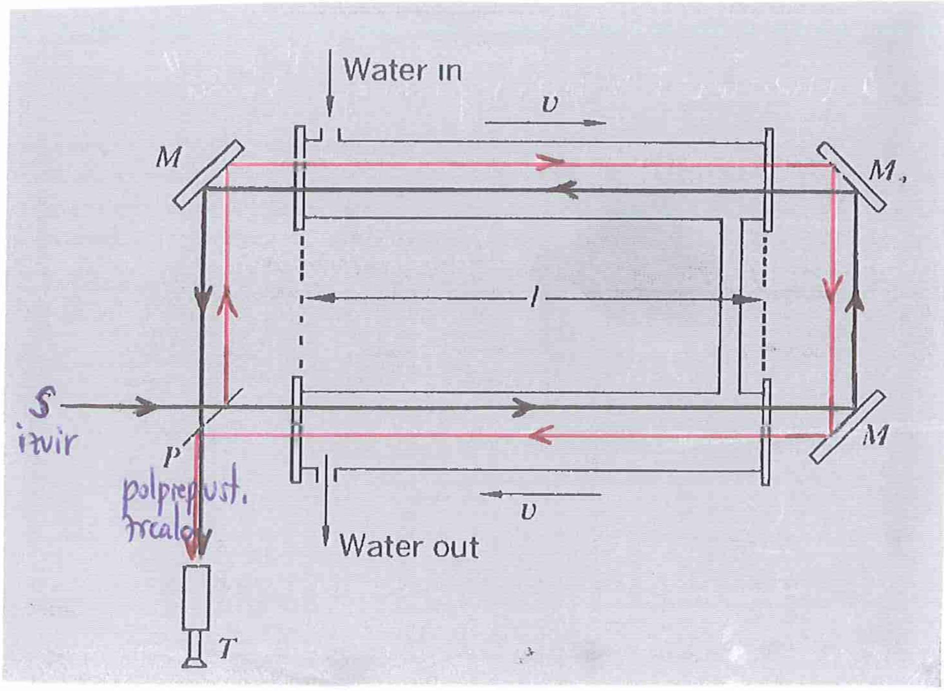
oziroma shematično takole:



Kasneje je Michelson (1886) stvar po svoji navadi še izboljšal, njegova konfiguracija je bila taka:



Osnovna ideja pa je bila: preveriti, ali sredstvo (voda) "potegne" svetlobo s seboj! Enkrat gre svetloba vzdolž toka, drugič nasproti, gledamo razliko med optičnimi potmi. Razlike so izredno majhne, zato je nujna interferometrija! Shematično je reč prikazana na naslednji strani.



* en žarek vedno potuje z vodo in drugi vedno proti njej

* izven cevi so pogoji za oba žarka enaki, torej moramo upoštevati samo, kaj se godi v ceveh. Izračunajmo čase potovanja obeh žarkov, če ima vsaka cev dolžino l in voda teče s hitrostjo v (in ima Fresnelov koeficient f), je razlika med časi potovanja

$$\Delta t = \frac{2l}{c/n - fv} - \frac{2l}{c/n + fv} = 2l\frac{n}{c}\left(\frac{1}{1-\frac{fnv}{c}} - \frac{1}{1+\frac{fnv}{c}}\right)$$

$$\underset{\substack{\uparrow \\ v/c \ll 1}}{\approx} 2l\frac{n}{c}\left(1 + \frac{fnv}{c} - 1 + \frac{fnv}{c}\right) = \frac{4n^2 f v l}{c^2}$$

To ustreza razliki optičnih poti $c\Delta t$ (lomni količnik je upoštevan že v računu Δt!) oziroma številu interferenčnih prog $c\Delta t/\lambda$, torej

$$\boxed{\#\,\text{interf. prog (premik)} = \frac{4n^2 f v l}{\lambda c}}$$

Fizeau je imel $l = 1.5\,m$, $v = 7\,m/s$, $\lambda = 530\,nm$, $n = 1.33$ in izmeril je $\delta = 0.23$, od koder je dobil $f_{exp} \approx 0.48$, medtem ko je $1 - 1/n^2 \approx 0.43$. (Michelson je dobil precej natančnejše $f_{exp} \simeq 0.43$ z izboljšanim setupom.)
(Ko tudi obrnili smer vode, shift je tedaj dvojni.)

Spet "danes vemo", da je Fizeau izmeril samo limito pravilnega relativističnega izraza, ki nima nobene zveze z "dragom": V opazovalnem sistemu S, kjer sredstvo (voda) miruje, se svetloba širi s hitrostjo $v_x = c/n$. V opazovalnem sistemu S', ki se glede na S giblje s hitrostjo v, pa opazovalec izmeri

voda se "spodmika" svetlobi (ista smer)

$$v_x' = \frac{v_x - v}{1-\frac{v_x v}{c^2}} = \left(\frac{c}{n}-v\right)\left(1-\frac{v_x v}{c^2}\right)^{-1} \approx \left(\frac{c}{n}-v\right)\left(1+\frac{v_x v}{c^2}+\dots\right)$$

$$= \frac{c}{n} - v\underbrace{\left(1-\frac{1}{n^2}\right)}_{f} + \dots$$

$$= \boxed{\frac{c}{n} - f v + \dots}$$

Fresnelov koef!

⇒ Račun za transv. valovanje, ki se prenaša po etru, da enak rezultat kot linearni približek posebne teorije rel.

~> Naloga (1.4) v zbirki!
(tam nasproti smeri vode)

⇒ Tako zvezdna aberacija kot Fizeaujev poskus sta kazala na to, da gibajoči se predmet ne "komunicira" ničesar o svojem gibanju etru, niti v njem ali zunaj njega (telesa). Po tej interpretaciji, v prozorni snovi svetlobo delno nosi snov in delno eter, ki jo "preveva". Eter naj bi bil pri miru, zato svetlobi "doda" le delež hitrosti snovi.

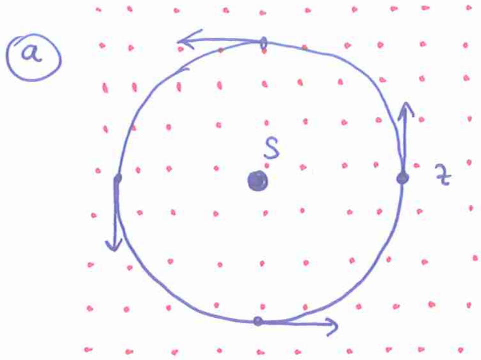
⇒ Veliko vprašanje: ali bi lahko kako zaznali gibanje Zemlje skozi eter?

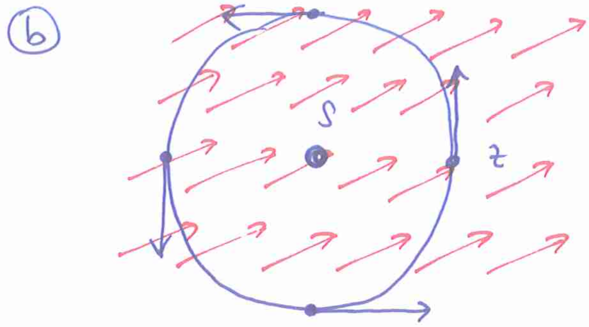
Michelsonov (in Morleyjev) poskus

Michelson (1881)
Michelson in Morley (1887)

Poskušala sta izmeriti relativno hitrost gibanja Zemlje glede na eter (če naj bi ta obstajal). Možna sta bila dva scenarija:

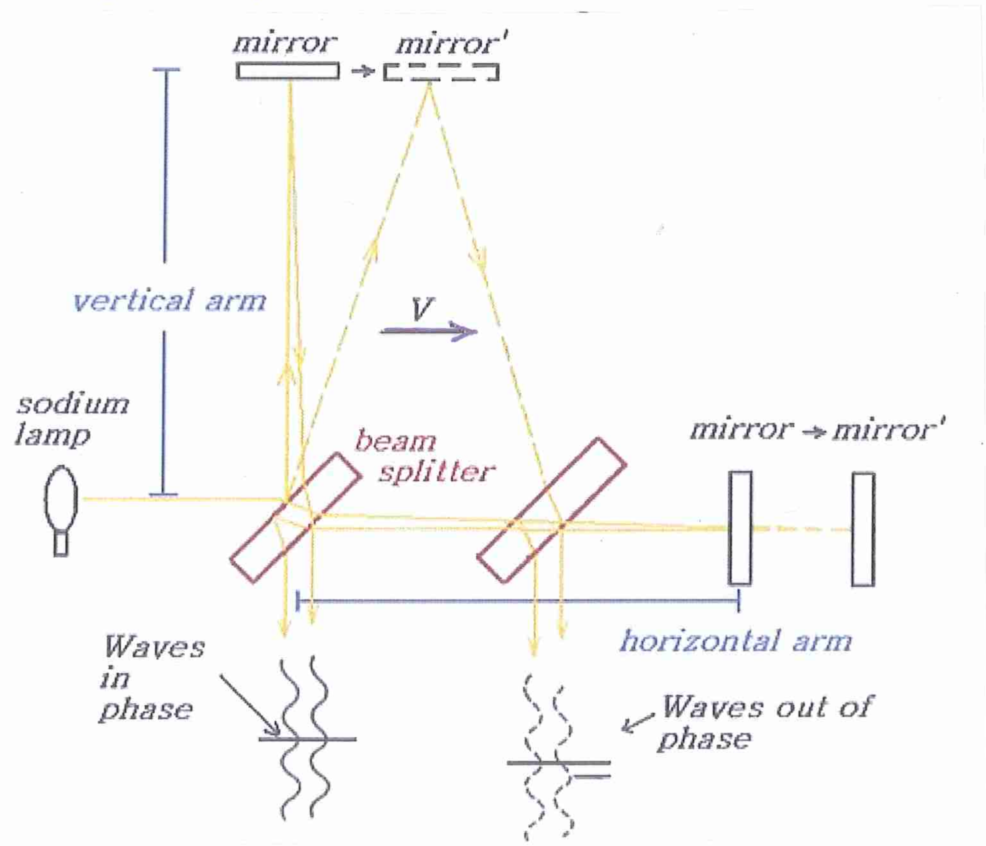
ⓐ če je eter stacionaren glede na Sonce/vesolje, bi bila hitrost etra glede na Zemljo vedno $-\vec{v}_{Zemlja}$ ($v_{Zemlje}/c \approx 10^{-4}$).



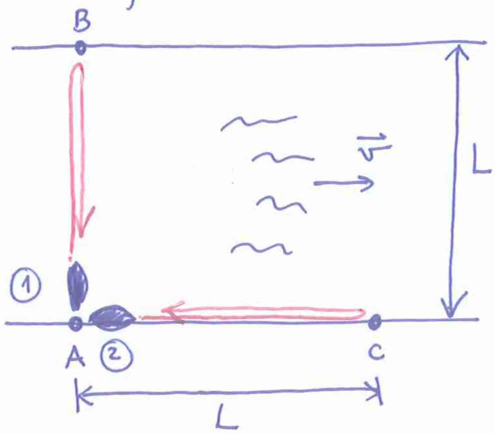


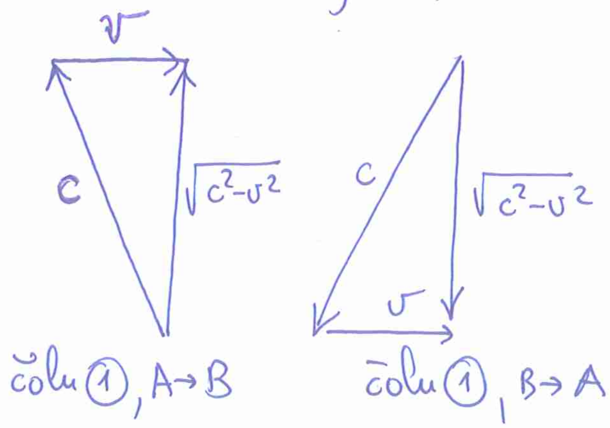
ⓑ Lahko bi imeli usmerjen "etrni veter" (ether wind), ki naj bi "pihal" po vesolju in odnašal valovanja (in še kaj drugega) vstran. V tem primeru bi morala opaziti relativne letne oscilacije glede na trenutne "rezultante" hitrosti $\vec{v}_{Zemlje}$ in $\vec{v}_{etra}$.

Shematični prikaz njune naprave (interferometra):



Ideja je točno enaka kot pri tekmi dveh veslačev, ki poskušata preveslati enako razdaljo v reki, ki teče s hitrostjo v. (Oba v mirni vodi veslata s hitrostjo c.)





Čas veslanja čolna ①:

$$t_1 = t_{AB} + t_{BA} = \frac{L}{\sqrt{c^2-v^2}} + \frac{L}{\sqrt{c^2-v^2}} = \frac{2L}{\sqrt{c^2-v^2}}$$

$$= \frac{2L}{c\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \approx \frac{2L}{c}\left(1+\frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2}+\dots\right)$$

glej še (9')

Čas veslanja čolna ②:

$$t_2 = t_{AC} + t_{CA} = \frac{L}{c+v} + \frac{L}{c-v} = \frac{2Lc}{c^2-v^2}$$

$$= \frac{2L}{c}\,\frac{1}{1-\frac{v^2}{c^2}} \approx \frac{2L}{c}\left(1+\frac{v^2}{c^2}+\dots\right)$$

Torej $\Delta t = t_2 - t_1 \approx \frac{Lv^2}{c^3}$ (čoln ① zmaga).

Pri Michelsonovem interferometru je

② = žarek vzdolž gibanja zemlje
① = prečni žarek
c = hitrost svetlobe
v = hitrost gibanja zemlje glede na stacionarni eter

⇒ razlika optičnih poti žarkov je potemtakem

$$\Delta L = c\,\Delta t = L\frac{v^2}{c^2},$$

kar ustreza spremembi števila valovnih dolžin (# if. fringes)

$$L\frac{v^2}{c^2} = \Delta n \cdot \lambda \;\to\; \boxed{\Delta n = \frac{L}{\lambda}\frac{v^2}{c^2}}$$

%

Ker je težko doseči, da bi bila kraka interferometra popolnoma enako dolga, aparat zasukamo za 90° in tako zamenjamo vlogi ① in ②. Po tem zasuku bi morali glede na prejšnjega opaziti $2\,\Delta n$ števila interferenčnih prog oziroma obročev (odvisno od optike), glede na stanje, ko je bila razlika poti $\equiv 0$, torej

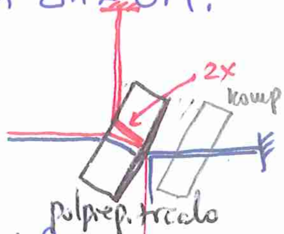
$$\Delta n = 2\,\frac{L}{\lambda}\frac{v^2}{c^2} = 2\,\frac{11\,\mathrm{m}}{590\,\mathrm{nm}}\left(10^{-4}\right)^2 \approx \underline{\underline{0.4}}$$

vrednosti iz drugega poskusa (1887) z daljšo ročico interferometra

Pričakovali bi premik za 0.4 IF obroča/proge, občutljivost (natančnost) aparature pa je bila $\delta(\Delta n) \approx 0.01$, pod tem ničm).
∴ Če bi veljala "etrska hipoteza", bi morali videti $\Delta n \approx 0.4$.
Rezultat je bil

$$\boxed{\Delta n = 0}$$

!



(NB) V vzdolžni krak sta vključila še optični kompenzator (steklena ploščica enake debeline kot tista, iz katere je polprepustno zrcalo).

(NB) Exp. sta ponavljala še mnogokrat, različni koti, različni letni časi, itd.* Vedno $\Delta n = 0$. Kasneje mnogo ponovitev, bistveno natančneje z laserji, dandanes so že tako strogo zgornje meje za hitrost etrnega vetra (O (m/s)), verjamemo MM

⇒ gibanja Zemlje skozi mirujoči eter ni bilo mogoče zaznati
⇒ hitrost svetlobe v obeh krakih interferometra enaka !
To pomeni, da je neodvisna od gibanja opazovalca !

(NB) FitzGerald je predlagal, da se IF dejansko skrči vzdolž gibanja za faktor $\sqrt{1-v^2/c^2}$. To bi v čas t_2 prineslo dodaten faktor $\sqrt{1-v^2/c^2}$ in $t_2 - t_1 = 0$! Toda krak se nič ne skrči, to je posledica kinematike za različne opazovalce – glej (15), čeprav je funkcijska forma pravilna!!!

pri tem sploh nima veze, da smo uporabili Galilejske transf. namesto "ta pravih drugih". Kar pri tem koli $c+v$ in $c-v$ sploh ne pride v poštev! c je za vse enak!
(ni torej res, da bi bila hitrost svetlobe c samo v tem odlikovanem sistemu etra)

* merili so ob dveh ponoči, vrteli IF na živosrebrni "kopeli", ponavljali z monokromat. svetlobo različnih λ, povečali L z večanjem števila odbojev na zrcalih itd.

Einsteinovi postulati (načela) relativnosti (1905)

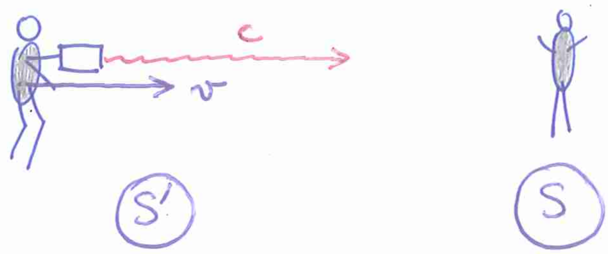
MM eksperiment je ubil koncept etra kot absolutnega koordinatnega sistema. Vendar na Einsteina ni bistveno vplival, ker je bil že prepričan, da pojmi absolutnega gibanja (ali mirovanja) niso relevantni.
Zanj največji konflikt je videl med mehaniko in elektromagnetizmom: če se svetloba giblje s hitrostjo c, $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$, kot so hotele Maxwellove enačbe, in če naj bi veljala ekvivalenca med vsemi inercialnimi opazovalnimi sistemi, bi se lahko po Newtonu / Galileju gibal opaz. s hitrostjo c in oddal svetlobni snop ~~v smer~~ smeri gibanja ⇒ rel. hitrost $c - c = 0$ in v njegovem sistemu EM val sploh ne bi obstajal!
~ Maxwell. en. bi veljale samo v nekem odlikovanem sistemu.

① Fizikalni zakoni imajo enako obliko v vseh inercialnih sist.
② Hitrost svetlobe (v vakuumu) je v vseh inerc. sistemih enaka c.

① ⇒ ne moremo ugotoviti absolutnega gibanja / mirovanja, le relativno

② ⇒ ta točka je nasprotna vsem našim dosedanjim izkušnjam!

To implicira tudi, da je hitrost svetlobe neodvisna od (gibanja) njenega izvora!
Najbolj neposreden dokaz: razpad π^0 v letu: če sami imajo $v \approx c$, potem pa merijo tudi fotone iz $\pi^0 \to 2\gamma$, in tudi ti imajo c.



Klasično: S' vidi oddaljevanje žarka s c (če drži svetilko)
S vidi približevanje s $c+v$

Toda galilejsko seštevanje hitrosti ne velja (ne za telesa in ne za svetlobo); tako S ~~kot~~ S' vidita c!

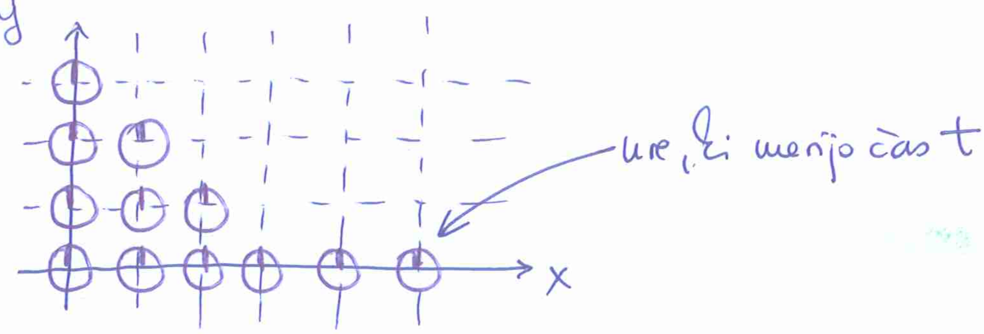
To nas je ravnokar naučil MM eksperiment!
↳ tam je bilo v osnovni ideji implicitno vsebovano, da je hitrost svetlobe v obeh krakih enaka.

ali $c - v$, če bi se gibal glede na ~~žarek~~ v isti smeri

Dogodki in opazovalci

Dogodek je nekaj, kar se zgodi: udar strele, trk dveh delcev, trojno rojstvo, eksplozija supernove. Vsak dogodek se zgodi ob nekem času na nekem kraju, vendar je neodvisen od inercial. sistema, v katerem se ga bomo odločili opisati. Dogodek "ne pripada" nobenemu izbranemu (privilegiranemu) sistemu.

Dogodke opisujejo opazovalci, ki pa "pripadajo" določenim inerc. sistemom. To je lahko človek ali merilni instrument, prava narava opazovalca je nerelevantna, važno je samo, da "vidi" ali "nekaj" odčita ure, postavljene na mesta mreže, kjer se kaj zgodi. Takole je reč videti v 2d:



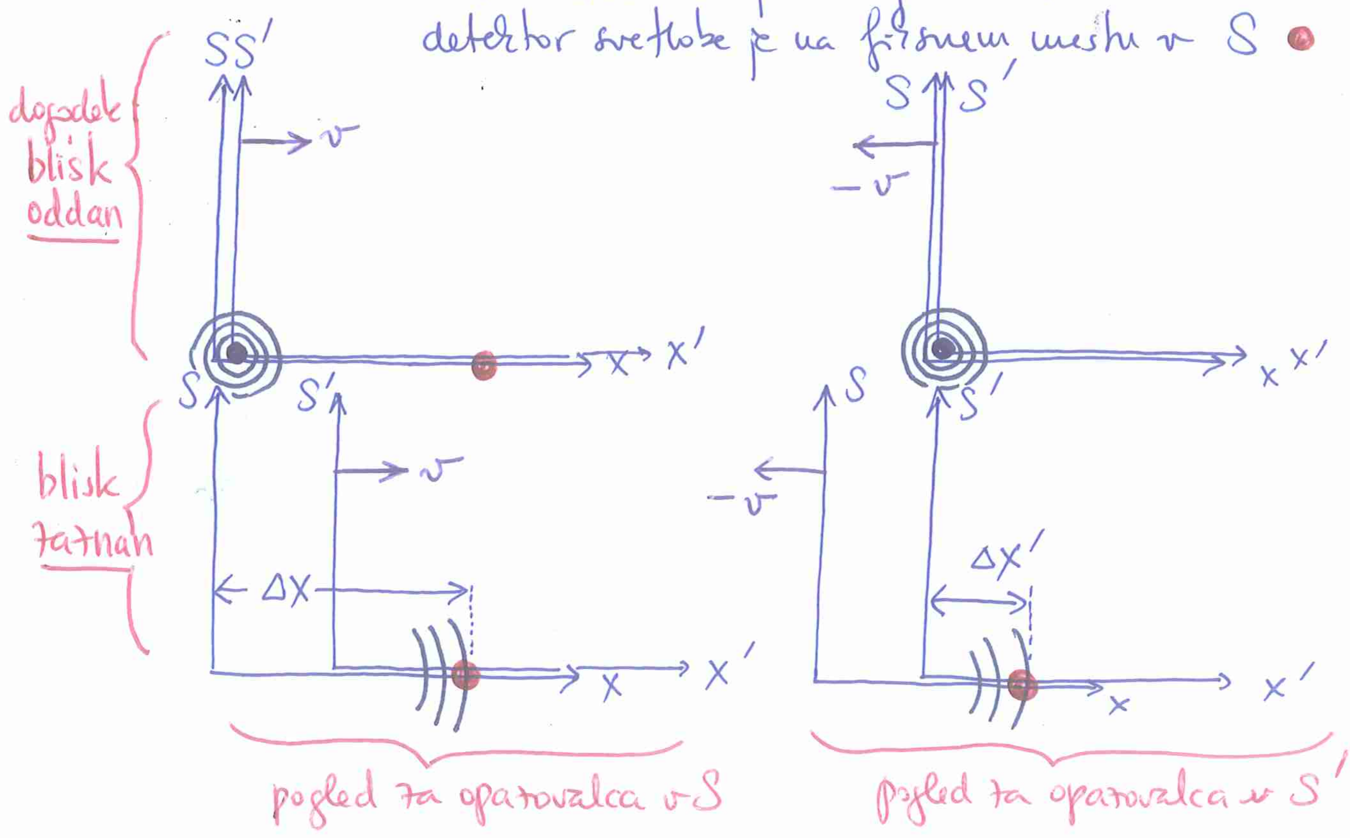
Prvi zgled

S, S' poravnana ob $t=t'=0$

S' se giblje v smeri osi x s hitrostjo v

v izhodišču S' je oddajnik svetl. bliskov ●

detektor svetlobe je na fiksnem mestu v S ●



Opazovalec v sistemu S zazna blisk na razdalji Δx ob času Δt, prav tako merjenem v S.
Opazovalec S' zazna 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

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{c} \text{ v } S \quad \underline{\text{in}} \quad \Delta t' = \frac{\Delta x'}{c} \text{ v } S', \qquad (\star)$$

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 upoštevati, 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 (količina) spremenljivka, ki bi tekla enako za vse opazovalce!

~> obstajati mora zveza med Δx, $\Delta x'$, Δt in $\Delta t'$, da zadostimo $(\star)$.
To bodo Lorentzeve transformacije.

Relativnost sočasnosti

Pokazali bi radi, da dva dogodka, ki sta sočasna v S, nista sočasna v S'. (Izvirni Einsteinov zgled z vlakom, ki se giblje s hitrostjo v mimo mirujočega perona, vanj pa na dveh mestih udari strela.)

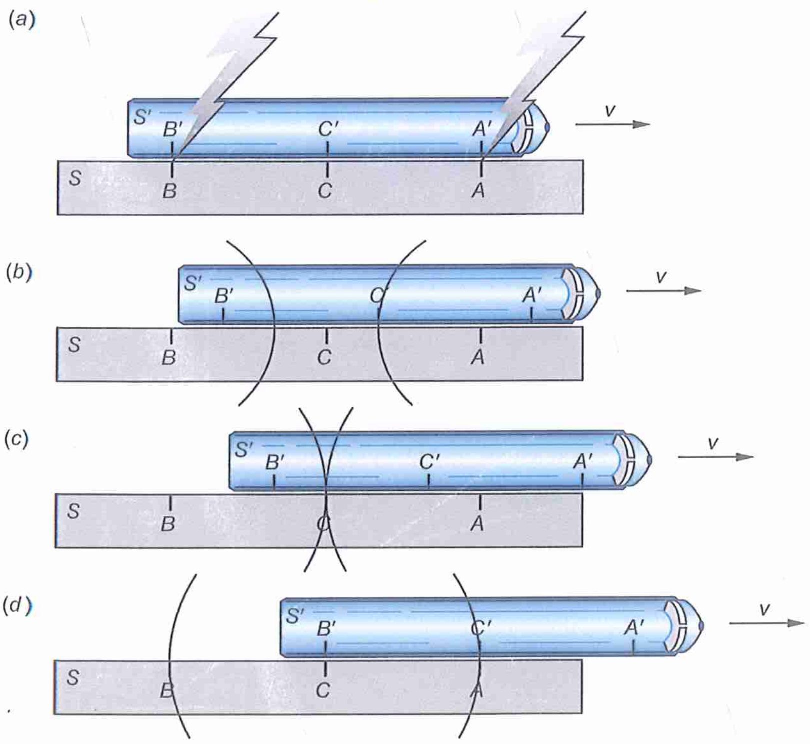


FIGURE 1-14 Lightning bolts strike the front and rear of the train, scorching both the train and the platform, as the train (frame S') moves past the platform (system S) at speed v. (a) The strikes are simultaneous in S, reaching the C observer located midway between the events at the same instant as recorded by the clock at C as shown in (c). In S' the flash from the front of the train is recorded by the C' clock, located midway between the scorch marks on the train, before that from the rear of the train (b and d, respectively). Thus, the C' observer concludes that the strikes were not simultaneous.

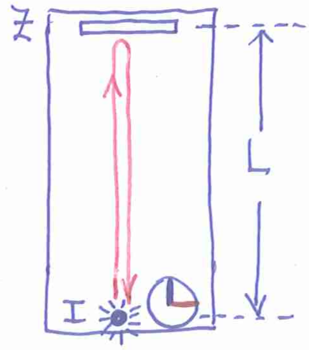
— Vlak miruje v S', peron miruje v S.
— Strela trešči v sprednji in zadnji konec vlaka sočasno v S (sl. ⓐ), zato opazovalec C na sredi med A in B oba bliska vidi sočasno (sl. ⓒ).
— Mislimo si, da je strela tako močno usekala, da so znamenja ostala tudi na peronu.
— Kaj vidi C', ki je na sredi vlaka (merjeno v S)? Svetlobni blisk s sprednjega konca vlaka je do njega prišel prej kot z zadnjega, saj ga ta še "lovi". Tistega iz A' je zaznal kot na sliki ⓑ, tistega s C' pa kot na sliki ⓓ.

⇒ **kar je bilo sočasno za S, ni sočasno za S'**

~ Ah!!

Dilatacija časa

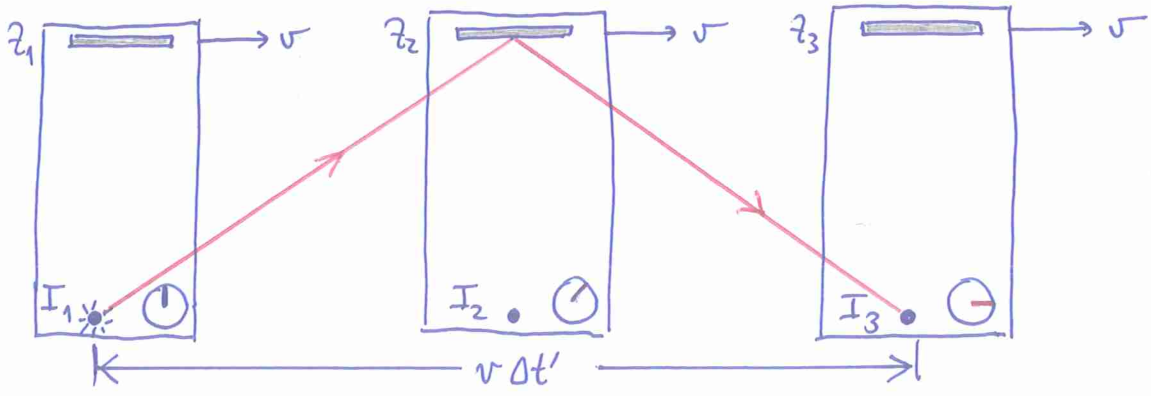
Oglejmo si, kaj se godi s krakom MM interferometra, pravokotnim na smer gibanja. Idealizacija: tog okvir, v katerem imamo svetlobni izvir I, ob njem montirano uro in zrcalo Z na razdalji L od izvira:



— svetlobni blisk potuje do zrcala in nazaj in zato porabi $\Delta t = 2L/c$, toliko pokaže tudi ura.
— NB izmerili smo časovni interval med dvema dogodkoma: izsevanjem bliska in njegovo detekcijo. Tak int. imenujemo PROPER TIME INTERVAL (lastni časovni interval)

URA JE OB OBEH DOGODKIH NA ISTEM MESTU (= SIGNAL JE ODŠEL IN PRIŠEL K ISTI URI)

Poglejmo ta dogodka z vidika opazovalca, ki se giblje na levo s hitrostjo v. V njegovem sistemu se aparat giblje desno s hitrostjo v:



Denimo, da je čas do odboja in vrnitve žarka v tem sistemu $\Delta t'$, ta čas se je sistem premaknil za $v\,\Delta t'$ (oziroma aparatura mimo njega zdrsnila in 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 $\sqrt{L^2+(v\,\Delta t'/2)^2}$ in celotna pot žarka enaka $2\sqrt{L^2+(v\,\Delta t'/2)^2}$. Toda tudi za ta sistem, ki je inercialen (= se giblje s konst. 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

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

Stvar tudi temu pravi „koordinatni"!

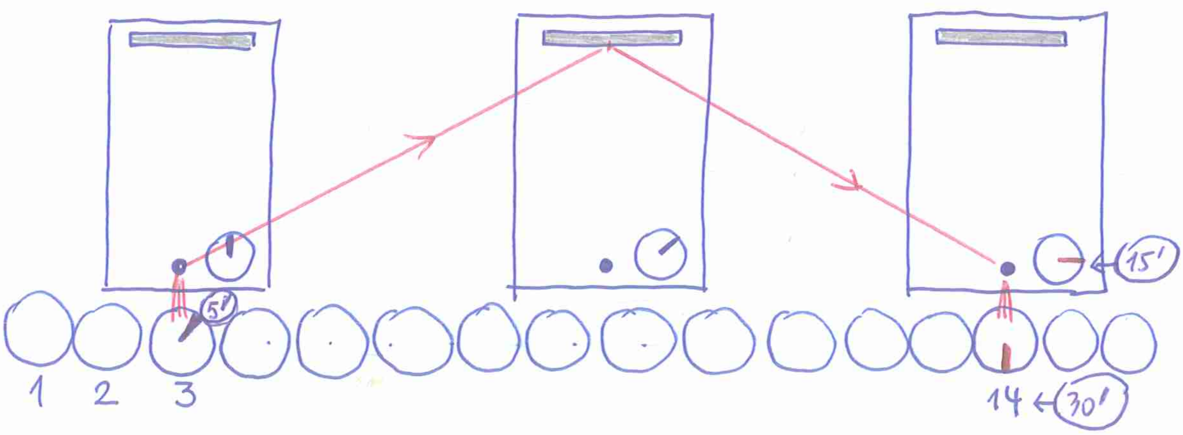
vedno < 1

oziroma $$\boxed{\Delta t(\text{lastni}) = \Delta t(\text{nelastni})\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

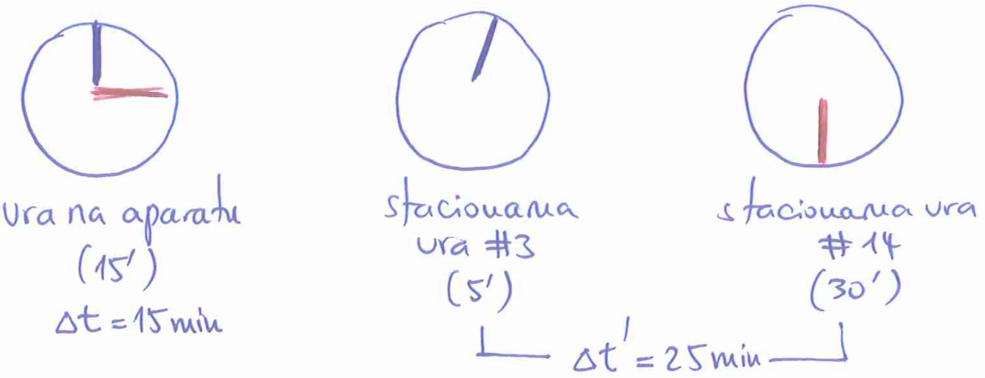
vedno najkrajši

Merili smo torej ista 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**.

~> Poglejmo na isto reč še enkrat v sistemu, v katerem se aparat giblje. Ta sistem opremimo z urami, ki so identične tisti na aparatu! Mislimo si, da blisk osvetli ne le uro na aparatu, temveč tudi stacionarno uro, mimo katere se ravno pelje:



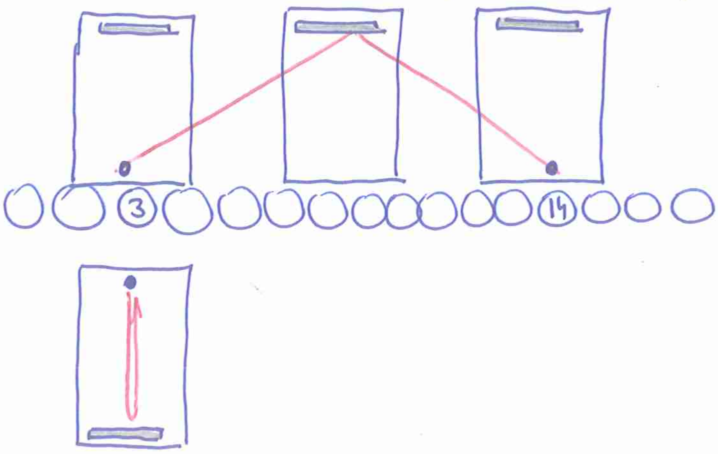
Hitrost potovanja aparata mimo nas dobimo tako, da izmerimo razdaljo med uro 14 in uro 3, zabeležimo izmerjeni $\Delta t'$ med njima, in delimo. NB V tem ni nič misterioznega ali umišljenega, da ure kažejo drugače. Če bi lahko slikali ure ob trenutku izsevanja bliska in njegove detekcije in jih "prinesli nazaj", bi bile videti tako:



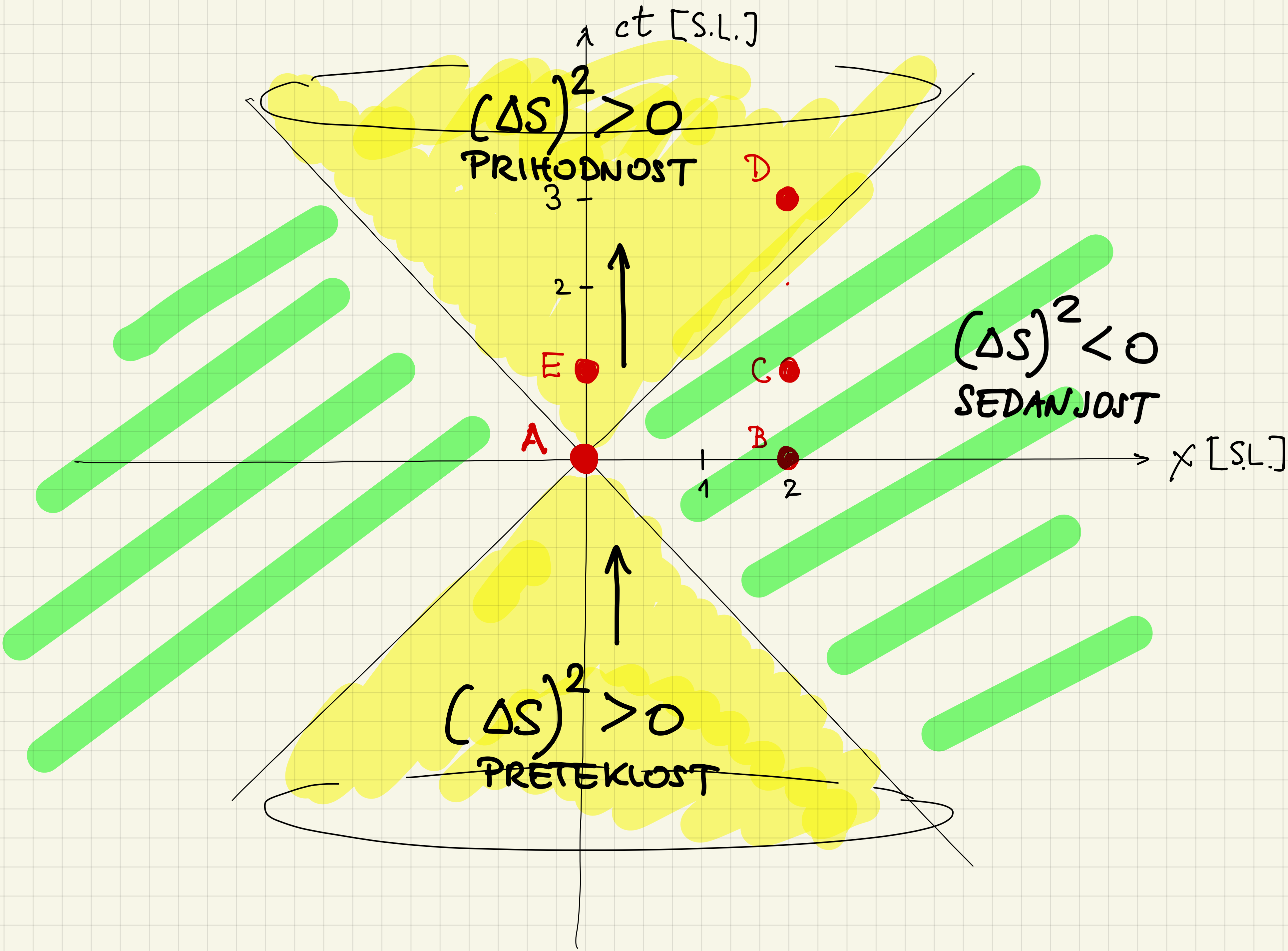
$\boxed{\text{DN}}$ Pokaži, da se je aparat mimo nas peljal s hitrostjo $v = 4/5\, c$.

- običajni pomislek: če se ura A giblje mimo ure B, A teče počasneje kot B. Toda z vidika A se B giblje mimo A, torej B teče počasneje kot A. Paradoks? Ne! Ure ne tiktakajo večno in merijo neko univerzalno, mistično količino, imenovano čas. Merijo le intervale med dogodki. V enem samem inerc. sistemu lahko v našem primeru izmerimo čas med dogodkoma z eno samo uro – tisto v sistemu aparata. V vseh ostalih sistemih izmerimo daljši čas. Različni odčitki ur niso navidezni! Ura, ki meri proper time interval med dogodkoma, "teče najpočasneje".

- še en možen ugovor: postavimo še en tak aparat ob uro 3. Blisk iz takega aparata se bo spet vrnil v uro 3, ura 3 bo torej spet merila proper time interval, ki bo krajši kot tisti, ki ga bodo izmerile ure na prvem (gibajočem se) aparatu:



* he *


ct [S.L.]
(ΔS)² > 0
PRIHODNOST
D
3
2
E
C
(ΔS)² < 0
SEDANJOST
A
B
1
2
x [S.L.]
(ΔS)² > 0
PRETEKLOST

Dogodek **A** : $\underline{r}_A = (0, 0)$ upr. ob času nič na Zemlji

Dogodek **B** : $\underline{r}_B = (0, 2\,SL)$ ob istem času, toda upr. na drugem planetu

Dogodek **E** : $\underline{r}_E = (1\,SL, 0)$

Razmik med dogodkoma A in B je

$$(\Delta s_{AB})^2 = (ct_B - ct_A)^2 - (x_B - x_A)^2 = -4\,SL^2 < 0$$

$\Rightarrow$ razmik je krajevnega tipa, saj se A in B razlikujeta le po kraju

Razmik med A in E je

$$(\Delta s_{AE})^2 = (ct_E - ct_A)^2 - (x_E - x_A)^2 = 1\,SL^2 > 0$$

$\Rightarrow$ čas. tipa, dogodka se razlikujeta le po času

Denimo, da je **C** dogodek: pristanek rakete po 1 letu na planetu, oddaljenem 2 SL: $\underline{r}_C = (\underbrace{1\,SL}_{ct_C}, \underbrace{2\,SL}_{x_C})$

Razmik med A in C je

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

Ali sta lahko A in C v vzročni zvezi? Ker je $(\Delta s_{AC})^2 < 0$, ne morata biti! (Iz slike jasno: raketa bi morala imeti $v = \underline{2c}$!)

Toda poiščemo lahko vsaj inerc. sistem, v katerem sta A in C sočasna.

$t_A = t'_A = 0$ (sinhroniz. uri) pri $x_A = x'_A = 0$

$$\underline{t'_C} = \gamma\left(t_C - \frac{v x_C}{c^2}\right) \underline{= t'_A = 0} \Rightarrow c^2 t_C = v x_C \Rightarrow v = \frac{c}{2}$$

(za opaz., ki se giblje s $\frac{c}{2}$, se A in C zgodita sočasno)

Kaj pa, če raketa pristane na planetu po 3 letih ?

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

$$(\Delta s_{AD})^2 = (3\,SL)^2 - (2\,SL)^2 = 5\,SL^2 > 0$$ ✓ čas. tipa, dogodka sta lahko vzročno povezana

Preverimo, ali ∃ opazovalni sistem, v katerem se ta dogodka zgodita na istem kraju ?

$$x_D' = \gamma(x_D - v t_D) = x_A' = 0$$

$$\Rightarrow v = x_D / t_D = x_D c / t_D c = \frac{2}{3} c$$ ✓ jasno: to je opazovalec, ki se pelje skupaj z raketo

Sile in kavzalnost

* telo vpliva na drugo telo z silo
* sprememba na enem telesu vzročno povezana s spremembo na drugem

če sta vzročno povezani ⟹ kvadrat razmika med dogodkoma >0

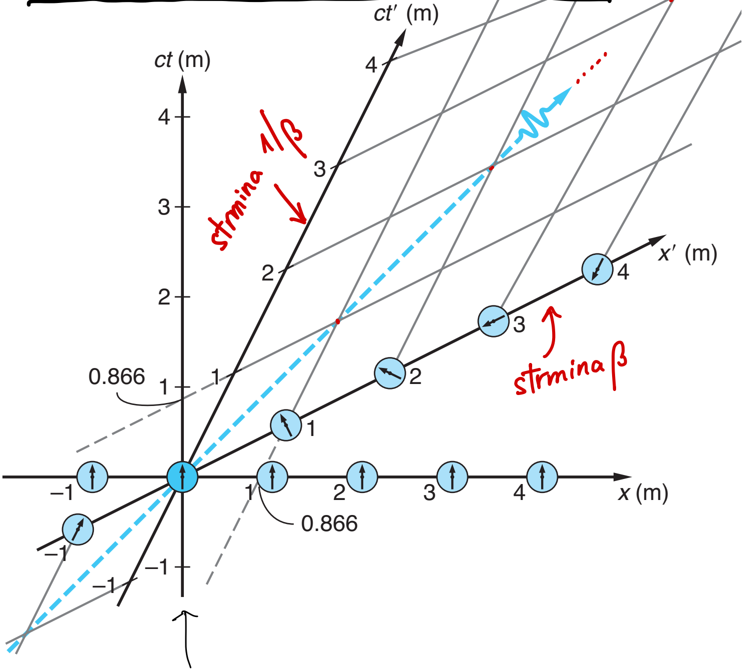
$$(c\Delta t)^2 - (\Delta x)^2 \geq 0$$

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

⟹ hitrost širjenja motnje ne more biti hitrejša od hitrosti svetlobe !

(sledi iz načela KAVZALNOSTI)

PRIKAZ LT NA SVETLOBNEM STOŽCU



Os ct v sistemu S: množica vseh točk, za katere je $x=0$. ⇒ os ct' je množica točk, za katere $x'=0$ ⇒

$$x' = \gamma(x - vt) \equiv 0$$

$$\Rightarrow x = vt = \beta ct \quad \text{oz.} \quad \underline{ct = \frac{1}{\beta} x}$$

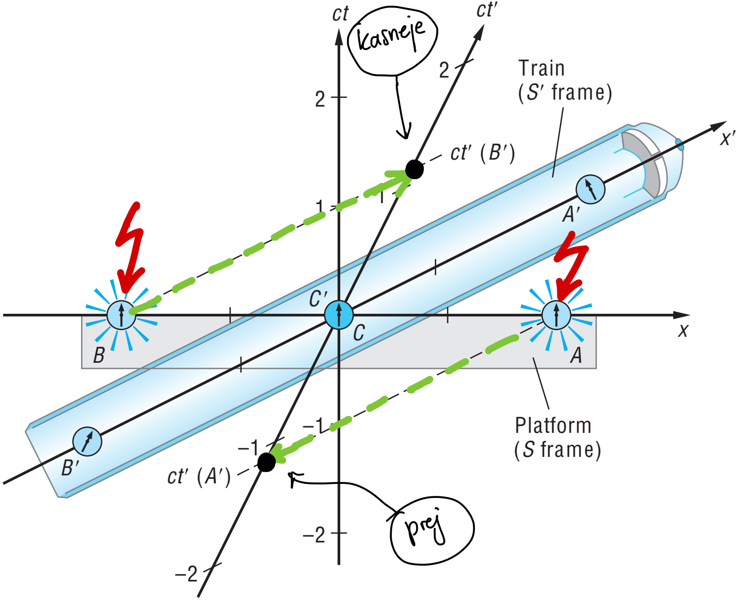
$$\text{strmina} = \tan\theta = \frac{1}{\beta}$$

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

$$t' = \gamma\left(t - \frac{v}{c^2} x\right) \equiv 0$$

$$\Rightarrow t = \frac{v}{c^2} x \Rightarrow \underline{ct = \beta x}$$

$$\text{strmina} = \beta$$



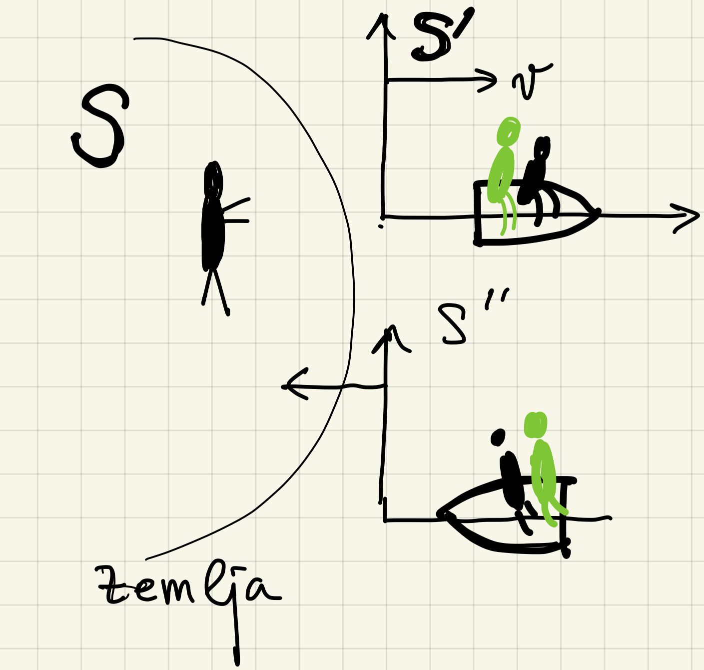
Vlak, ki se pelje mimo perona z $v = \frac{c}{2}$

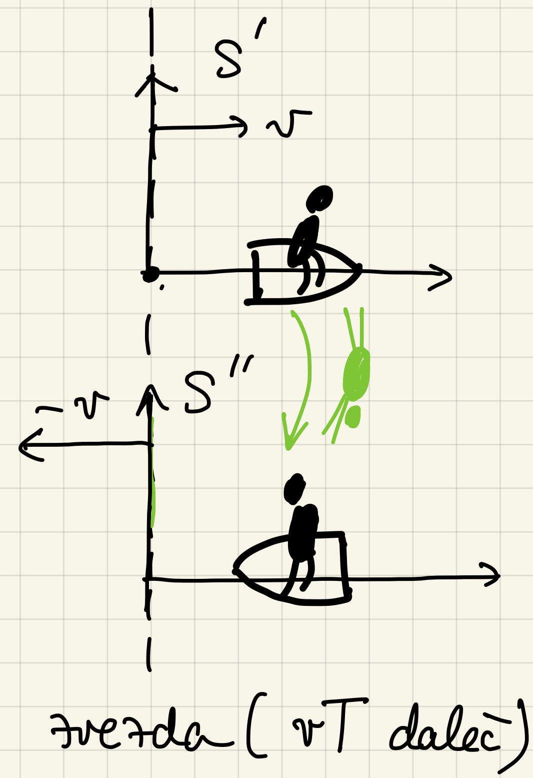
Bliska (= dogodka!) v točkah A in B sta sočasna v S (peron)

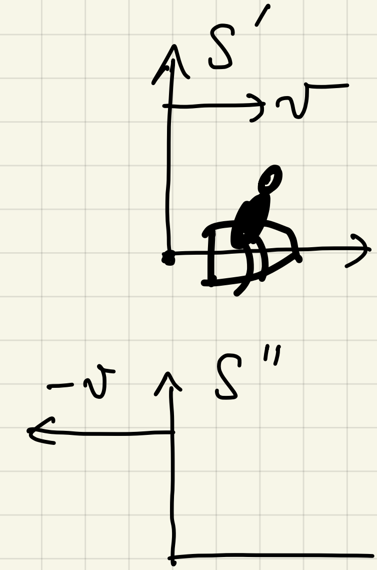
Kaj pa v S'? (že vemo, da tu A in B nista sočasna.)

sočasno ≡ vzporedno krajevni osi

Paradoks ur (dvojčkov)

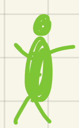




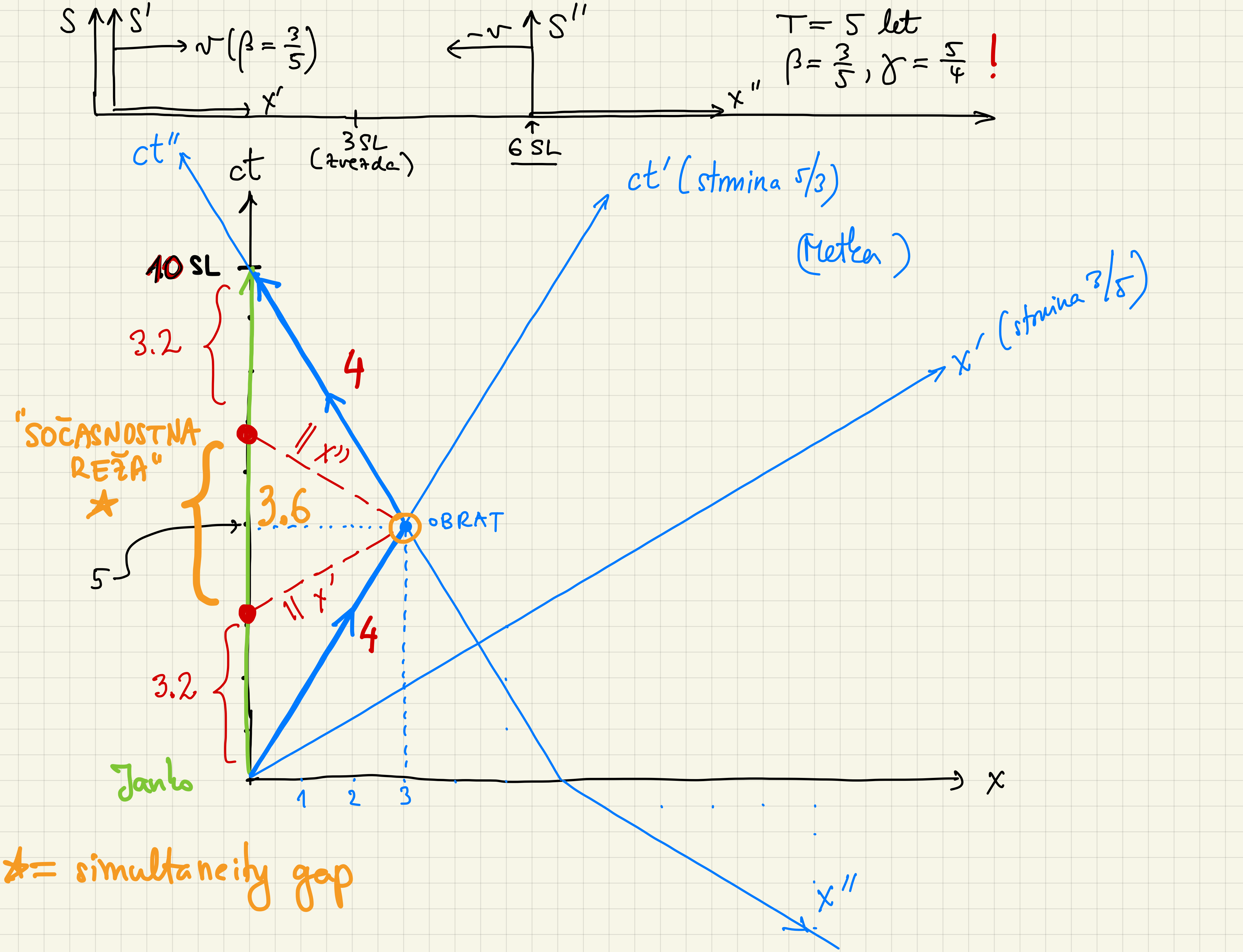


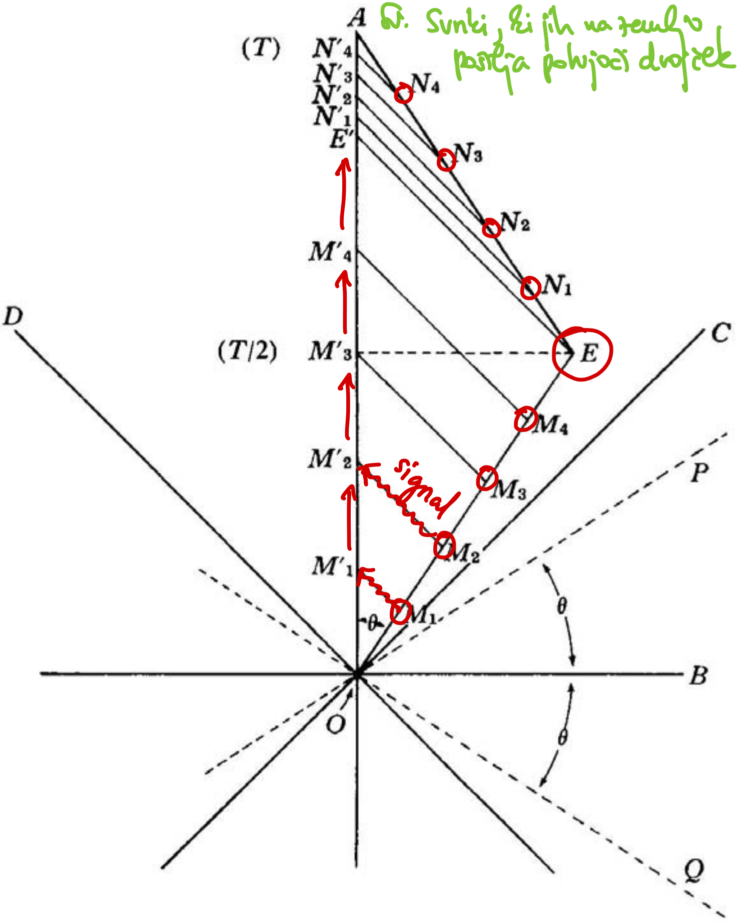
čas potovanja

	proti zvezdi	nazaj z zvezde	skupaj
kot ga vidi Zem. dvojček	T	T	$2T$ ← lastni
kot ga vidi pilot S'	T/γ ← njegov lastni!	$2T\gamma - T/\gamma$	$2T\gamma$ koordinatni!
kot ga vidi pilot S''	$2T\gamma - T/\gamma$	T/γ	$2T\gamma$

Kaj pa pravi  ?

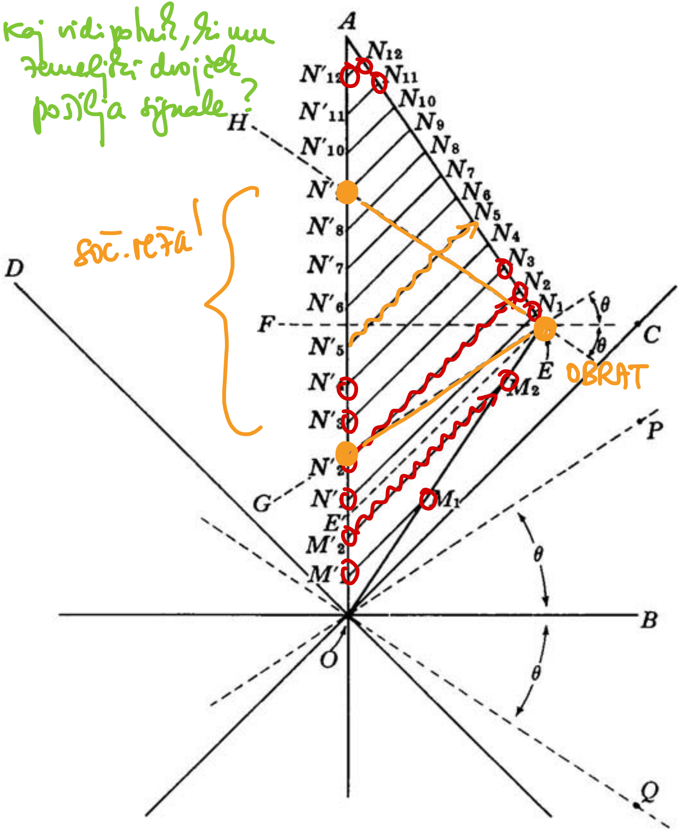
Vprašaj za uro pilota: T/γ (od S') + T/γ (od S'') = $2T/\gamma$


S
S'
v (β = 3/5)
x'
−v
S''
x''
3 SL (zvezda)
6 SL
T = 5 let
β = 3/5, γ = 5/4 !
ct''
ct
ct' (strmina 5/3)
(Metka)
x' (strmina 3/5)
10 SL
3.2
4
"SOČASNOSTNA REŽA" ★
// x''
3.6
OBRAT
5
// x'
4
3.2
Janko
1
2
3
x
x''
★= simultaneity gap

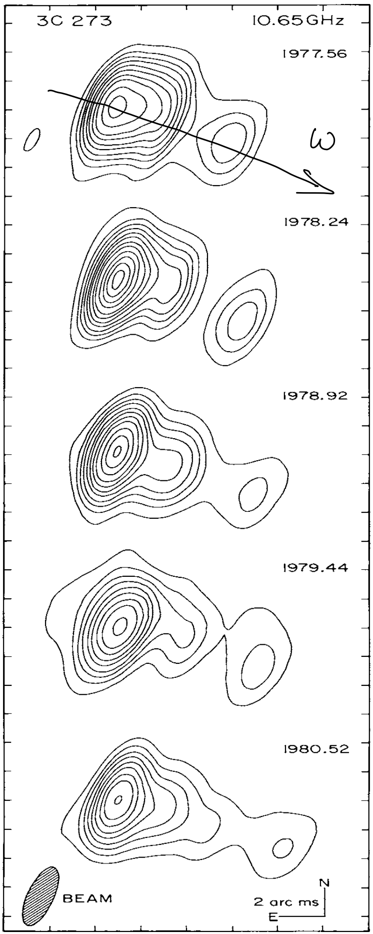


Sunki, ki jih na zemljo pošilja potujoči dvojček
A
(T)
N'4
N'3
N'2
N'1
E''
N4
N3
N2
N1
M'4
(T/2)
M'3
E
M4
M3
M'2
signal
M2
M'1
M1
θ
D
C
P
B
O
Q

Kaj vidi potnik, ki mu zemeljski dvojček pošilja signale?



Superluminal motion in the quasar 3C273



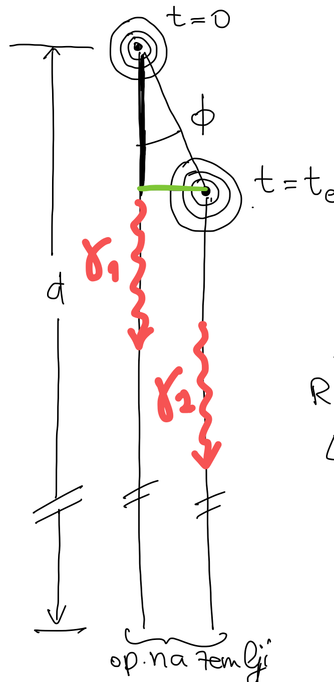
(Navidezno) superluminalno gibanje

$\omega = 0.0008''/\text{leto}$

$d = 1.4 \cdot 10^9$ svetlobnih let (!)

$\Rightarrow v_n = \omega d \approx \underline{5.6\,c}$ (?)

$\Rightarrow$ predpostavka, da se ta "packa" giblje $\perp$ glede na našo smer opazovanja, mora biti napačna



Prvi signal pride do nas po $t_1 = d/c$, drugi pa po

$$t_2 = t_1 + \left(d - v t_e \cdot \cos\phi\right)/c$$

Razlika v časih detekcije:

$$\Delta t = t_2 - t_1 = t_e\left(1 - \frac{v}{c}\cos\phi\right) < t_e$$

Navidezna prečna hitrost, kot izmerjena z Zemlje:

$$v_n = \frac{v\,t_e \sin\phi}{\Delta t} = \frac{v \sin\phi}{1-\frac{v}{c}\cos\phi} \Bigg\}$$ to je lahko za majhne ϕ večje od c

V povezavi jih je defaultno zanimala $\underline{v}$ iz izmerjene $\underline{v_n}$.

$$\frac{v}{c} = \frac{v_n/c}{\sin\phi + (v_n/c)\cos\phi}$$

Ni težko pokazati, da je $v/c < 1$ (kot fizikalno pričakujemo) za kote ϕ, ki zadoščajo neenakosti:

$$\frac{v_n^2/c^2 - 1}{v_n^2/c^2 + 1} < \cos\phi < 1$$

in da je najmanjša možna hitrost izvora (v) določena z

$$v_{min}/c = \sqrt{\frac{v_n^2/c^2}{1+v_n^2/c^2}}$$

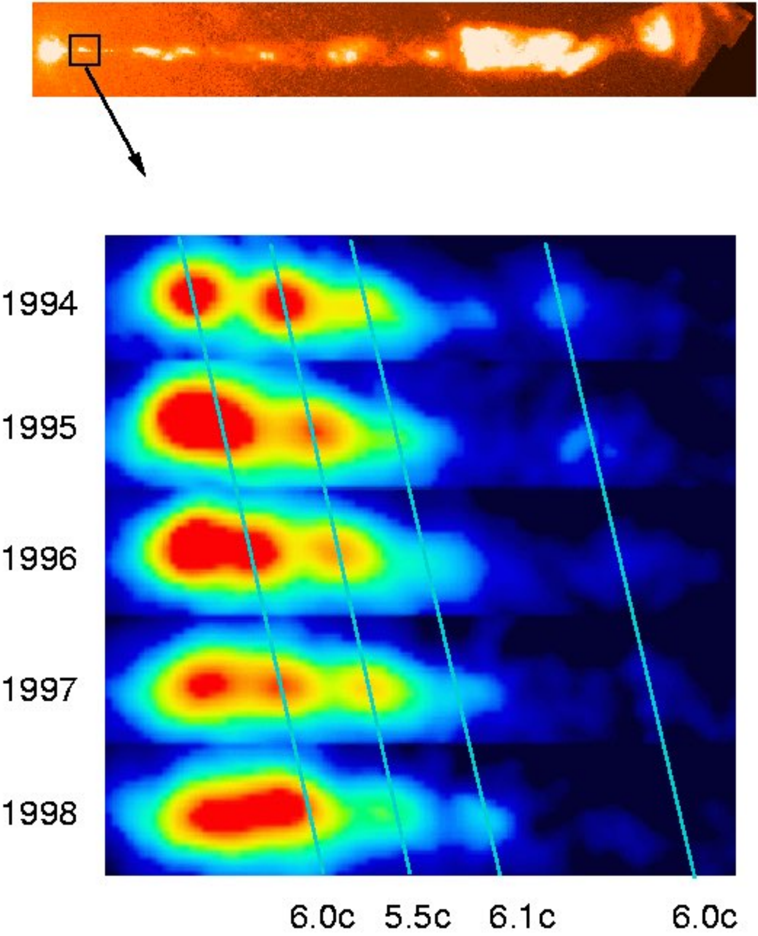
in to se zgodi pri ϕ_{min} podanim s $\cot\phi_{min} = v_n/c$.
To ustreza Lorentzevemu faktorju

$$\gamma_{min} = \frac{1}{\sqrt{1-v_{min}^2/c^2}} = \sqrt{1+v_n^2/c^2} = \frac{1}{\sin\phi_{min}}$$

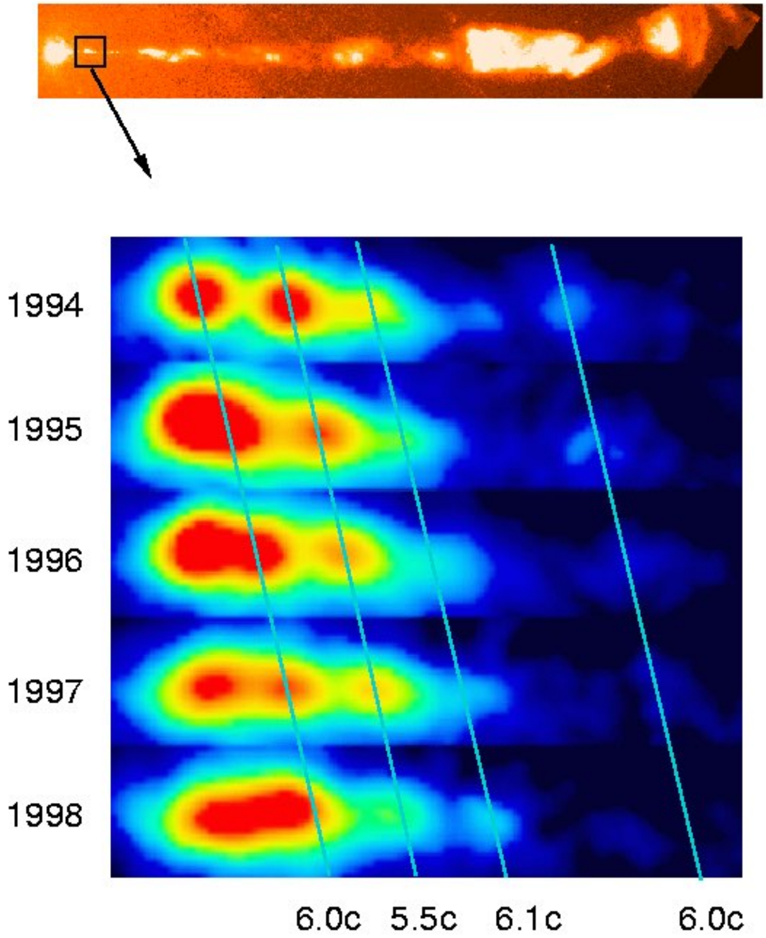
Ker mora biti $v<c$, mora biti $\phi < 20.4°$ $\Rightarrow$ $v_{min}/c = \underline{0.984}$ (!)
To ustreza $\gamma_{min} = 5.65$, to se zgodi pri $\phi_{min} = 10.2°$.

glavno sporočilo: astrofiz. objekti lahko pospešujejo snov do $\simeq$ svetlobne hitrosti

Superluminal Motion in the M87 Jet



Superluminal Motion in the M87 Jet



Relativistična GK in relativistična E

* kinematika poučna .. zanimivosti so v dinamiki!
* transformacija pospeškov:

$$a'_x = \frac{a_x}{\gamma^3 \left(1-\frac{v u_x}{c^2}\right)^3}$$

$\Rightarrow$ $\vec{F}/m$ se mora tudi ustrezno transformirati, sicer $\vec{F} = m\vec{a}$ ne bo veljalo v poljubnem inercialnem sistemu.

Razumno je pričakovati, da $\vec{F} = m\vec{a}$ ni OK pri $v \to c$

Potrebujemo zakon gibanja, ki se bo prevedel na Newtonovo obliko, ko $v \ll c$

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

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

nova oznaka za $\vec{G}$

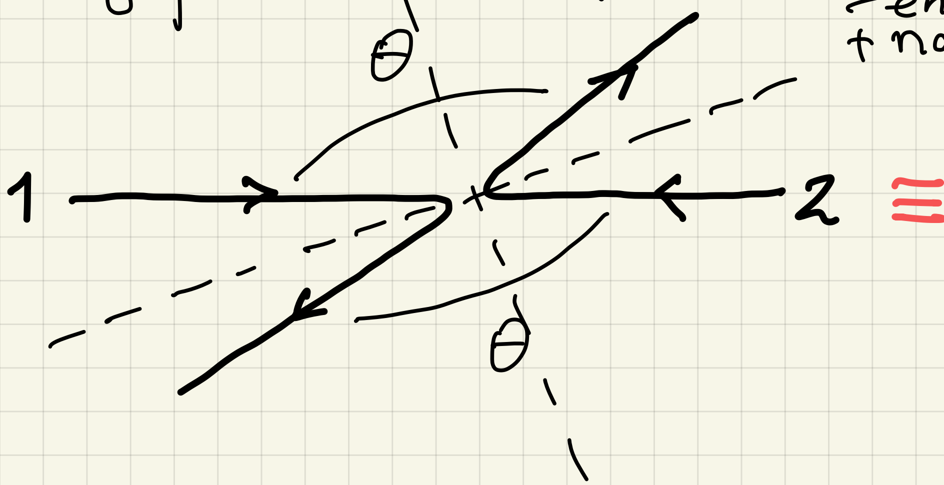
!?

Radi bi pokazali, da je

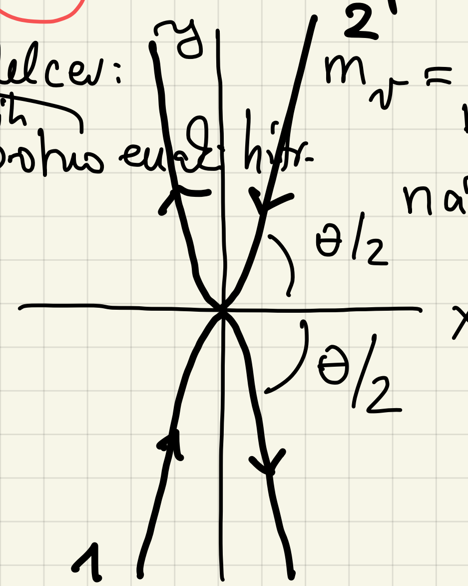
$$m_v = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

m_0: naša običajna masa

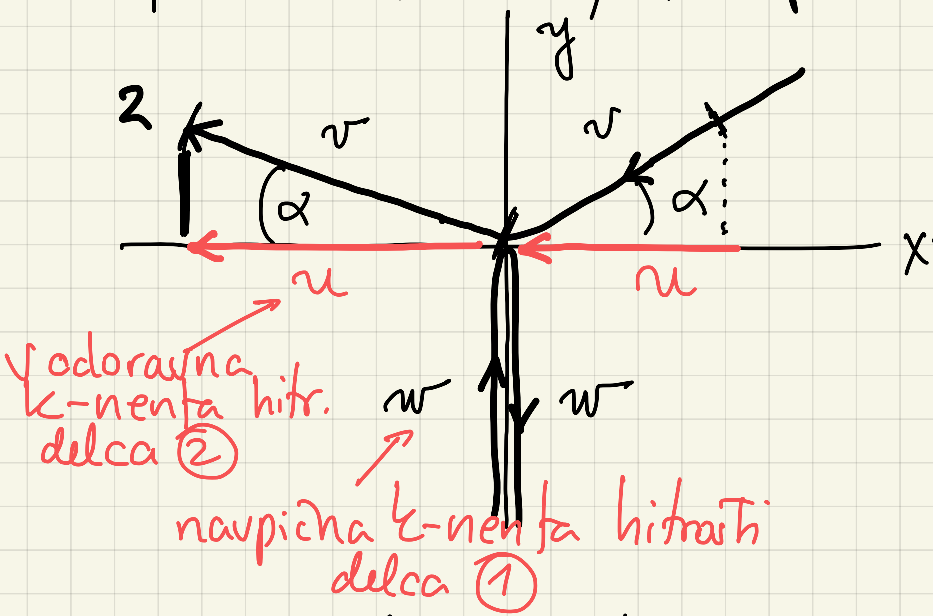
Oglejmo si elastični (prožni) trk dveh delcev: enakih + nasprotno enakih hitr.

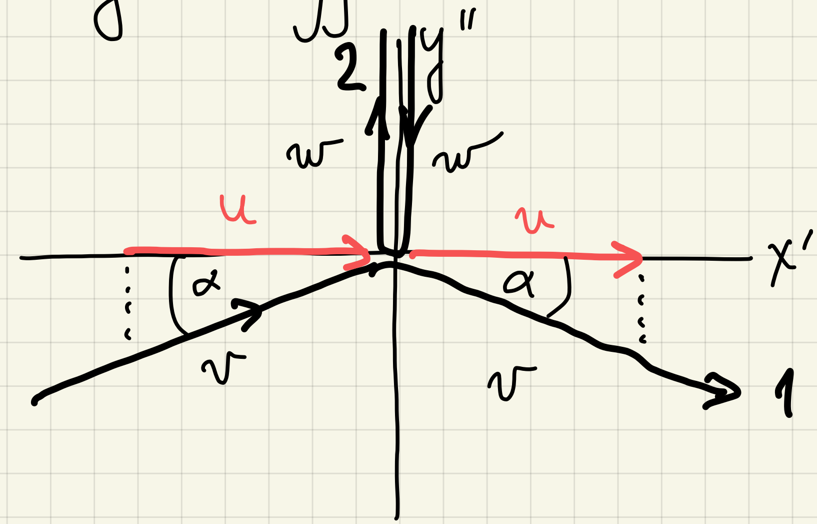


≡



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





Formula za transf. hitrosti: $u_y = \dfrac{u_y'}{\gamma_v\left(1+\dfrac{u_x' v}{c^2}\right)} = \dfrac{u_y'\sqrt{1-v^2/c^2}}{1+\dfrac{\cancel{u_x'}\, v}{c^2}}$

(tedanje oznake!)

Toda pri nas je

$$\left.\begin{aligned} v &\longrightarrow u \\ u_y &= u\tan\alpha \\ u_y' &= w \\ u_x' &= 0 \end{aligned}\right\}$$

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

$\Longrightarrow$ $\vec{p} = \sum_i m\vec{v}_i$ ne more veljati pri visokih hitrostih!

⇒ sprememba prečne GK "navpično" gibajočega se delca je

$$\Delta p = 2 m_w w$$

⇒ "poševno" sipani delec ima vodoravno hitrost u in navpično $w\sqrt{1-\beta_u^2}$, njegova relativistična masa (tega pojma se pravzaprav želimo še znebiti) je m_v,

... njegova sprememba prečne GK je torej

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

Če naj bo celotna prečna GK enaka nič, mora biti razmerje $\Delta p/\Delta p' = 1$:

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

Vzemimo limitni primer, ko je w zelo majhna (zelo "nežen" trk) ⇒ v in u praktično enaka! in $m_w \to m_0$, $m_v \to m_u$

$$\Rightarrow \boxed{m_u = \frac{m_0}{\sqrt{1-u^2/c^2}}}$$

mirovna masa [delca]

hitrost delca !

Relativistična masa

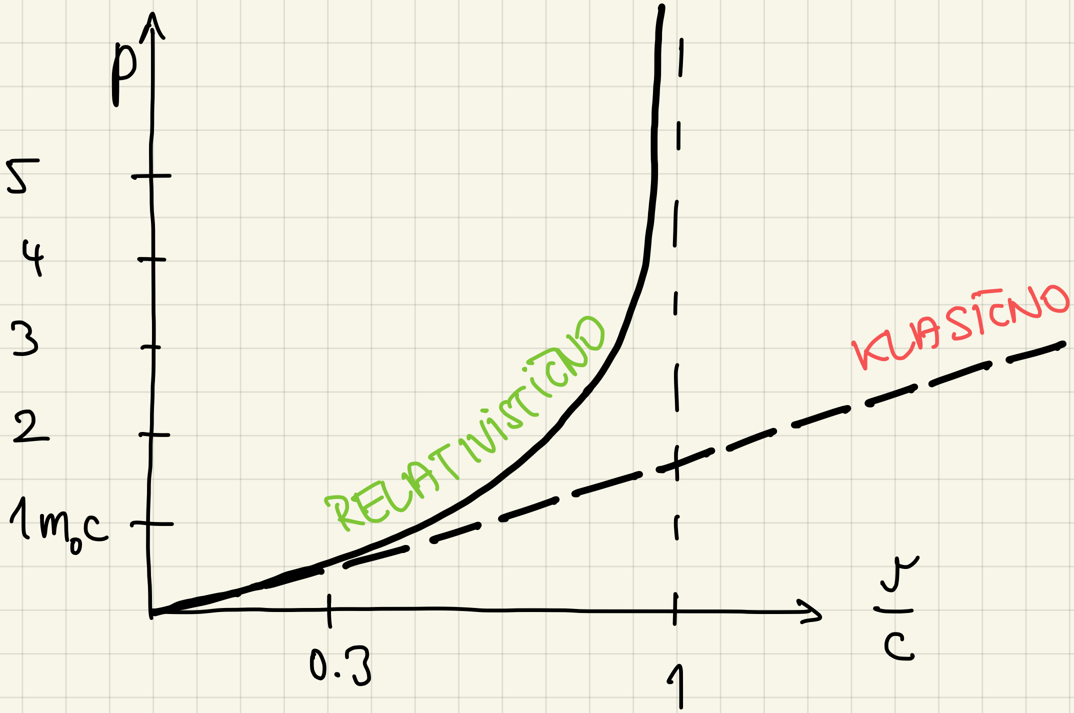
(tega izraza ne bomo rabili)

samo mirovno maso bi radi pojmovali kot bistveno/intrinzično lastnost delca

$u \to v$ ... običajne oznake

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

Relativistična GK (dober pojem!)



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

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

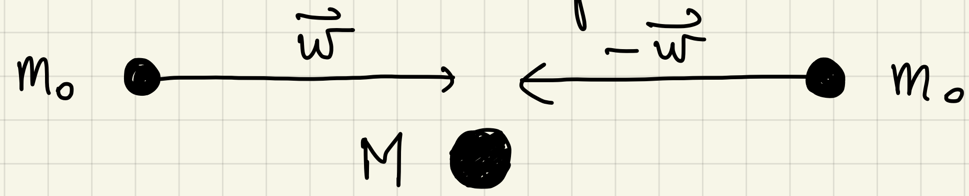
$$m_w = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta_w^2}}, \quad m_v = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta_v^2}}$$

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

$$= \underline{1-\beta_u^2} \quad ✓$$

Neelastični (neprožni) trk

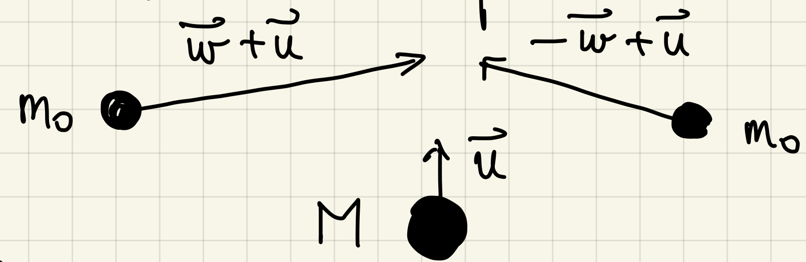
* centralni trk identičnih teles z nasprotno enakima hitrostma $\pm \vec{w}$



} pred trkom

} po trku

Zamisliva si droben popravek k tej sliki:



} pred

} po

... kot da bi trk gledali iz dvigala, ki gre z $-\vec{u}$ navzdol

Če naj se ohrani navpična komponenta GK:

pred trkom: $p \approx 2 m_w \cancel{u}$!!

po trku: $p' \approx M_u u$!!

$= M_0 \cancel{u}$ ← ker je u tako majhen, da je $M_u \approx M_0$

zahtevamo $p = p'$ $\Rightarrow$ $\boxed{M_0 = 2 m_w}$

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

Zdaj pa še **relativistična energija**

* kako smo vpeljali kinetično energijo v klasični fiziki?

$$F = ma = m\frac{dv}{dt} = m\frac{dv}{dx}\underbrace{\frac{dx}{dt}}_{v} = mv\frac{dv}{dx} \longrightarrow F\,dx = mv\,dv$$

$$\int_{v}^{v'} m\tilde{v}\,d\tilde{v} = \int_{x}^{x'} F\,d\tilde{x} \Longrightarrow \Delta E_k = \frac{mv'^2}{2} - \frac{mv^2}{2} = A = F\Delta x$$

* pri relativistični izpeljavi potrebna previdnost zaradi "$m = m(v)$"

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

V 1d:
$$F = \frac{d}{dt}(\gamma m_0 v) = \underbrace{\frac{dx}{dt}}_{v}\frac{d}{dx}(\gamma m_0 v) \longrightarrow F\,dx = m_0 v\,\underbrace{d(\gamma v)}$$

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

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

Potrebujemo $m_0 \int \gamma^3(v)\, v\, dv$

nova spremenljivka: $u^2 = \frac{1}{\gamma^2} = 1-\beta^2 = 1-\frac{v^2}{c^2}$

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

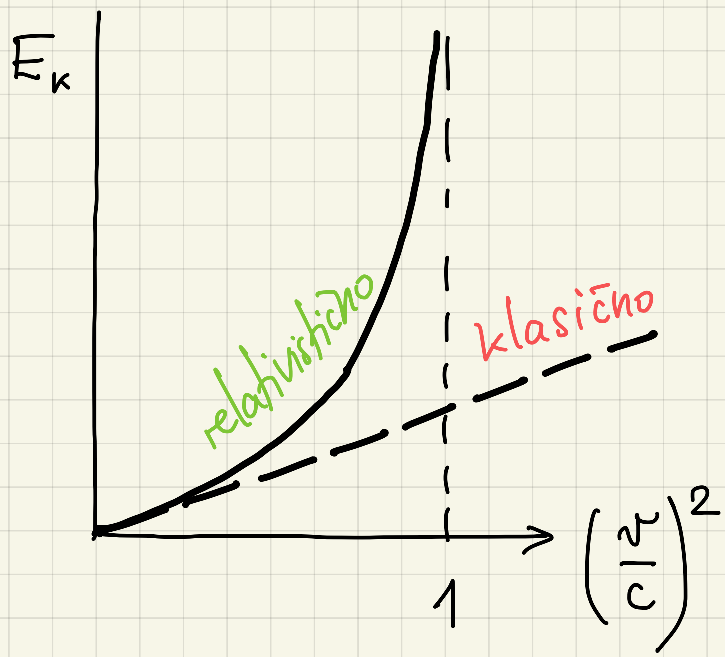
$$m_0 \int_0^v \gamma^3(v)\, v\, dv = -m_0 c^2 \int_{v=0}^{v} u^{-3}\, u\, du = m_0 c^2 \frac{1}{u}\Big|_{v=0}^{v}$$

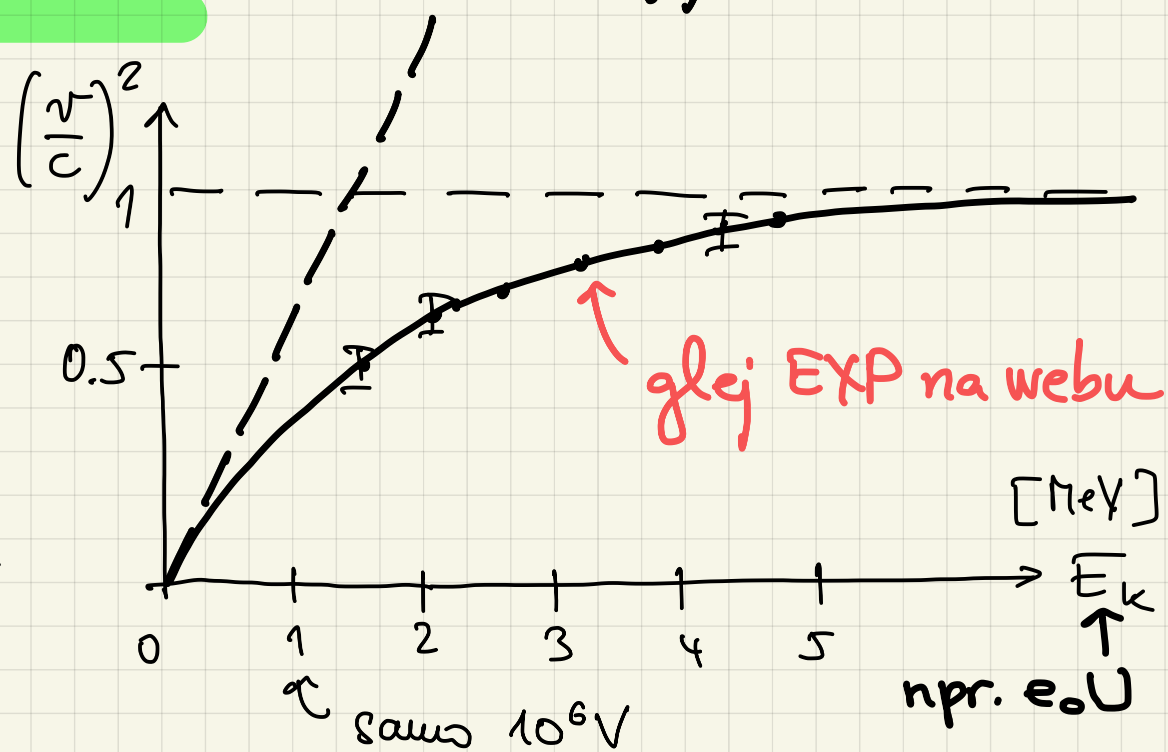
$$= m_0 c^2 \gamma \Big|_{v=0}^{v} = m_0 c^2 \gamma - m_0 c^2$$

začeli smo pri $v=0$

$$\Rightarrow \boxed{E_k = m_0 c^2 (\gamma - 1)}$$

relativistična kinetična energija





Energija delca v mirovanju: $E_0 = m_0c^2$ = mirovna energija (rest energy, m_0 = rest mass)

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

$$\boxed{\begin{aligned} E &= E_0 + E_k = \gamma m_0 c^2 \\ E_0 &= m_0 c^2 \\ E_k &= (\gamma - 1) m_0 c^2 \end{aligned}}$$

celotna

mirovna

kinetična

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

Npr.: $m(e^\pm) = 0.51\ \mathrm{MeV}/c^2$, $m(\mu^\pm) \simeq 106\ \mathrm{MeV}/c^2$

$m(p) \simeq 938.3\ \mathrm{MeV}/c^2$; $m(n) \simeq 939.6\ \mathrm{MeV}/c^2$

Preverimo, ali dobimo nerelativistični izraz pri majhnih hitrostih v:

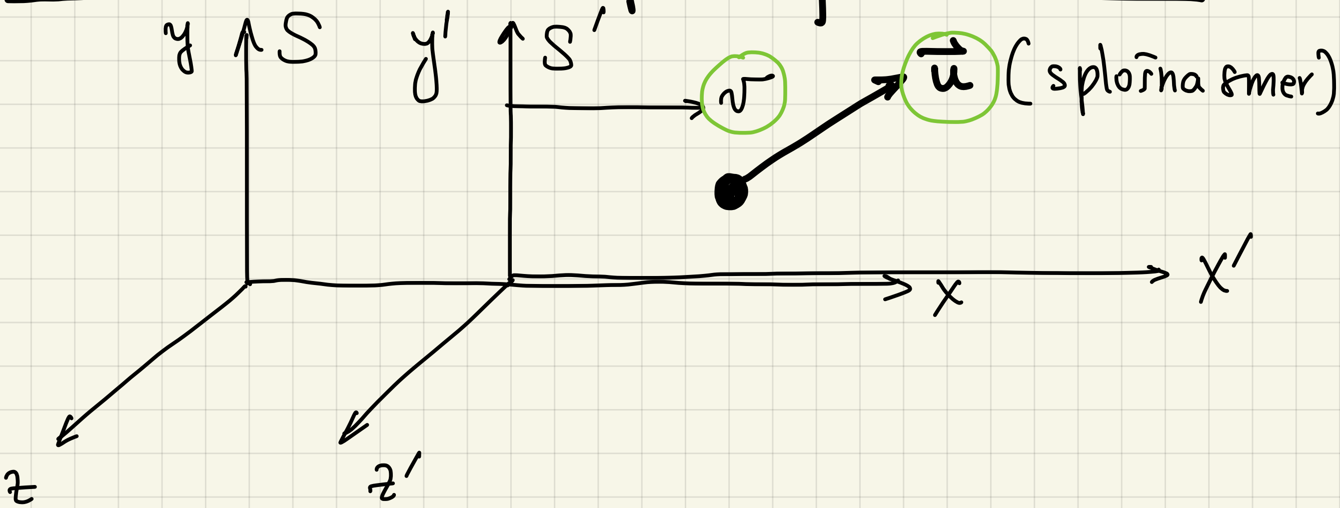
$$E_k = m_0c^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} - 1\right) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Taylor, če } \frac{v}{c} \ll 1}}{\approx} m_0c^2\left(\cancel{1} + \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2} + \frac{3}{8}\frac{v^4}{c^4} + \ldots \cancel{-1}\right)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2}m_0v^2\left(1\right.}_{\checkmark} + \frac{3}{4}\frac{v^2}{c^2} + \left.\ldots\right)$$

✓ klasični izr.

(Relativistična) transformacija GK in E

$m_0 \rightarrow m$



V sistemu S:

$$E = \gamma_u m c^2$$
$$p_x = \gamma_u m u_x$$
$$p_y = \gamma_u m u_y$$
$$p_z = \gamma_u m u_z$$

$$\gamma_u = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}$$

$u = |\vec{u}|$!

to transf. že znamo

V sistemu S':

$$E' = \gamma_u' m c^2$$
$$p_x' = \gamma_u' m u_x'$$
$$p_y' = \gamma_u' m u_y'$$
$$p_z' = \gamma_u' m u_z'$$

$$\gamma_u' = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{u'^2}{c^2}}}$$

$$\gamma_u' = \left(1 - \frac{u_x'^2 + u_y'^2 + u_z'^2}{c^2}\right)^{-1/2}$$

LT hitrosti

$$= \left(1 - \frac{(u_x - v)^2}{c^2\left(1 - \frac{u_x v}{c^2}\right)^2} - \frac{u_y^2\left(1 - v^2/c^2\right)}{c^2\left(1 - \frac{u_x v}{c^2}\right)^2} - \frac{u_z^2\left(1 - v^2/c^2\right)}{c^2\left(1 - \frac{u_x v}{c^2}\right)^2}\right)^{-1/2}$$

$$= \left(\frac{c^2\left(1 - \frac{u_x v}{c^2}\right)^2 - (u_x - v)^2 - u_y^2\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) - u_z^2\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}{c^2\left(1 - \frac{u_x v}{c^2}\right)^2}\right)^{-1/2}$$

$$= \left(\frac{c^2 - \cancel{2u_x v} + \underbrace{u_x^2\frac{v^2}{c^2} - u_x^2}_{} + \cancel{2u_x v} - v^2 \underbrace{- u_y^2\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}_{} \underbrace{- u_z^2\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}_{}}{c^2\left(1 - \frac{u_x v}{c^2}\right)^2}\right)^{-1/2}$$

$$= \left(\frac{c^2 - v^2 - u^2\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}{c^2\left(1 - \frac{u_x v}{c^2}\right)^2}\right)^{-1/2} = \gamma_v \frac{1 - \frac{u_x v}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}$$

$$= \gamma_v \underbrace{\gamma_u}_{} \left(1 - \frac{u_x v}{c^2}\right) = \underbrace{\gamma_u'}_{}$$

To uporabimo v enačbi za E':

$$E' = \underbrace{\gamma_{u'}}_{} mc^2 = \frac{mc^2}{\sqrt{1-u'^2/c^2}} = \gamma_v \left[\underbrace{\frac{mc^2}{\sqrt{1-u^2/c^2}}}_{E} - \underbrace{\frac{m\cancel{c^2} u_x v/\cancel{c^2}}{\sqrt{1-u^2/c^2}}}_{v p_x} \right]$$

$$\boxed{E' = \gamma_v (E - v p_x)}$$

Po podobnem računu (DN) dobimo

$$p_x' = \gamma_{u'} m u_x' = \frac{m u_x'}{\sqrt{1-u'^2/c^2}} = \gamma_v \left[\underbrace{\frac{m u_x}{\sqrt{1-u^2/c^2}}}_{p_x} - \underbrace{\frac{m v \frac{c^2}{c^2}}{\sqrt{1-u^2/c^2}}}_{vE/c^2} \right]$$

$$\boxed{\begin{aligned} p_x' &= \gamma_v \left(p_x - \frac{v}{c^2} E\right) \\ p_y' &= p_y \\ p_z' &= p_z \end{aligned}}$$

Obratne transf.: brez $'$ $\leftrightarrow$ s $'$, $v \leftrightarrow -v$

$$E' = \gamma_v (E - v p_x) \qquad \therefore \qquad E = \gamma_v (E' + v p_x')$$
$$p_x' = \gamma_v (p_x - v E/c^2) \qquad\qquad p_x = \gamma_v (p_x' + v E'/c^2)$$
$$p_y' = p_y \qquad\qquad p_y = p_y'$$
$$p_z' = p_z \qquad\qquad p_z = p_z'$$

... vse na moč podobno LT za čas. in krajevne koordinate !
? kako bi to organizirali v četverec ?

Spomnimo se: lastni čas τ, koordinatni čas t (proper, improper)

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

Komponente "običajne" hitrosti, $\vec{v} = d\vec{r}/dt$, ne tvorijo vektorja (za potrebe LT), ker dt ni skalar pri LT. Kaj hočem povedati ?

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

tu implicirano $\sum_{\mu,\nu}$ (Einsteinova konvencija)

τ je skalar ! (glede na LT)

$$ds = c\, d\tau \qquad \text{oz.} \qquad d\tau = \frac{1}{c}\, ds$$

$$\Delta\tau = \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{c}\, ds = \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{c} \sqrt{\eta_{\mu\nu}\, dx^\mu dx^\nu} = \quad \dots$$

$$\ldots = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 - \frac{1}{c^2}\underbrace{\left[\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dz}{dt}\right)^2\right]}_{v^2(t)}}\, dt$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 - \frac{v^2(t)}{c^2}}\, dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{dt}{\gamma(t)} = \Delta\tau$$

zveza med lastnim in koord. časom

! četverec

$\Rightarrow$ Torej tudi $\frac{d\underline{r}}{dt} = \left(c, \frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt}\right)$ $\underline{\underline{\text{ni}}}$ četverec!

$\underline{r} = (ct, x, y, z)$

Pač pa je četverec tole:

$$! \rightarrow \underline{v} = \frac{d\underline{r}}{d\tau} = \left(c\frac{dt}{d\tau}, \frac{dx}{d\tau}, \frac{dy}{d\tau}, \frac{dz}{d\tau}\right) = \gamma \frac{d\underline{r}}{dt}$$

$$= \gamma (c, v_x, v_y, v_z)$$

$$= \gamma (c, \vec{v}) = \underline{v}$$

ČETVEREC HITROSTI (velocity 4-vector)

skalarno

ta se transformira po LT! $\longrightarrow$

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

$$\underline{p} = m\underline{v} = (m\gamma c, m\gamma\vec{v}) = \boxed{(E/c, \vec{p}) = \underline{p}}$$

$\uparrow$ (mišljeno m_0)

$E = \gamma mc^2$!

ČETVEREC GK (četverec E in GK)

NB To se zdaj transformira kot vsak drug četverec! Npr. $\underline{p}' = \underline{\underline{L}}\,\underline{p}$ z istim $\underline{\underline{L}}$, kot smo ga spoznali pri $\underline{r}' = \underline{\underline{L}}\,\underline{r}$.

(Relativistična) zveza med energijo in gibalno količino

$\underline{p} = (E/c, \vec{p})$, ker je to četverec, ima svojo invarianto:

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

Npr. 1) v S, kjer se giblje delec s hitrostjo v: $E = \gamma m c^2$, $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$

2) v S', kjer ima $E_0 = mc^2$ (samo mirovno energijo)

$\vec{p}_0 = \vec{0}$ (miruje v S')

$\Rightarrow$ $\underline{p} = (E/c, \vec{p})$, $\underline{p}' = (E_0/c, \vec{0})$

$$\underline{p}\cdot\underline{p} \stackrel{!}{=} \underline{p}'\cdot\underline{p}' = \underbrace{\left(E/c\right)^2 - \vec{p}^{\,2}}_{v\ S} = \underbrace{\left(E_0/c\right)^2 - \vec{0}^{\,2}}_{v\ S'}$$

običajni $|\vec{p}|^2 = \underbrace{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$ tu smo še vedno v evklidskem svetu!

$\left(E_{kin} = \frac{p^2}{2m}\right)_{KLAS.}$ $\Rightarrow$ $\boxed{E^2 = m^2c^4 + \vec{p}^{\,2}c^2}$ $E = E_{kin} + E_0$

Brezmasni delci $m \to 0$ $\Rightarrow$ $\boxed{E = pc}$ se gibljejo s svetlobno hitrostjo c (fotoni in približno ν)

Enačba gibanja (relativistični "Newtonov zakon")

* videli smo, da $\vec F = m(d\vec v/dt)$ ne more biti pravilna relativist. gibalna enačba, saj dopušča, da bi bila lahko v v izbranem inerc. sistemu celo $\to \infty$
* pravilna oblika je bila $\vec F = \dfrac{d\vec p}{dt}$, $\quad \vec p = \gamma m \vec v$
* najpogosteje obravnavamo EM (Lorentzovo) silo: $\quad \vec F = e(\vec E + \vec v \times \vec B)$
  + Maxwellove enačbe

$$e(\vec E + \vec v \times \vec B) = m\frac{d(\gamma \vec v)}{dt} = \frac{d\vec p}{dt} \qquad \gamma = \gamma(v)\ !$$

Iz dosedanje današnje ure vemo, da tako zapisana sila ni del četverca, ker imamo na desni odvod po koordinatnem času! $\Rightarrow$ "običajna" sila $\vec F$ se ne transformira z LT. Lahko pa tvorimo četverec, ki mu pravimo sila Minkowskega, tako da odvajamo četverec GK po lastnem času:

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

Sila Minkowskega

Torej

$$\boxed{\underline{F} = \left(\gamma \underbrace{\frac{d}{dt}\left(\frac{E}{c}\right)},\ \gamma \underbrace{\frac{d\vec p}{dt}}_{\vec F}\right) = \left(\gamma \frac{\vec F \cdot \vec v}{c},\ \gamma \vec F\right)}$$

$$\underline{p} = \left(\frac{E}{c}, \vec p\right)$$

dE/dt = moč (sile) $\quad P = \vec F \cdot \vec v$

Klas. limita $(v \ll c)$: $\quad \underline{F} = (0, \vec F)$.

splošen $\vec F$!

Zdaj lahko gibalno enačbo (formulo) zapišemo v obliki "Newtonovega zakona":

$$\underline{\mathcal{F}} = m \frac{d\underline{v}}{d\tau}$$ ← četverec! ← lastni čas!

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

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

$$\frac{1}{c}\frac{dE}{dt} \underset{E=\gamma mc^2}{=} mc \frac{d\gamma}{dt} = mc\gamma^3 \frac{\vec{a}\cdot\vec{v}}{c^2}$$

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{d}{dt}\left(1 - \frac{\vec{v}\cdot\vec{v}}{c^2}\right)^{-1/2} = \left(1 - \frac{\vec{v}\cdot\vec{v}}{c^2}\right)^{-3/2} \left(-\cancel{\frac{1}{2}}\right)\left(-\frac{\cancel{2}\vec{v}}{c^2}\right) \underbrace{\frac{d\vec{v}}{dt}}_{\vec{a}}$$

$$= \gamma^3 \frac{\vec{a}\cdot\vec{v}}{c^2}$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} \underset{\vec{p}=m\gamma\vec{v}}{=} m\frac{d}{dt}(\gamma\vec{v}) = m\left(\frac{d\gamma}{dt}\vec{v} + \gamma \underbrace{\frac{d\vec{v}}{dt}}_{\vec{a}}\right) = m\gamma\vec{a} + m\gamma^3 \frac{(\vec{a}\cdot\vec{v})}{c^2}\vec{v}$$

Torej
$$\underline{\mathcal{F}} = \gamma\left(mc\gamma^3 \frac{\vec{a}\cdot\vec{v}}{c^2},\ m\gamma\vec{a} + m\gamma^3 \frac{(\vec{a}\cdot\vec{v})}{c^2}\vec{v} \right)$$

... in če to delimo z m, dobimo četverec pospeška!

%

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

četverec pospeška

(klasična limita $(v \ll c)$: $\underline{a} = (0, \vec{a})$)

S tem lahko napišemo "2. Newtonov zakon":

$$\boxed{\underline{F} = m\underline{a}}$$

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

$$m\, d(\gamma v) = F\, dt = e\mathcal{E}\, dt$$

začetni pogoj: $v(t=0) = 0$ (delec sprva miruje)

$$\gamma v = \frac{e\mathcal{E}}{m} t = c\alpha t \qquad \alpha = \frac{e\mathcal{E}}{mc} \left[\frac{1}{s}\right]$$

se pravi:

$$\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} = \underbrace{\frac{e\mathcal{E}}{mc}}_{=\alpha} t \quad \Rightarrow \quad \beta = \frac{v}{c} = \frac{\alpha t}{\sqrt{1+\alpha^2 t^2}}$$

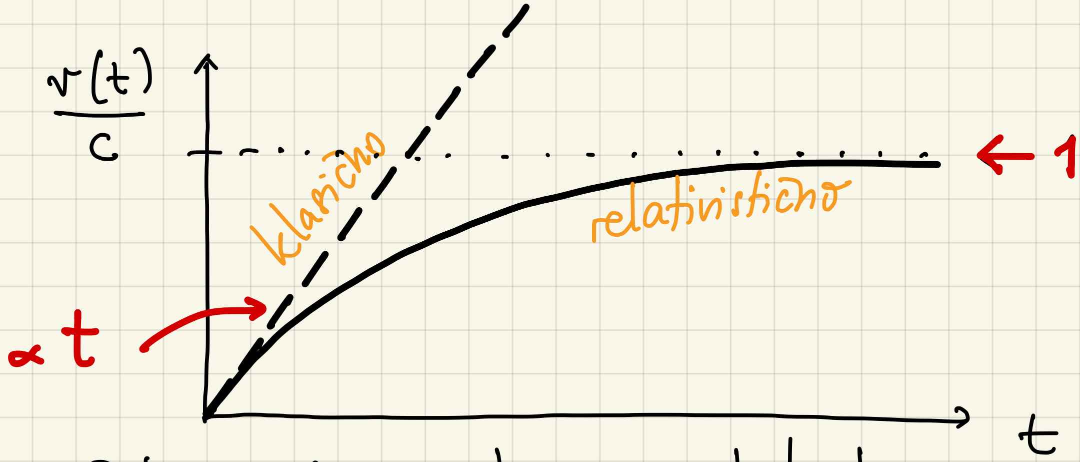
oz. $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \sqrt{1+\alpha^2 t^2}$

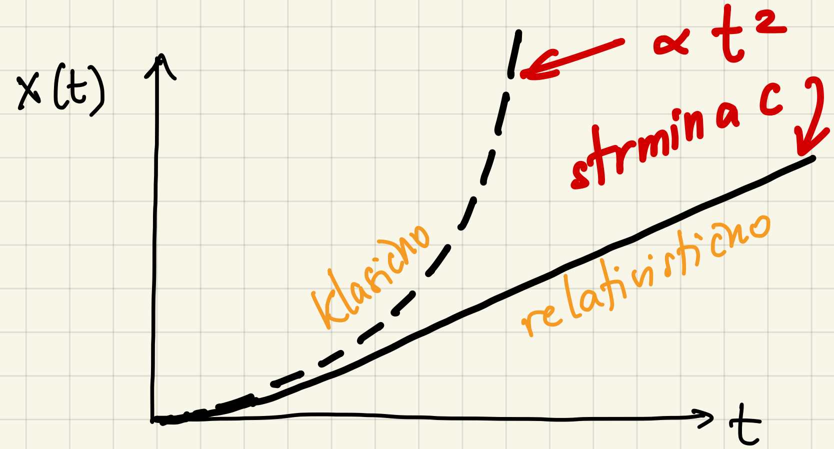
lab. štoparica

Limita $v = \frac{e\mathcal{E}}{m} t \ll c$ (majhne hitrosti oz. majhni časi)

$$\Rightarrow \quad \beta(t) = \alpha t$$

✓ ok klasično





Položaj delca: integriramo hitrost:

$$x(t) = \int_0^t v(t)\,dt = c\int_0^t \beta(t)\,dt = c\int_0^t \frac{\alpha t}{\sqrt{1+\alpha^2 t^2}}\,dt = \frac{mc^2}{e\mathcal{E}}\left(\sqrt{1+\alpha^2 t^2}-1\right)$$

✓ OK

$$\xrightarrow[\text{"kratek čas"}]{t \ll \frac{1}{\alpha}} \quad \frac{1}{2}\underbrace{\left(\frac{e\mathcal{E}}{m}\right)}_{a \text{ (klasični)}} t^2$$

$$\gamma = \sqrt{1+\alpha^2 t^2} \Rightarrow$$

$$\tau = \int_0^t \frac{dt}{\gamma} = \int_0^t \frac{dt}{\sqrt{1+\alpha^2 t^2}} = \frac{1}{\alpha}\sinh^{-1}(\alpha t)$$

$$\Rightarrow \boxed{t = \frac{1}{\alpha}\sinh(\alpha \tau)}$$

Za dolge čase je koordinatni čas (t) eksponentno daljši od lastnega (τ)

Krajevno spremenljivo električno polje

* opravimo delo (na delco) $A = e\int \vec{E}\cdot d\vec{s} = eU \qquad (U = \Delta U)$

$$eU = \underbrace{mc^2(\gamma - 1)}_{\text{potem}} - \underbrace{0}_{\text{prej}}$$ samo sprememba kinetične energije!

$$\rightarrow \quad \gamma = \frac{eU + mc^2}{mc^2} \implies \beta^2 = 1 - \frac{m^2c^4}{(eU+mc^2)^2}$$

$\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$

$v = \sqrt{\frac{2E_{kin}}{m}}$ ✓

$$\beta = \frac{v}{c} = \sqrt{\frac{eU(eU+2mc^2)}{(eU+mc^2)^2}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2eU}{mc^2}} & ; \ eU \ll mc^2 \\ 1 & ; \ eU \gg mc^2 \end{cases}$$

... naslednjič $\vec{B}$ ...

Konstantno magnetno polje

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

$$m\frac{d}{dt}(\gamma v) = m\gamma \underbrace{\frac{d\vec{v}}{dt}}_{\vec{a}} = e\vec{v}\times\vec{B}$$

kroženje !

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

$$m\gamma\omega\cancel{v} = e\cancel{v}B \quad\rightarrow\quad \boxed{\omega_c = \frac{eB}{\gamma m}}$$

.... hitrost delca $\perp$ polje

ciklotronska frekvenca

$$m\gamma\frac{v^{\cancel{2}}}{r} = e\cancel{v}B \quad\rightarrow\quad \boxed{r = \frac{m\gamma v}{eB} = \frac{p}{eB}}$$

polmer krožnice, po kateri kroži delec v homog. m.p. B

$\therefore$ zveza $p = eBr$ (G v klas. fiziki)

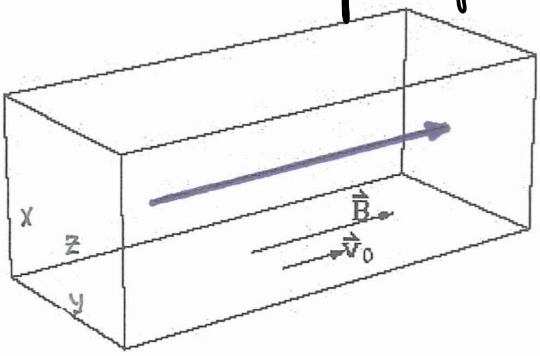
Zgled: e^-, $E = 5\,\mathrm{GeV}$, $\gamma = E/m_e c^2 = 10^4$

$pc = \sqrt{E^2 - \cancel{m_e^2 c^4}} \approx E \quad\longrightarrow\quad p \approx E/c$

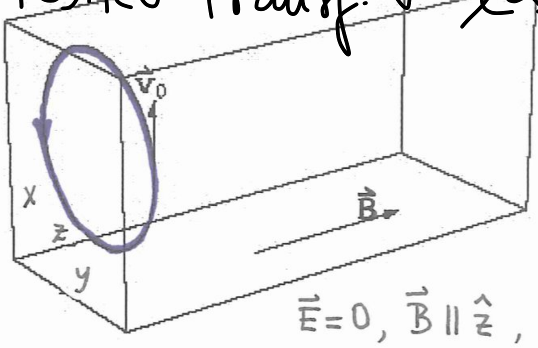
$B = 1\,\mathrm{T} \quad\Longrightarrow\quad r = p/eB \approx 17\,\mathrm{m}$, $\omega_c \approx 1.8\cdot 10^7/\mathrm{s}$

Več pri vajah, ... pri splošnih konfiguracijah $\vec{E}, \vec{B}$

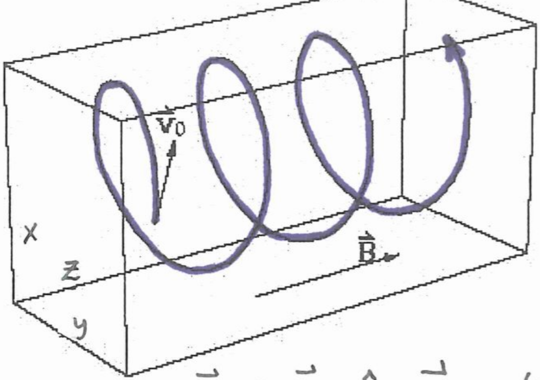
* relativistično: iste enačbe, če je tudi $\vec{v}_0$ poljuben
* včasih dober pristop: rešujemo v lastnem sistemu (τ) in rešitev transf. v laboratorijski sistem



$\vec{E}=0$, $\vec{B} \parallel \hat{z}$, $\vec{v}_0 \parallel \hat{z}$

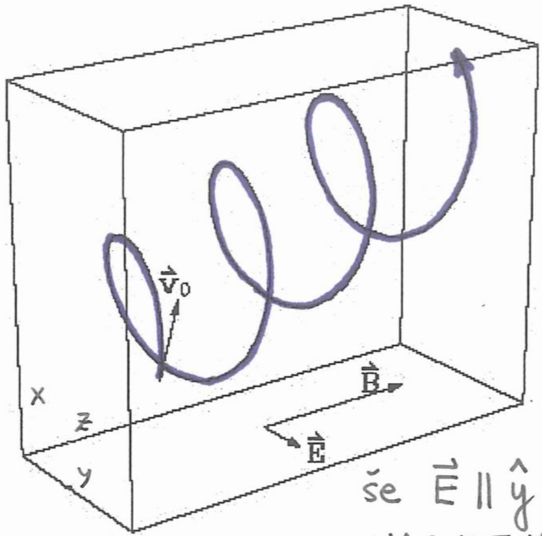


$\vec{E}=0$, $\vec{B} \parallel \hat{z}$, $\vec{v}_0 \parallel \hat{x}$



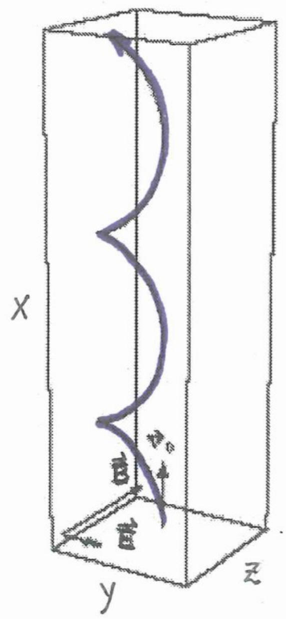
$\vec{E}=0$, $\vec{B} \parallel \hat{z}$, $\vec{v}_0$ v (x,z)

→ VIJAČNICA



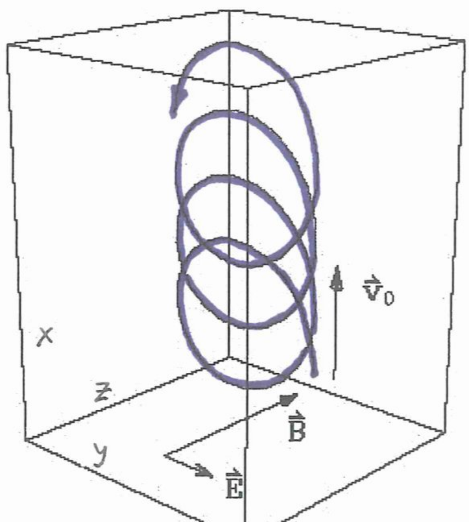
še $\vec{E} \parallel \hat{y}$

→ NAGNJENA VIJAČNICA



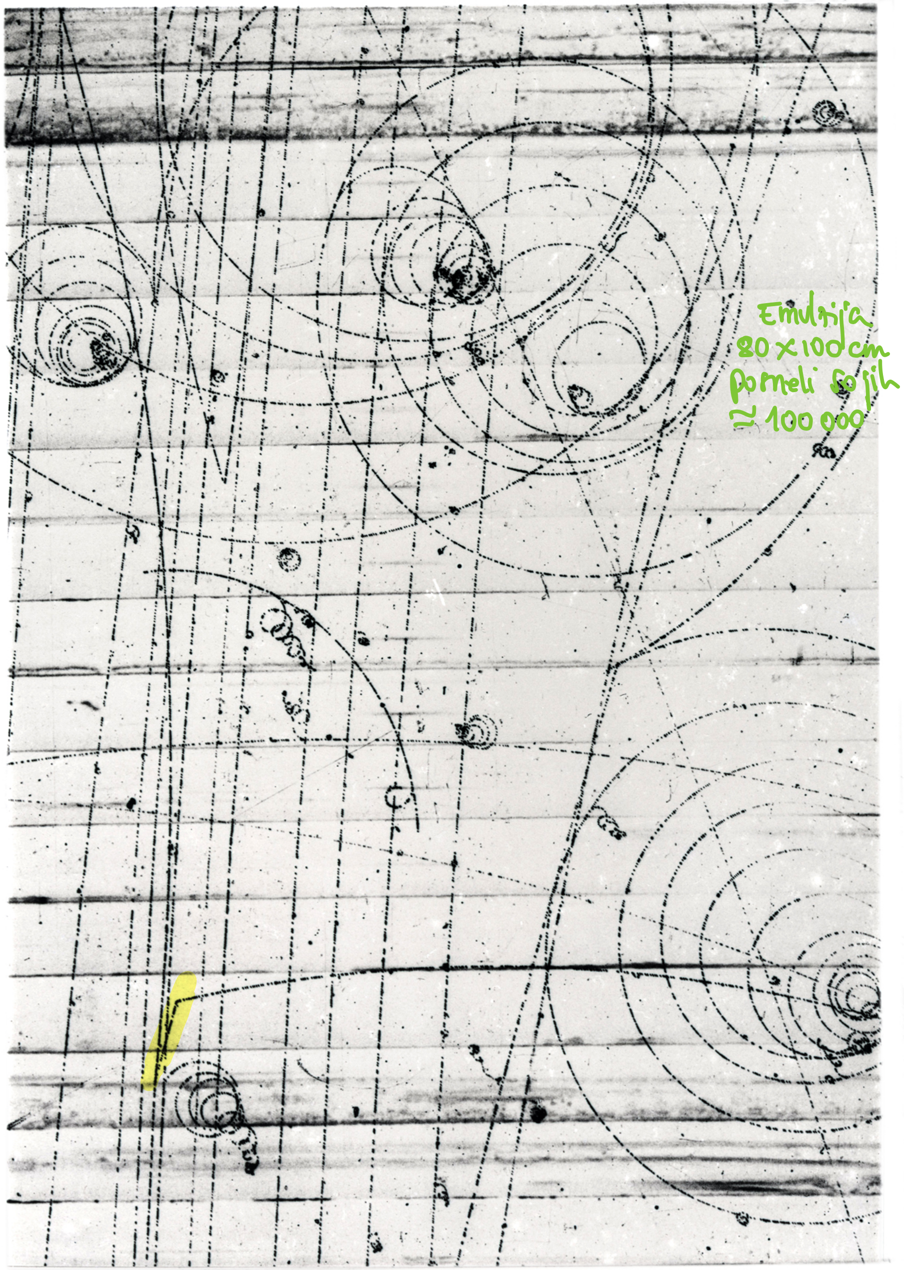
$\vec{E} \parallel \hat{y}$, $\vec{B} \parallel \hat{z}$, $E/B=0.1$

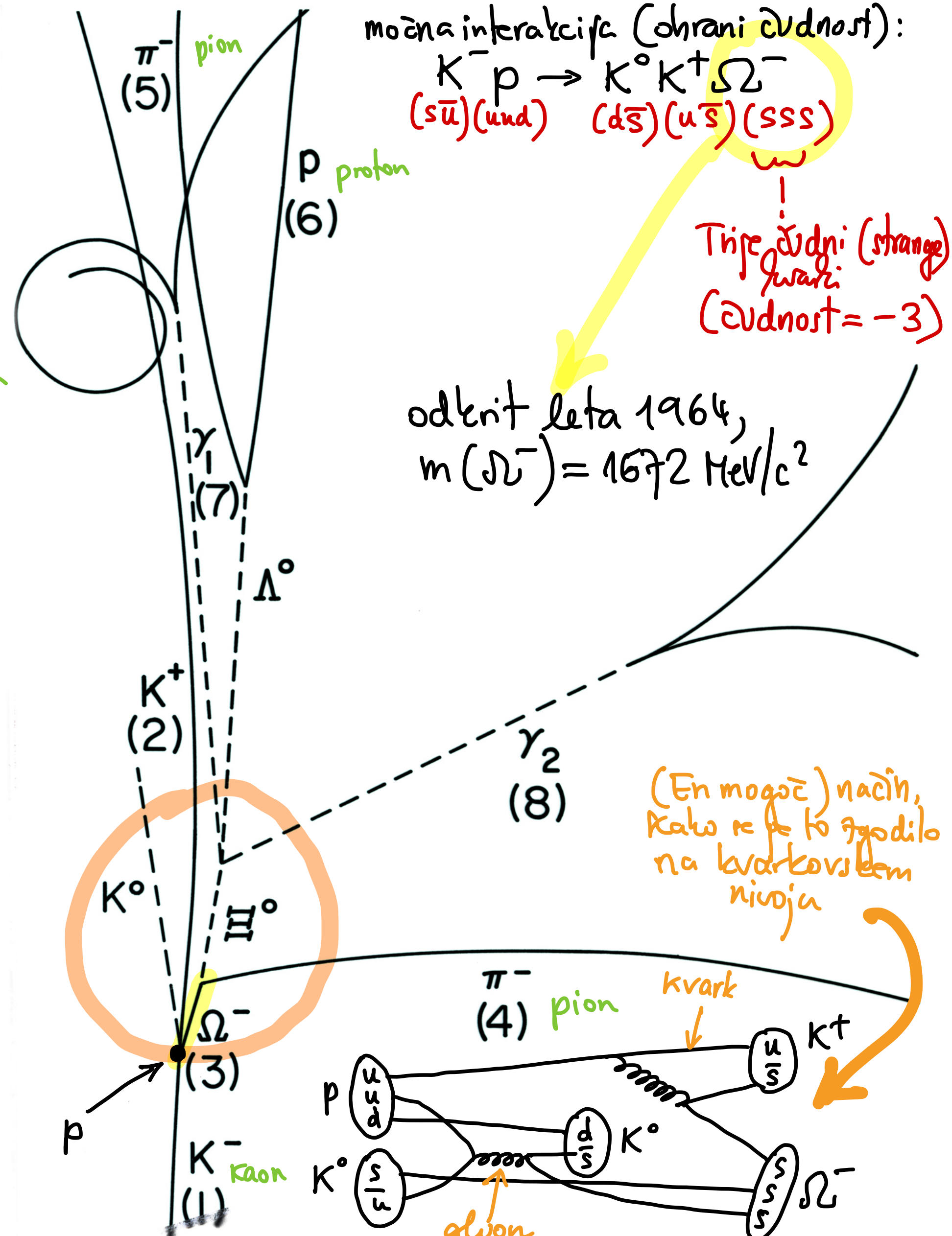
$\vec{v}_0 \parallel x$



$E/B=0.02$

Biblija: Batygin, Toptygin (knjižnica)...


Emulzija
80 x 100 cm
posneli so jih
≃ 100 000


močna interakcija (ohrani čudnost):
$K^- p \rightarrow K^0 K^+ \Omega^-$
(sū) (uud) (ds̄) (us̄) (sss)
Tije čudni (strange) kvarki
(čudnost = −3)
odkrit leta 1964,
$m(\Omega^-) = 1672$ MeV/c^2
π^- (5) pion
p (6) proton
γ_1 (7)
Λ^0
K^+ (2)
γ_2 (8)
(En mogoč) način, kako se je to zgodilo na kvarkovskem nivoju
K^0
Ξ^0
π^- (4) pion
Ω^- (3)
p
K^- kaon (1)
kvark
K^+
p
K^0
K^0
Ω^-
gluon

Transformacija el. in mag. polja

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

$$\underline{\mathcal{F}} = \left(\gamma \frac{\vec{F}\cdot\vec{v}}{c}, \gamma \vec{F}\right) \qquad \vec{F} = e\left(\vec{\mathcal{E}} + \vec{v}\times\vec{B}\right)$$

vezan na hitrost delca!

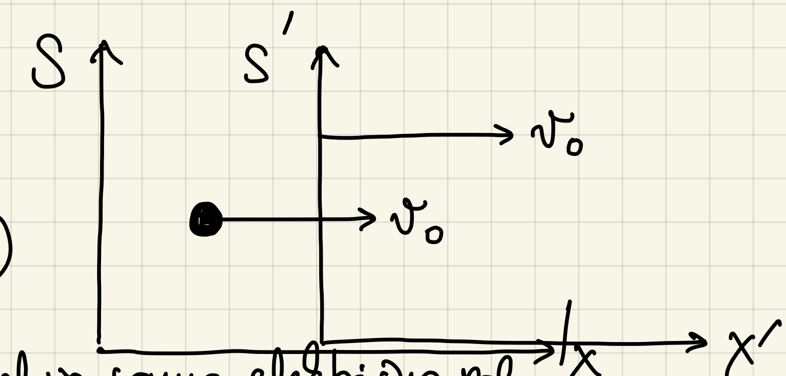
Sila $\underline{\mathcal{F}}$ transformira po LT, zato je transformacija iz sistema S' v S:

(★) $$\mathcal{F}_x = \gamma F_x = \gamma_0\left(\mathcal{F}_x' + \beta_0 \mathcal{F}_0'\right)$$

vsebujeta info o LT $(S\to S')$

$$= \gamma_0\left(\gamma' F_x' + \beta_0 \gamma' \frac{\vec{F}'\cdot\vec{v}'}{c}\right)$$

$$\mathcal{F}_y = \gamma F_y = \gamma' F_y'$$
$$\mathcal{F}_z = \gamma F_z = \gamma' F_z'$$



Ob takšni sliki $\gamma = \gamma_0$, $\gamma' = 1$ $(v' = 0)$

$\Downarrow$

v S' nanj deluje samo električno polje!

Pišemo prispevke k (★):

$$\gamma_0 F_x = \gamma_0\left(e\mathcal{E}_x + \cancel{e\underbrace{(\vec{v}\times\vec{B})_x}}\right) = \gamma_0\left(e\mathcal{E}_x' + \cancel{e(\underset{=0}{\vec{v}'}\times\vec{B}')_x} + \cancel{\beta_0 \frac{\vec{F}'\cdot\overset{=0}{\vec{v}'}}{c}}\right)$$

$v_y B_z - v_z B_y = 0$ (!) ker LT vzdolž x, ne more narediti neničelnih hitrosti iz $\vec{v}' = 0$.

$$\Rightarrow \quad \underline{\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_x'}$$

za komponento y moramo upoštevati tudi magnetni del sile:

$$\gamma_0 F_y = \gamma_0 \Big(e\mathcal{E}_y + e\underbrace{(\vec v \times \vec B)_y}_{-v_x B_z + v_z B_x = -v_0 B_z}\Big) = 1\cdot\Big(e\mathcal{E}_y' + e(\underset{\overset{\shortparallel}{0}}{\vec v'} \times \vec B')_y\Big)$$

$$v_x = v_0, \quad v_z = 0$$

Torej

$$\gamma_0(\mathcal{E}_y - v_0 B_z) = \mathcal{E}_y' \qquad (1)$$

in analogno

$$\gamma_0(\mathcal{E}_z + v_0 B_y) = \mathcal{E}_z'$$

Obratni transformaciji sta

$$\mathcal{E}_y = \gamma_0(\mathcal{E}_y' + v_0 B_z') \qquad (2)$$

$$\mathcal{E}_z = \gamma_0(\mathcal{E}_z' - v_0 B_y')$$

Damo (1) v (2):

$$\mathcal{E}_y = \gamma_0\big(\gamma_0(\mathcal{E}_y - v_0 B_z) + v_0 B_z'\big) = \gamma_0^2 \mathcal{E}_y - v_0\gamma_0^2 B_z + v_0\gamma_0 B_z'$$

$$\rightarrow \underline{B_z'} = \gamma_0 B_z - \mathcal{E}_y \frac{\gamma_0^2 - 1}{\gamma_0 v_0} = \underline{\gamma_0\left(B_z - \frac{v_0}{c^2}\mathcal{E}_y\right)}$$

Analogno je:

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

Manjka samo še transformacija $B_x \leftrightarrow B_x'$

Denimo, da imamo v S samo mag. polje vzdolž x.
Po zgornjih izrazih je lahko v S' od nič različno le polje B'_x.

Naj ima delec v S hitrost $\vec{v} = (v_0, 0, v)$

$\Rightarrow$ v S' hitrost $\vec{v}' = (0, 0, v')$

Sila ima samo komponento y, in po LT velja

$$L = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\gamma F_y = \gamma\left(e(\vec{v}\times\vec{B})_y\right) = \gamma e v B_x$$

$$= \gamma' F'_y \qquad \dots \qquad = \gamma e v' B'_x$$

$$\Rightarrow \underbrace{\gamma' v'}\, B'_x = \underbrace{\gamma v}\, B_x$$

tele sta komponenti četverca hitrosti!

ker $\gamma' v' = \gamma v$, je tudi: $\underline{B'_x = B_x}$

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

(obratne kot običajno)

Očitno se komponente $\vec{E}$ in $\vec{B}$ ne transformirajo kot komponente četverca...

%

Obe polji lahko združimo v **EM tenzor**, ki ga predstavimo z antisimetrično matriko:

$$\underline{\underline{F}} = \begin{pmatrix} 0 & E_x/c & E_y/c & E_z/c \\ -E_x/c & 0 & B_z & -B_y \\ -E_y/c & -B_z & 0 & B_x \\ -E_z/c & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix}$$

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

$$\text{"} \; \underline{\underline{F}}' = \underline{\underline{L}}\,\underline{\underline{L}}\,\underline{\underline{F}} \; \text{"}$$

Natančneje:

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

Sistemi delcev

Skupni četverec = vsota četvercev posameznih delcev:

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

Če na sistem ne deluje nobena zunanja sila, se mora ohraniti tak četverec!

$$\underline{P}_{zač} = \underline{P}_{kon} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{aligned} E_{zač} &= E_{kon}. \\ \vec{P}_{zač} &= \vec{P}_{kon}. \end{aligned}$$

TEŽIŠČNI SISTEM (CMS = center-of-mass sys.): relativistično ne moremo zahtevati, da bi bil $\underline{P} = 0$ (ves četverec), ker $LT(\underline{0}) = \underline{0}$.

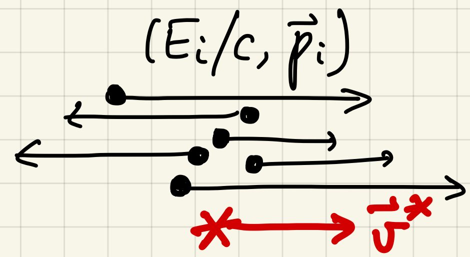
$\Longrightarrow$ še vedno zahtevamo samo $\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i = 0.$

Za nadaljnje zglede: samo vzdolž x

oznaka za tež. sistem

$$\sum_i p^*_{ix} = 0$$

i-ti delec



Izračunamo lahko hitrost težiščnega sistema, v^*

$$\sum_i p^*_{ix} = \gamma^*\left(\sum_i p_{ix} - \beta^* \sum_i \frac{E_i}{c}\right) \equiv 0 \quad (\text{def. CMS})$$

$$\gamma^* = (1-\beta^*)^{-1/2}, \quad \beta^* = v^*/c$$

$$\beta^* = \frac{\sum_i p_{ix} c}{\sum_i E_i} = \frac{v^*}{c}$$

hitrost tež. sistema

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

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

OK

Zdaj pa zelo uporabna reč: Kvadrat četverca je invarianta!

$$\underbrace{\left(\sum_i E_i\right)^2 - \left(\sum_i \vec{p}_i c\right)^2}_{\text{izvrednotimo na primer v LABOR. SIST.}} = \underbrace{\left(\sum_i E_i^*\right)^2 - \vec{0}^{\,2}}_{\text{v TEŽIŠČNEM SISTEMU}}$$

= def. CMS

Sploh ni nujno, da imamo "prej" (pred procesom) in "po" (po procesu) popravka z enakim naborom delcev!

$$\left(\sum_i E_i^*\right)^2 = \left(Mc^2\right)^2$$

skupna masa sistema, ki ni samo vsota mas posameznih delcev! (spomnimo na Feyn. trik)

Npr. tipični primer:

$$\underbrace{\left(\sum_i E_i\right)^2_{\text{zač.}} - \left(\sum_i \vec{p}_i c\right)^2_{\text{zač.}}}_{\text{LAB}} = \underbrace{\left(\sum_j E_j^*\right)^2}_{\text{TEŽ}}$$

Primer: prožni trk

* identična delca, masa m
* ② miruje, ① trči vanj s hitrostjo v
* namesto "zač" in "kon" $\longrightarrow$ X in X'

$$\left.\begin{aligned} E_1 + E_2 &= E_1' + E_2' \\ \vec{p}_1 + \vec{p}_2 &= \vec{p}_1' + \vec{p}_2' \end{aligned}\right\} \quad \text{i.e.} \quad \underline{P} = \underline{P}'$$

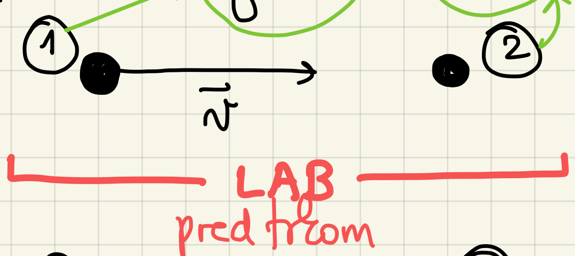
$$\underline{P}_c = \left(\sum_i E_i, \sum_i \vec{p}_i c\right)$$

$$\underline{P}'_c = \ldots$$

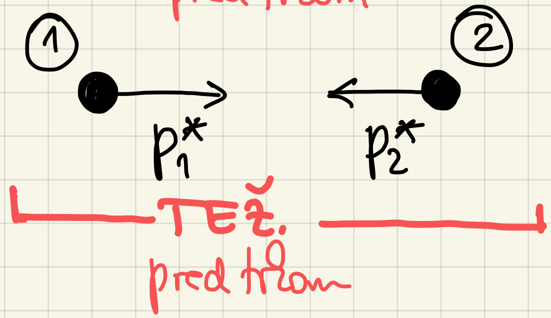
Nalogo rešimo v težiščnem sistemu, nato preslikamo v LAB.

$$\beta^* = \frac{\gamma m v c + 0}{\gamma m c^2 + m c^2} = \frac{\beta\gamma}{1+\gamma} = \sqrt{\frac{\gamma-1}{\gamma+1}}$$

$$\beta\gamma = \sqrt{\gamma^2-1}, \quad \beta^2 = \frac{\gamma^2-1}{\gamma^2}$$



$$\text{in} \quad \gamma^* = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^{*2}}} = \underline{\sqrt{\frac{\gamma+1}{2}}}$$

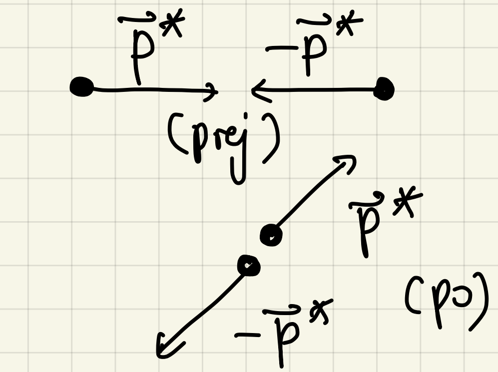


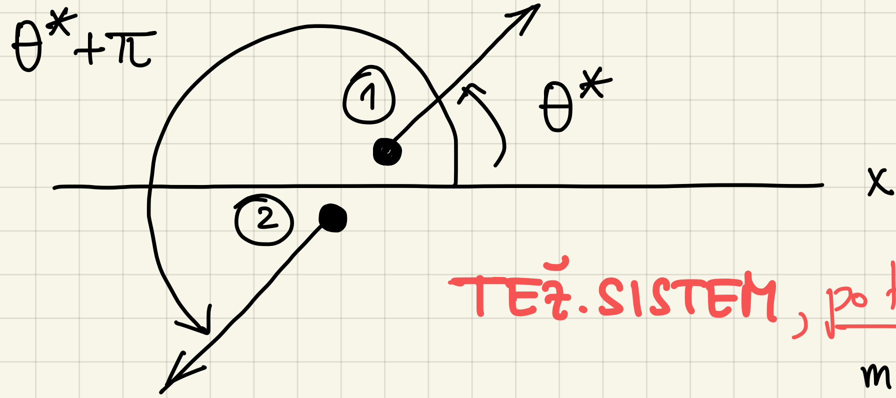
$$p_2^* = \gamma^*\left(\underset{\substack{\parallel \\ 0}}{p_2} - \beta^* \frac{\overset{\substack{mc^2 \\ \parallel}}{E_2}}{c}\right) = -\sqrt{\frac{\gamma+1}{2}}\sqrt{\frac{\gamma-1}{\gamma+1}}\, mc = -mc\sqrt{\frac{\gamma-1}{2}}$$

$$\parallel$$

$$-p_1^* \quad !$$

Kaj vidimo po trku?





TEŽ. SISTEM, po trku

$$E_1^* = E_2^* = E_1^{*\prime} = E_2^{*\prime} = \gamma^*(\underset{mc^2}{E_2} - \beta^* \underset{0}{p_2} c) = mc^2\sqrt{\frac{\gamma+1}{2}}$$

TEŽ. PO TRKU

$$p_{1x}^{*\prime} = p_1^* \cos\theta^*$$

$$p_{2x}^{*\prime} = -p_{1x}^{*\prime} = -p_1^*\cos\theta^*$$

$$p_{1y}^{*\prime} = p_1^* \sin\theta^*$$

$$p_{2y}^{*\prime} = -p_{1y}^{*\prime} = -p_1^*\sin\theta^*$$

← seveda, ker $|\vec{p}_1^*| = |\vec{p}_2^*|$

Transformacija v LAB sistem:

$$p_{1x}' = \gamma^*\left(p_{1x}^{*\prime} + \beta^* \frac{E_1^{*\prime}}{c}\right)$$

$$= mc\sqrt{\frac{\gamma+1}{2}}\left(\sqrt{\frac{\gamma-1}{2}}\cos\theta^* + \sqrt{\frac{\gamma-1}{\cancel{\gamma+1}}\frac{\cancel{\gamma+1}}{2}}\right) = \frac{mc}{2}\sqrt{\gamma^2-1}\,(1+\cos\theta^*)$$

γ (od delca!)

$$p_{2x}' = \frac{mc}{2}\sqrt{\gamma^2-1}\,(1-\cos\theta^*)$$

...

$$p'_{1y} = p_1^* \sin\theta^* = mc\sqrt{\frac{\gamma-1}{2}}\sin\theta^*$$

$$p'_{2y} = -p_1^* \sin\theta^* = -mc\sqrt{\frac{\gamma-1}{2}}\sin\theta^*$$

ker prečna LT nič ne naredi

... se nadaljuje

... nadaljevanje obravnave prožnega trka od zadnjič

izpeljali smo p_{1x}', p_{2x}', p_{1y}', p_{2y}'

Če je trk centralen ($\theta^* = \pi$) je $p_2' = p_1$, $p_1' = p_2 = 0$, kot v klasičnem primeru si samo zamenjata E^2 in GK.

Kota, pod katerima delca odletita v LAB:

$$\tan\theta_1 = \frac{p_{1y}'}{p_{1x}'} = \sqrt{\frac{2}{\gamma+1}}\,\frac{\sin\theta^*}{1+\cos\theta^*}$$

$$\tan\theta_2 = \frac{p_{2y}'}{p_{2x}'} = -\sqrt{\frac{2}{\gamma+1}}\,\frac{\sin\theta^*}{1-\cos\theta^*}$$

Velja $\tan\theta_1 \tan\theta_2 = -\dfrac{2}{\gamma+1}$,

kot med delcema pa je podan s

$$\tan(\theta_1-\theta_2) = \frac{\tan\theta_1 - \tan\theta_2}{1+\tan\theta_1\tan\theta_2} = 2\,\frac{\sqrt{2(\gamma+1)}}{\gamma-1}\,\frac{1}{\sin\theta^*}$$

* Če je hitrost vpadnega delca majhna ($\gamma \to 1$), $\tan(\theta_1-\theta_2)$ zelo velik
  $\Rightarrow \theta_1 - \theta_2 \to \pi/2$ ($90°$)

* Pri velikih γ pa se $\theta_1-\theta_2$ zmanjšuje: pri (visoko)relativističnih trkih se delci sipajo v majhne kote ("forward scattering")

Neprožni trk

* identična delca, masa m
* ② miruje, ① prileti vanj s hitrostjo v_1
* delca se po trku sprimeta

LAB: $E_1 + E_2 = E \quad \ldots \quad \gamma_1 mc^2 + mc^2 = \gamma M c^2$!

$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p} \quad \ldots (x): \quad \gamma_1 m v_1 + 0 = \gamma M v$!

M ← masa sprimka

Zelo elegantno to rešimo prek invariant:

$\underline{p}_1 = (E_1/c, \vec{p}_1) \qquad \underline{p}_2 = (E_2/c, \vec{0})$

$\underline{P} = \underline{p}_1 + \underline{p}_2 \quad \ldots$ LAB pred trkom

$\underline{P}' = (Mc^2/c, \vec{0}) \quad \ldots$ TEŽ. sistem po trku

$\underline{P} \cdot \underline{P} = \underline{P}' \cdot \underline{P}'$ ✓ $\qquad$ (pazi, $\underline{P} \neq \underline{P}'$)

$$\Rightarrow \underbrace{(\gamma_1 mc^2 + mc^2)^2 - (\gamma_1 m v_1)^2 c^2}_{\text{v LAB pred trkom}} = \underbrace{(Mc^2)^2 - \vec{0}^2}_{\text{v TEŽ., ko se sprimeta}}$$

$$\gamma_1^2 m^2 c^4 + 2\gamma_1 m^2 c^4 + m^2 c^4 - \gamma_1^2 m^2 \underbrace{v_1^2}_{=\beta_1^2 c^2} c^2 = M^2 c^4$$

$\gamma_1^2 m^2 c^4 - \gamma_1^2 \beta_1^2 m^2 c^4 = m^2 c^4$ ($=1$)

$$2(\gamma_1 + 1) m^2 c^4 = M^2 c^4$$

$$\underline{M = \sqrt{2(\gamma_1 + 1)}\, m \geq 2m}$$!

Del kinetične energije se je pretvoril v maso sprimka, del pa gre za kinetično energijo. To je odličen primer ekvivalence med energijo in maso. ("$E = mc^2$")

Razpoložljiva energija

* "sprijemanje" delcev v eksp. fiziki je zelo redko... običajno nastane ob trkih veliko novih delcev

* koliko energije je na voljo:

$$m_r = \underbrace{M - 2m}_{\text{če po trku vsi delci v TEŽ. sistemu mirujejo}} = 2m\left(\sqrt{\frac{\gamma_1+1}{2}} - 1\right)$$

Energiji $E_r = m_r c^2$ pravimo <u>razpoložljiva energija</u>

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

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

projektil!

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

RAZPOLOŽLJIVA ENERGIJA
(v primeru fiksne tarče, en delec miruje)

Če je $T \ll 2mc^2 \Rightarrow E_r \approx T/2$

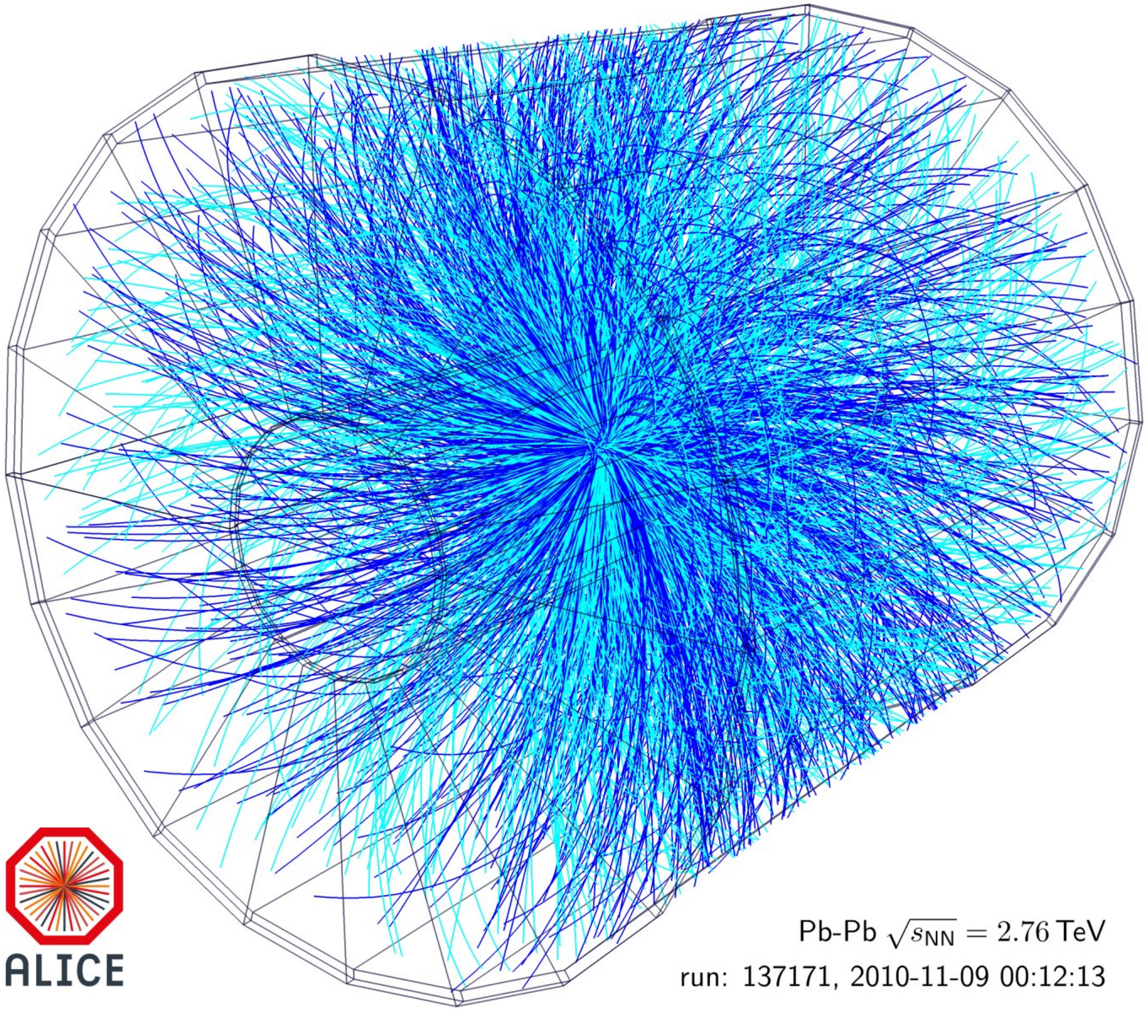
$T \gg 2mc^2 \Rightarrow E_r \approx \sqrt{2mc^2 T}$ $\quad \propto \sqrt{T}$ (fiksna tarča!)

m ●⟶ ● m

V trkalnikih (angl. colliders):

m ●⟶ ⟵● m ... tu je LAB = TEŽ.!

tu je na voljo $E_r \doteq 2T$ (trkalniki)


ALICE
Pb-Pb $\sqrt{s_{\rm NN}} = 2.76$ TeV
run: 137171, 2010-11-09 00:12:13

Primer $e^- + e^- \longrightarrow e^- + e^- + e^- + e^+$

? minimalna kin. energija e^-, ki trči v mirujoč e^-, da se lahko tvorita nova delca e^- in e^+ $\Rightarrow$ razpoložljiva energija vsaj $2m_ec^2$.

$$E_r = 2m_ec^2 = 2m_ec^2\left(\sqrt{1+\frac{T}{2m_ec^2}} - 1\right) \Rightarrow \underline{\underline{T = 6m_ec^2}} \quad (!)$$

Primer γ + (delec z M) $\longrightarrow$ (delec z M) + 2 (delec z m)

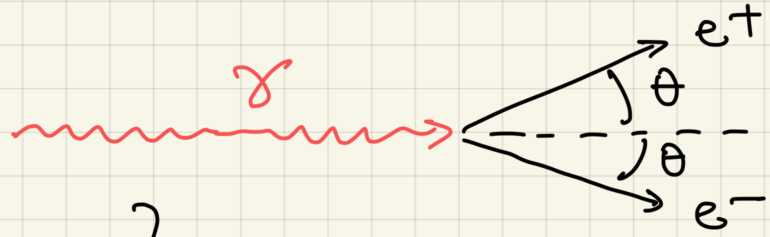
? minimalna energija fotona (če M pri miru) (= energija praga, angl. threshold energy)   upr. $\gamma + p \to p + \pi^0 + \pi^0$

$$\underbrace{(E_\gamma + Mc^2)^2 - (p_\gamma c)^2}_{\text{P.P pred reakcijo v LAB}} = \underbrace{(Mc^2 + 2mc^2)^2}_{\text{P'.P' po reakciji v TEŽ. (ob zahtevi, da smo pri pragu)}}$$

$$\cancel{E_\gamma^2} + 2E_\gamma Mc^2 + \cancel{M^2c^4} - \cancel{\underbrace{p_\gamma^2 c^2}_{=E_\gamma^2}} = \cancel{M^2c^4} + 4Mc^2mc^2 + 4m^2c^4$$

$$\underline{E_\gamma^{prag} = 2mc^2\left(1 + \frac{m}{M}\right)}$$

Primer $\gamma \to e^+e^-$



?

foton $\downarrow$ vsak od $e^\pm$ $\downarrow$

ohr. E : $E_\gamma = 2E$

ohr. GK : $\underbrace{p_{\gamma x}}_{E_\gamma/c} = 2p\cos\theta$

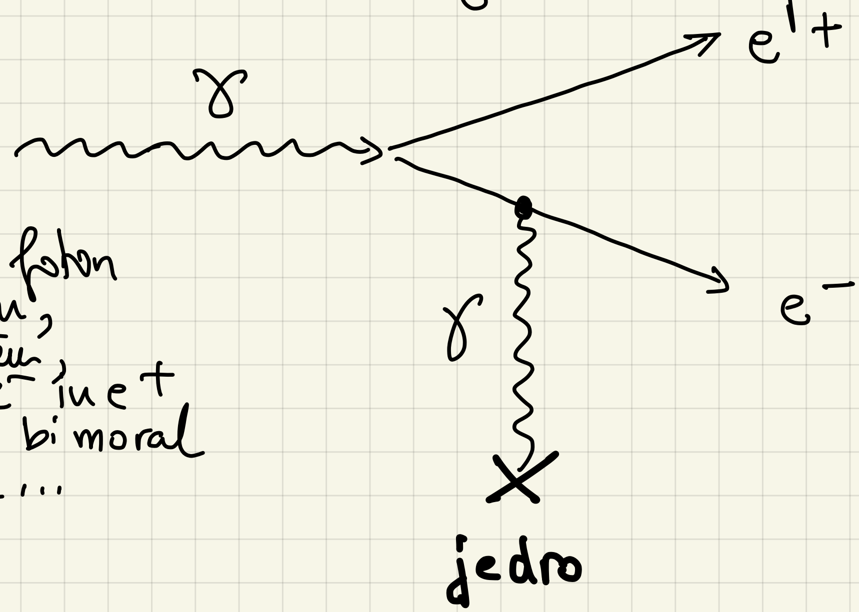
$$E = pc\cos\theta$$

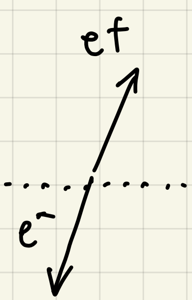
$$\downarrow$$

$$\sqrt{p^2c^2 + m_e^2c^4} \underbrace{>}_{\text{vedno}} pc\cos\theta$$

vedno, celo za $\theta = 0°$ ✓ vedno večji od desne strani

V resnici mora višek GK odnesti še neki drug delec (običajno atomsko jedro):





Alternativni razmislek: če bi foton spontano razpadel v vakuumu, bi lahko našli inerc. sistem, v katerem bi bili GK e^- in e^+ nasprotno enaki $\Rightarrow$ γ bi moral mirovati, to pa ne gre...

Primer Produkcija parov e^+e^- ob sipanju kozmičnih žarkov na CMB (cosmic microwave background = sevanje črnega telesa pri 3K).

$$p \xrightarrow[\text{tudi } > 10^{20}\,\text{GeV!}]{} \qquad \xleftarrow[\text{tipično } 10^{-4}\,\text{eV}]{} \gamma\ (\text{CMB}) \qquad \to x$$

$\lambda \approx 0.18$ cm, $\nu \approx 160$ GHz (za oceno), $E_\gamma = \overbrace{h\nu}^{\text{kraneje}} \approx 6.6\cdot 10^{-4}$ eV

LAB pred trkom: $p c = (E, \vec{p}c) = (E, pc, 0, 0)$

$p_\gamma c = (E_\gamma, \vec{p}_\gamma c) = (E_\gamma, -p_\gamma c, 0, 0)$

TEŽ. po trku: $\left((m_p + 2m_e)c^2, 0, 0, 0\right)$

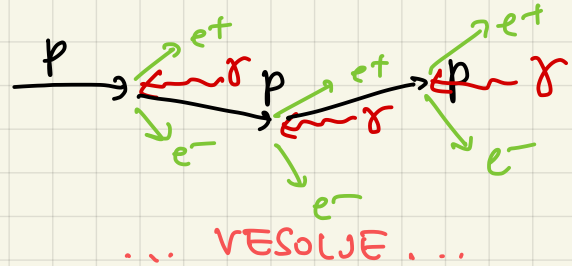
$$\underbrace{(E+E_\gamma)^2 - (p-p_\gamma)^2c^2}_{(p+p_\gamma)\cdot(p+p_\gamma)c^2,\ \text{LAB prej}} = \underbrace{(m_p+2m_e)^2c^4}_{\text{TEŽ., potem}}$$

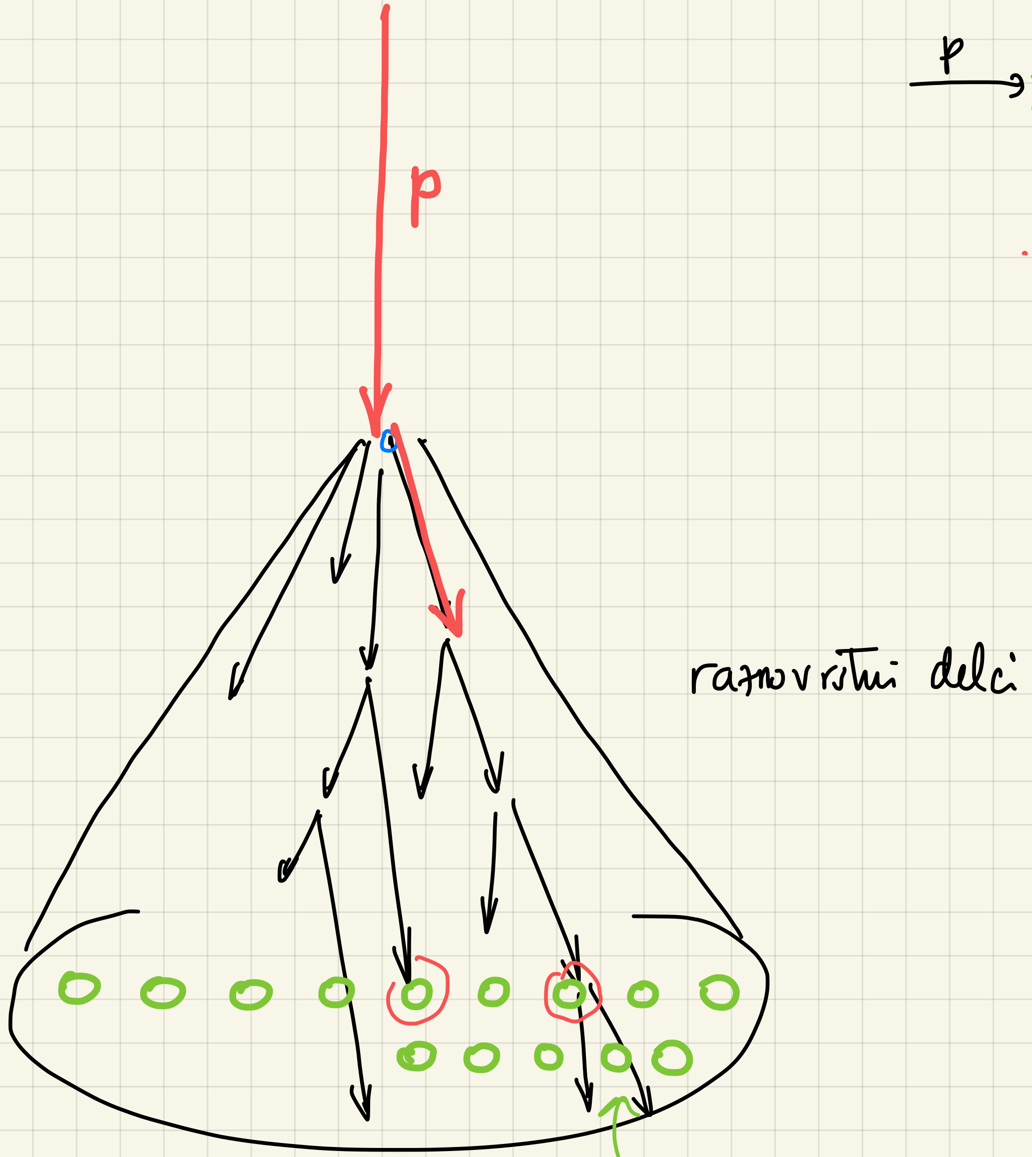
$$\underbrace{\cancel{E^2} + 2EE_\gamma + \cancel{E_\gamma^2} - \cancel{p^2c^2}}_{\cancel{m_p^2c^4}} + 2pc\,p_\gamma c - \cancel{p_\gamma^2c^2} = \cancel{m_p^2c^4} + \underbrace{4m_pc^2\,m_ec^2}_{940 \quad 0.5} + \cancel{4m_e^2c^4}_{0.5^2}$$

Če predpostavimo $E, pc \gg m_pc^2$ (≈ 1 GeV$/c^2$) $\to E \approx pc$

$$\cancel{4}EE_\gamma = \cancel{4}m_pc^2\,m_ec^2 \to E = \frac{m_pc^2\,m_ec^2}{E_\gamma} \approx 10^{18}\,\text{eV}$$

→ od te energije dalje tvorba parov e^+e^- učinkovito ustavlja visokoenergijske protone!


p
e+
e−
γ
... VESOLJE ...


p
raznovrstni delci
detektorji
(npr. AUGER ... pampa)

Razpadi delcev

* del mase začetnega delca gre za tvorbo novih delcev + njihove kinetične energije

Razpad v mirovanju : npr. $\pi^- \longrightarrow \mu^- \bar{\nu}_\mu$

$m_\pi c^2 = 139.6$ MeV
$m_\mu c^2 = 105.7$ MeV
$m_{\bar{\nu}_\mu} c^2 \approx 0$

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

GK: $\quad 0 = p_\mu + p_\nu = p_\mu + E_\nu/c \quad \longrightarrow \quad E_\nu^2 = p_\mu^2 c^2 = E_\mu^2 - m_\mu^2 c^4$

$$(m_\pi c^2 - E_\mu)^2 = E_\nu^2$$

$$m_\pi^2 c^4 - 2 E_\mu m_\pi c^2 + \cancel{E_\mu^2} = \cancel{E_\mu^2} - m_\mu^2 c^4$$

$$\longrightarrow \quad E_\mu = \frac{m_\pi^2 c^4 + m_\mu^2 c^4}{2 m_\pi c^2}$$

oz. $\quad T_\mu = E_\mu - m_\mu c^2 = \dfrac{(m_\pi c^2 - m_\mu c^2)^2}{2 m_\pi c^2} = \underline{\underline{4.1 \text{ MeV}}}$

toliko odnese mion

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

toliko odnese nevtrino

2. semester (MF2): $\quad p \to n e^+ \nu_e \quad$ (v jedrih)
$\quad n \to p e^- \bar{\nu}_e$

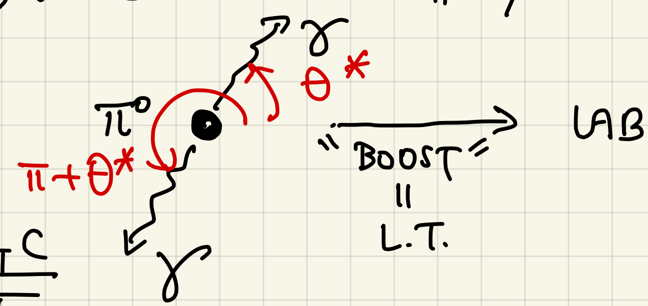
... nepojasnjena energ. bilanca
→ napoved (!) in odkritje nevtrina
W. Pauli

Razpad v letu (med letom), npr. $\pi^0 \to 2\gamma$, $m_\pi c^2 = 135\ \text{MeV}$
$E_\pi = 6\ \text{GeV}$

V težiščnem sistemu: ko π^0 miruje, fotona pa odletita v nasprotnih smereh pod kotoma θ^*, $\pi+\theta^*$.
Po zakonu o ohranitvi energije (v tež. sistemu) vsak odnese $m_\pi c^2/2$.

$$p^*_{1x} = \frac{m_\pi c}{2}\cos\theta^* = -p^*_{2x}$$

$$p^*_{1y} = \frac{m_\pi c}{2}\sin\theta^* = -p^*_{2y}$$



Transformacija v LAB: potrebujemo $\beta^* = \frac{p_\pi c}{E_\pi}$

$$\gamma^* = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^{*2}}} = \frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{p_\pi c}{E_\pi}\right)^2}} = \frac{E_\pi}{\sqrt{E_\pi^2 - p_\pi^2 c^2}} = \frac{E_\pi}{m_\pi c^2} = \gamma \text{ (od delca)}$$

$$p_{1x} = \gamma\left(p^*_{1x} + \beta\frac{m_\pi c}{2}\right) = \frac{m_\pi c}{2}\left(\gamma\cos\theta^* + \sqrt{\gamma^2-1}\right)$$

$$p_{2x} = \gamma\left(p^*_{2x} + \beta\frac{m_\pi c}{2}\right) = \frac{m_\pi c}{2}\left(-\gamma\cos\theta^* + \sqrt{\gamma^2-1}\right)$$

$$p_{1y} = -p_{2y} = \frac{m_\pi c}{2}\sin\theta^* \qquad \text{(LT nima vpliva v } \perp \text{ smeri)}$$

$$\tan\theta_1 = \frac{p_{1y}}{p_{1x}} = \frac{\sin\theta^*}{\gamma\cos\theta^* + \sqrt{\gamma^2-1}}$$

$$\tan\theta_2 = \frac{p_{2y}}{p_{2x}} = \frac{\sin\theta^*}{\gamma\cos\theta^* - \sqrt{\gamma^2-1}}$$

Kot med γ_1 in γ_2 v LAB:

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

... toda za $\gamma \gg 1$ (zelo hiter π^0) dobimo preprostejši izraz:

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

lastnost π^0, ki razpade

kaj se je zgodilo v TEŽ.

Če fotona v TEŽ. sistemu ne odletita skoraj natanko naprej ($\theta^* \approx 0$) oz. nazaj ($180°$), je kot med njima majhen, če $\gamma \gg 1$.

Za naše podatke: $\gamma = \frac{E_\pi}{m_\pi c^2} = \frac{6000}{135} \approx 46$

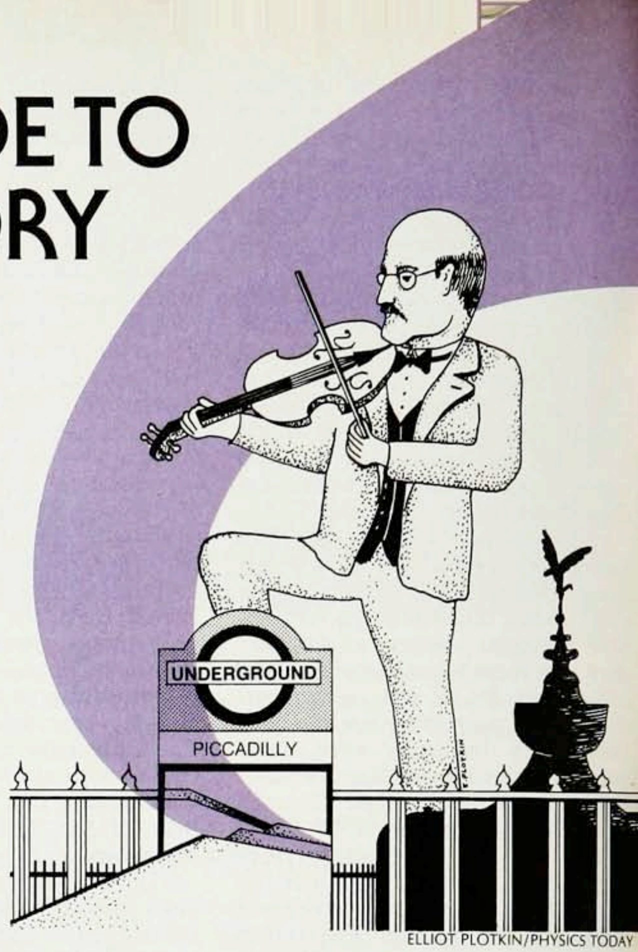
Pri $\theta^* = 0.1 = 5.7°$ $\longrightarrow$ $\theta_{12} = 0.22 = 12.5°$

... konec Relativist. fizike

MR. ELIOT'S GUIDE TO QUANTUM THEORY

April is the foolest month.

John Lowell



Last year was the centenary of T. S. Eliot, perhaps the most influential of 20th-century poets writing in English. That Eliot pursued careers in publishing and banking in addition to his literary work is widely known, but many of his readers will be astonished to learn of the discovery last year of manuscripts that suggest he might at one time have been a student of physics. Published here for the first time, the poems are strongly influenced by the quantum theory that was growing vigorously when Eliot was a young man. They exhibit unmistakable echoes of "The Waste Land," "Four Quartets" and *Old Possum's Book of Practical Cats*. (They also show remarkable physical prescience: Several of the ideas hinted at postdate Eliot's death in 1965.)

The Waste Lecture

Momentum is not well defined, being
Canonical to place, failing
To commute exactly, leaving
Necessary doubt.
Newton spoke firmly, writing
Definitive equations, moving
His particles on clean trajectories.

And when we were pupils, studying the rudiments,
How confident we were, precisely calculating
x and p (not one but both!) with such abandon.
But at the university our teachers—
Murmuring of commutation—frown, and flunk us.
We read, much of the night, but are none the wiser.

(Rayleigh, Jeans
Had not the means,
Einstein didn't want 'em;
It took Niels Bohr
And several more
To figure out the quantum.)

Ultraviolet catastrophe
Came on us unaware;
Came up the Strand
To Carlton Terrace, down the stair
At Piccadilly Underground, where I, Max Planck,
Am wont to play an anharmonic air
Upon my violin, so marvellously tuned
To modes of hydrogenic unison.

But where are the short-wave rays that fail to light
The incandescent blackness? I have found
Degrees of freedom powerlessly bound
In chains of integer constraint,
And atoms, governed by the selfsame laws
Quiescent, in a cold ground state.

And when the spectrum slides
Beyond the violet end,
Touched by the last dim rays
The silver surface spits electrons and displays
The undivided energy of light!
(O James Clerk Maxwell I can sometimes see
A wave, like you, sometimes a particle like me
—Can both of us be right?)

And I Max Planck,
Old man of schizophrenic views,
Have brought you more
And even stranger news,
A prettier pebble:

P. Dirac, the well-known theorist
Renormalises constants and is known to be
A dab hand when it comes to conjugating charge,
Reversing time or violating parity.
This sea, he said, is full of latent holes,
And each a replica
(Apart from certain signs)
Of that which empties it.

But on the other hand it's

Quark, quark, I'm in the dark
I think I'll never see
Why some have two with coloured glue
And baryons have three.

John Lowell is a senior lecturer in physics at the University of Manchester Institute of Science and Technology, UK. His research interests include solid-state physics, especially the origins of static electricity, of which cat's fur is a classic source—hence his interest in Eliot's "practical cats."

What the Photons Said

We can point up, or just as easily point sideways,
Or up and sideways both at once
(Providing we contrive to circumvent
The forced decisions of your solar spectacles).
And pointing up, and at the same time sideways,
Is tantamount to pointing in a circle.
We can then point clockwise. On the other hand
We can as easily point widdershins.
Or both of these together, which of course
Is tantamount to pointing up, or sideways.

Essence of existence, tenuously filling
Insubstantial peaks of polynomials;

Psi
Psistar;

What can we do?
To move from one place
We must leave the place we occupied before.
And the former place will then be empty.
And the strange doctrine of our omnipresence
Is not to be found in the pages of *Principia*
Nor clarified in fits of easy reflection

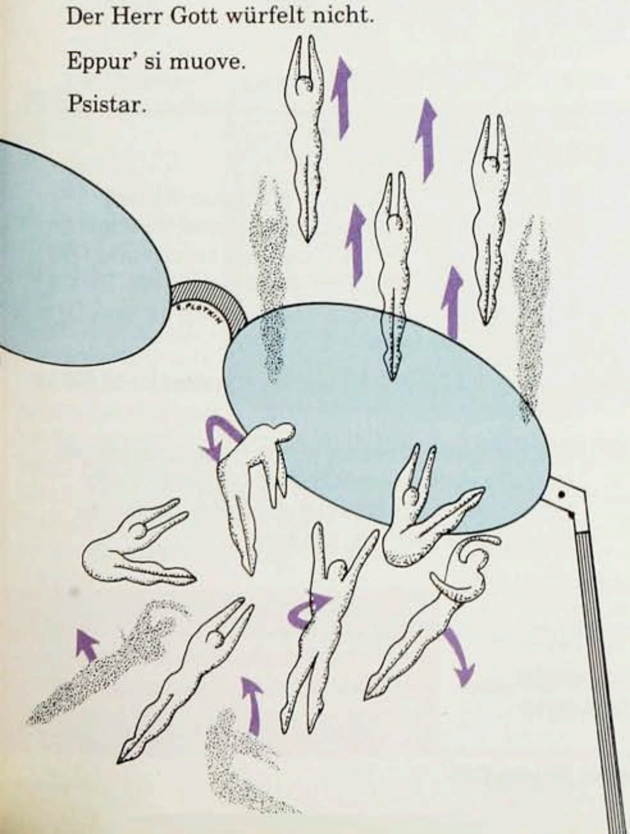
(I know not what
I may appear to the world).

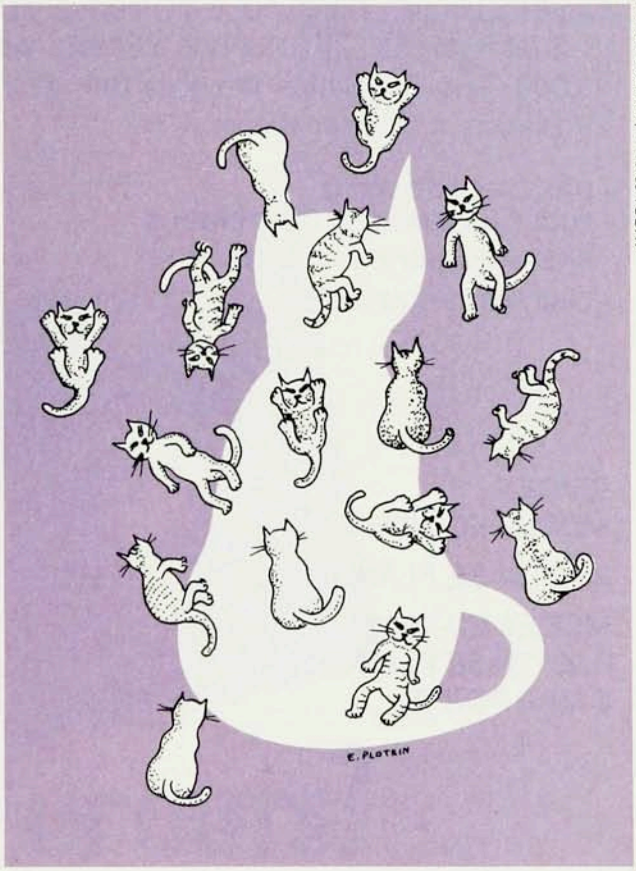
We are poured out like water
Seeking temporary form
In a momentary observation.

Der Herr Gott würfelt nicht.

Eppur' si muove.

Psistar.





ELLIOT PLOTKIN/PHYSICS TODAY

From *Old Possum's Book of Quantum Vivisection*

Schrödinger's cat's a mystery cat, he illustrates the laws;
The complicated things he does have no apparent cause;
He baffles the determinist, and drives him to despair
For when they try to pin him down—*the quantum cat's not there*!

Schrödinger's cat's a mystery cat, he's given to random decisions;
His mass is slightly altered by a cloud of virtual kittens;
The vacuum fluctuations print his traces in the air
But if you try to find him, *the quantum cat's not there*!

Schrödinger's cat's a mystery cat, he's very small and light,
And if you try to pen him in, he tunnels out of sight;
So when the cruel scientist confined him in a box
With poison-capsules, triggered by bizarre atomic clocks,
He wasn't alive, he wasn't dead, or half of each: I swear
That when they fixed his eigenstate—*he simply wasn't there*! ■

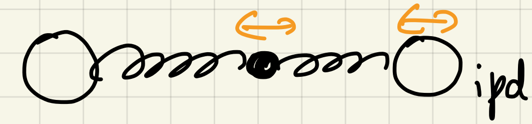
KVANTNA FIZIKA

* Prehod iz 19. v 20. stol: ne samo težave pri opisu pojavov, ko $v \to c$ ampak tudi v mikroskopskem svetu (atomi, jedra)
  → za večino problemov v tem semestru bo povsem zadoščala nerelativistična obravnava!
  i.e. $T = p^2/2m$, kot smo vajeni... itd.
* Doslej smo bili vajeni, da lahko fizikalne količine (zlasti energija, VK) zavzamejo poljubne vrednosti. V kvantni fiziki to ni več res: energija se v fiz. sistemih spremeni (oz. izmenja) samo v določenih "obrokih" = KVANTIH (lat. quantum). Spomnimo se: el. naboj: $e_0, 2e_0, 3e_0, \ldots$ (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 delci, delci "dobijo" valovne lastnosti.
  ⇝ "valovno-delčna dualnost" = wave-particle duality
  ↖ imenitno se sliši, a malo pove
* Najbolj pretresljivo: ni več absolutnih napovedi obnašanja fizikalnega sistema (npr. točnih trajektorij delca)

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

  Kvantna fizika: napovemo lahko samo verjetnosti izidov meritev

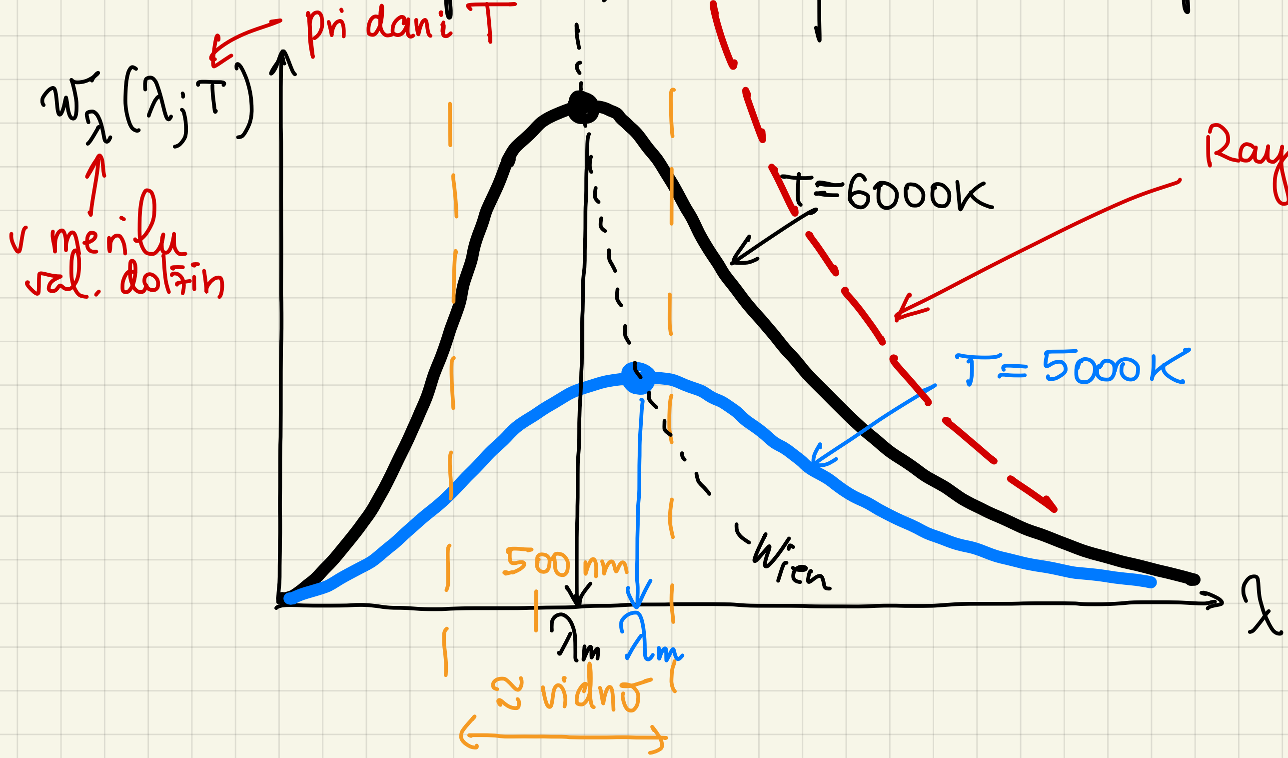
Sevanje črnega telesa



* Od tod prve indikacije za kvantno naravo sevanja
* Absorpcija svetlobe na telesu ⟶ povečana kinet. energijo atomov (na "vzmeteh" v kristalni strukturi) ⟶ telo se ogreje ⟶ toda pospešeni delci (e^-) sevajo ⟶ energija se izseva ⟶ telo se ohladi

Ko je absorpcija = emisija ⟹ termično ravnovesje

Vsa telesa pri $T \neq 0$ sevajo termično (toplotno) sevanje.



* spekter odvisen samo od T ! Poznali so tudi zvezo

$$\lambda_m = \frac{\text{konst.}}{T}$$

$$\text{konst.} = 2{,}9 \cdot 10^{-3}\,\text{mK}$$

Wienov zakon
(1893)

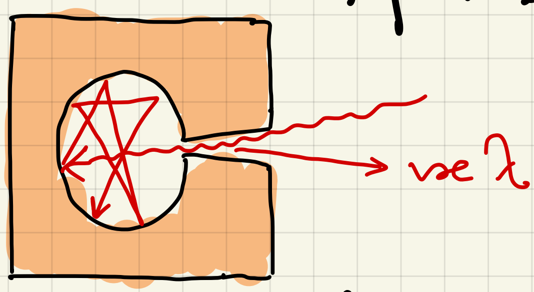
Telo, ki absorbira vse vpadno sevanje = črno telo (black body)

Jožef Stefan: empirično pokazal, da velja

$$\underline{j = \sigma T^4} \qquad \sigma = 5.67 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{W/m^2K^4}$$

Stefan-Boltzmann (1879)

Črno telo: (izpeljava neodvisna od geometrije telo votline)



od povprečenja po kotih sipanja

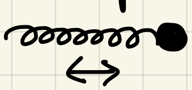
$$j = \frac{1}{4} c \cdot w$$

$$[\mathrm{W/m^2}] \qquad [\mathrm{J/m^3}]$$

Rezultat iz statistične mehanike: # nihajnih načinov v votlini (analogno številu načinov nihanja na struni (1d) oz. opni (2d)):

$$n(\lambda) = \frac{dn}{d\lambda} = \frac{8\pi}{\lambda^4} \longrightarrow \text{(verjamemo)}$$

Klasična predstava: vsak nihajni način prinese $\underbrace{k_B T}$ energije



$k_B T$

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

$[\mathrm{J/m^3 \cdot nm}]$

Rayleigh-Jeans

Na žalost $\int_0^\infty w_\lambda(\lambda; T)\, d\lambda \to \infty$!?

"UV katastrofa"

gl. naprej

Planckov zakon

* Kako spraviti $w_\lambda \to 0$, ko $\lambda \to 0$?
* Planck (1900): empirična formula, ki jo lahko izpeljal ob privzetku, da so energije nihajočih nabojev (⇒ sevanja, ki ga oddajajo) lahko samo mnogokratniki ε: $0, \varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon, \dots$

kjer je ε sorazmerna s frekvenco oscilatorjev

$$E_n = n\cdot\varepsilon = n\cdot \underbrace{h\nu}_{\text{kvant ("obrok") energije izsevanega fotona}} = n\cdot\frac{hc}{\lambda} \qquad n=0,1,2,\dots$$

h = Planckova konstanta (sorazm. konst. med frekvenco in energijo)

$h = 6.6\cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}$ (uporabno tudi: $hc \approx 1240\ \mathrm{eV\cdot nm}$)

$\hbar = h/2\pi = 1.05\cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}$ ($\hbar c \approx 197\ \mathrm{MeV\cdot fm}$)

"h prečna" (hbar) \hbar

$$w_\lambda(\lambda;T) = \frac{8\pi hc/\lambda^5}{e^{hc/\lambda k_B T}-1}$$

Planckov zakon (sevanja črnega telesa)

(DN): za velike λ → Rayleigh-Jeans

Izpeljava

Potrebujemo tri reči:

a) prešteti število načinov EM valovanja pri dani T, V

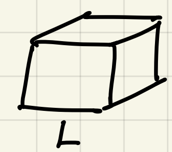
b) verjetnost, da se pri dani T v votlini pojavi način z energijo E (to bo dala Maxwell–Boltzmannove porazdelitve)

c) izračunati povprečno energijo na način (mode)

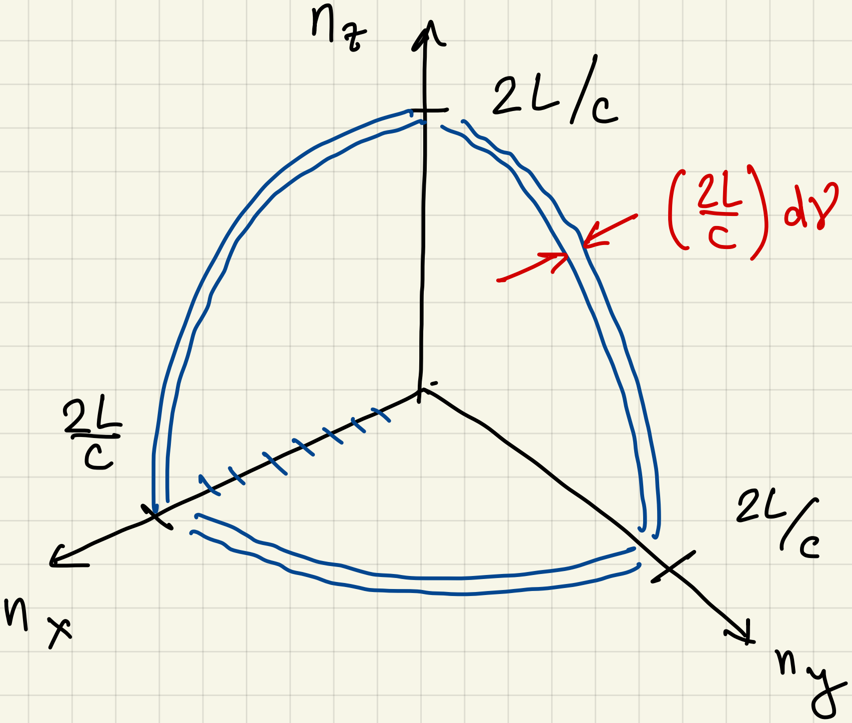
a) struna (1d): dovoljene take λ, da $\sin(2\pi L/\lambda) = 0$

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

3d:
$$\nu = \frac{c}{2L}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$



oz.
$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{2L}{c}\nu\right)^2 \qquad n_x, n_y, n_z \geq 0 \quad ⊛$$



računamo "$4\pi r^2 \Delta r$" v prostoru frekvenc...

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

ker ⊛

$$V = L^3$$

v resnici (verjamemo zaradi) še 2x več načinov, ker ima lahko vsak foton dve polarizaciji

\# načinov na frekvenčni interval:

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

→ spektralna energijska gostota

$$w_\nu(\nu;T) = \frac{N_\nu}{V}\underbrace{\langle E\rangle}$$ $[J/m^3 s^{-1}]$

← povprečna energija na način (to še rabimo)

→ energijski tok

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

b), c)

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_n f(E_n)E_n}{\sum_n f(E_n)}$$

← spomnite se: $x_T = \dfrac{\sum_n m_n x_n}{\sum_n m_n}$

Uteži so Boltzmannovi faktorji: $\underline{f(E) = e^{-E/k_BT}}$

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_n nh\nu\, e^{-nh\nu/k_BT}}{\sum_n e^{-nh\nu/k_BT}} \underset{\uparrow}{=} k_BT\,\frac{\sum_n nxe^{-nx}}{\sum_n e^{-nx}}$$

$x = \dfrac{h\nu}{k_BT}$ brezdim.

Najprej imenovalec (= fazna vsota, Z):

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

Števec: trik: odvajamo $Z(x)$:

$$-x\frac{dZ}{dx} = -x\frac{d}{dx}\left(\sum_n e^{-nx}\right) = x\sum_n ne^{-nx}$$

$$x\sum_n ne^{-nx} = -x\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{1-e^{-x}}\right) = \frac{xe^{-x}}{(1-e^{-x})^2} = \text{števec}$$

Sestavimo vse faktorje:

$$\underline{w_\nu(\nu;T)} = \frac{N_\nu}{V}\langle E\rangle = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}k_BT\left(\frac{xe^{-x}}{1-e^{-x}}\right) \quad \frac{xe^{-x}}{1-e^{-x}} = \frac{x}{e^x-1}$$

$$= \frac{8\pi\nu^2}{c^3}k_BT\frac{h\nu/k_BT}{e^{h\nu/k_BT}-1} = \underline{\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/k_BT}-1}}$$

Planckov z.v merilu frekvenc

z val. dolžinami:

$$\underline{w_\lambda(\lambda;T)} = w_\nu(\nu;T)\underbrace{\left|\frac{d\nu}{d\lambda}\right|}_{c/\lambda^2} = \underline{\frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda k_BT}-1}}$$

v merilu val. dolžin

Od tod

$$j_\lambda(\lambda;T) = \frac{c}{4}w_\lambda(\lambda;T)$$
$$j_\nu(\nu;T) = \frac{c}{4}w_\nu(\nu;T)$$

in pa integrala po celotnem spektru:

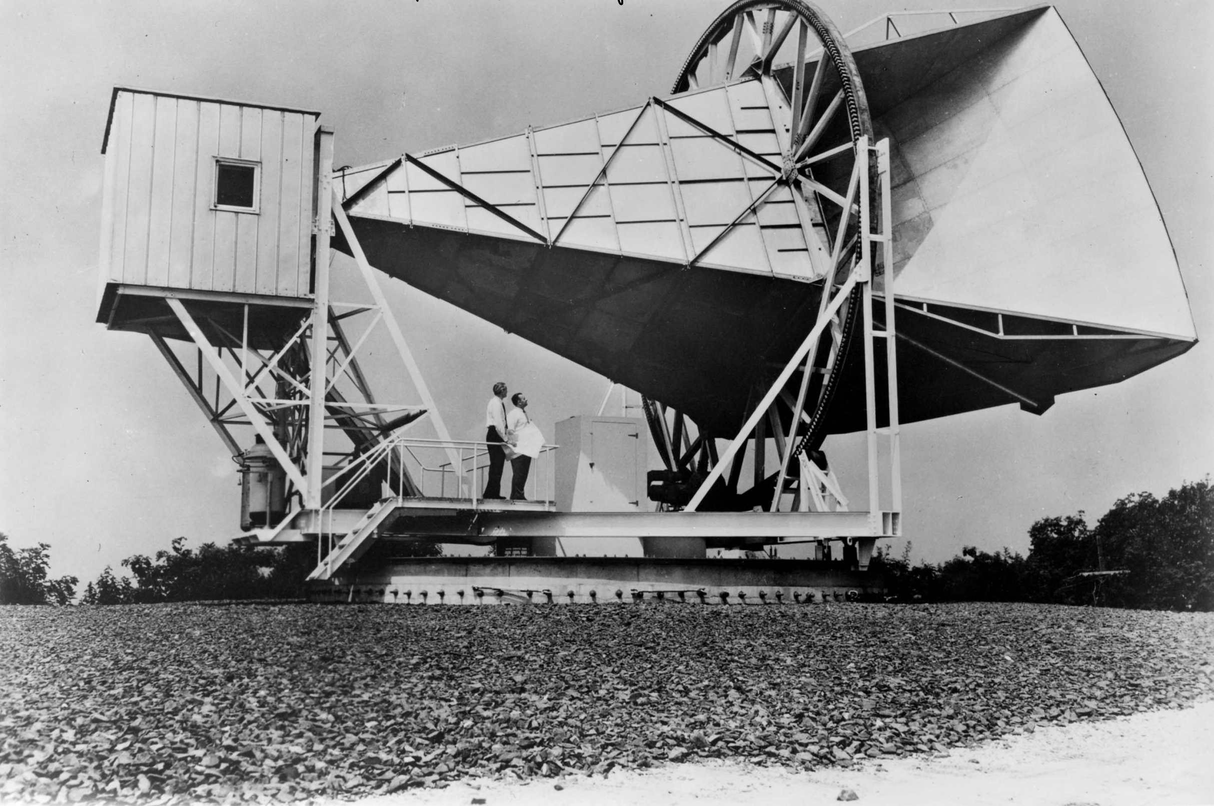
$$j = \int_0^\infty j_\lambda(\lambda;T)\,d\lambda = \int_0^\infty j_\nu(\nu;T)\,d\nu = \underline{\sigma T^4} \quad !$$

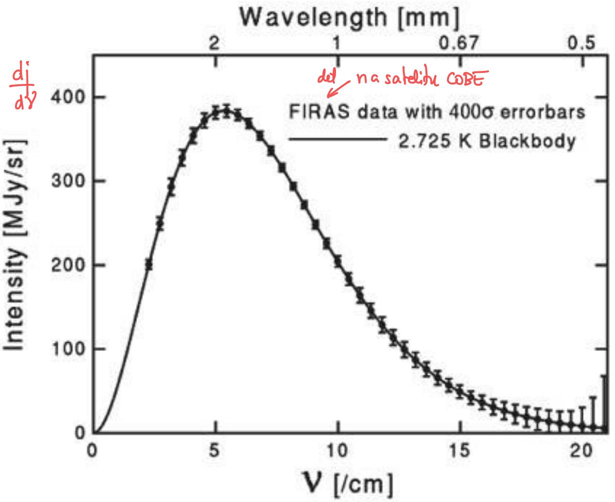
katerakoli!

Penzias, Wilson (1965) ... Nobel 1978

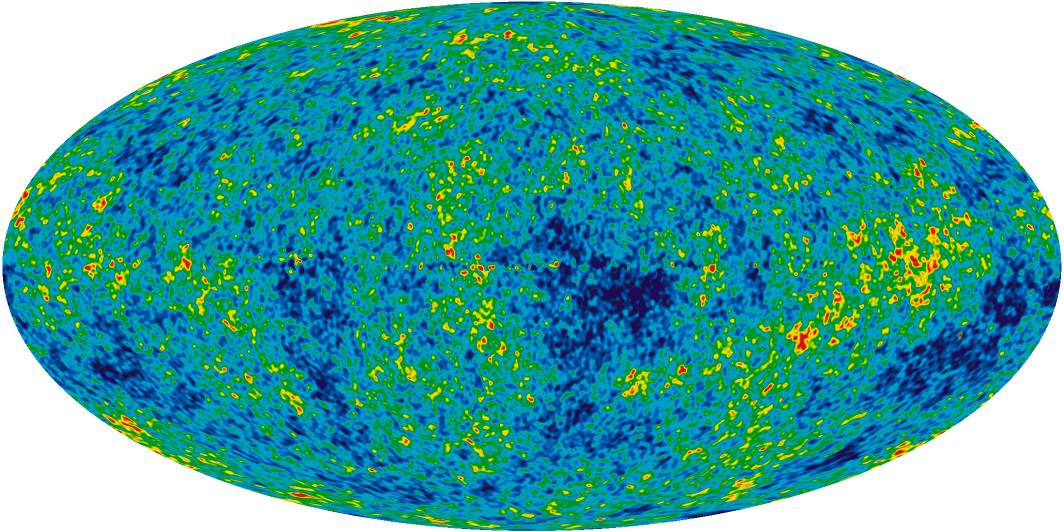
odkrila CMB = cosmic microwave background (sevanje ozadja)

= sevanje črnega telesa pri $\approx 3K$




Wavelength [mm]
2
1
0.67
0.5
Intensity [MJy/sr]
400
300
200
100
0
FIRAS data with 400σ errorbars
2.725 K Blackbody
0
5
10
15
20
ν [/cm]
dj/dν
det na satelitu COBE

Nine Year Microwave Sky The detailed, all-sky picture of the infant universe created from nine years of WMAP data. The image reveals 13.77 billion year old temperature fluctuations (shown as color differences) corresponding to the seeds that grew to become the galaxies. The signal from our Galaxy was subtracted using the multi-frequency data. This image shows a temperature range of $\pm 200\mu$K.



... še o načelu nedoločenosti

* To je samo načelo → nedokazljivo, a deluje!
* očitno v nasprotju z eksaktno napovedjo trajektorij : $x(0), \dot{x}(0) \rightarrow x(t)\ \ t>0$
  načeloma ni mogoče!

$\Rightarrow$ napovedujemo lahko verjetnosti, da je delec upr. med $x=a$ in $x=b$.

obnašanje (kvantnih) sistemov je nedeterministično

To so fiziki težko sprejeli! "Gott würfelt nicht!" (Einstein)

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

Telo, $m = 1\,kg$, $v = 1\,m/s$

Recimo, da lahko lego določimo na $\sigma_x \approx 10^{-15} m$ natančno
(toliko je velikost at. jedra)

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

$\Rightarrow$ pri mikroskopskih delcih pa se to pozna!

$m \rightarrow m_e = 9.1 * 10^{-31}\,kg \quad \Rightarrow \quad \sigma_v > c$ (pri istem σ_x)

Interferenčni poskusi z delci ("two-slit experiment")

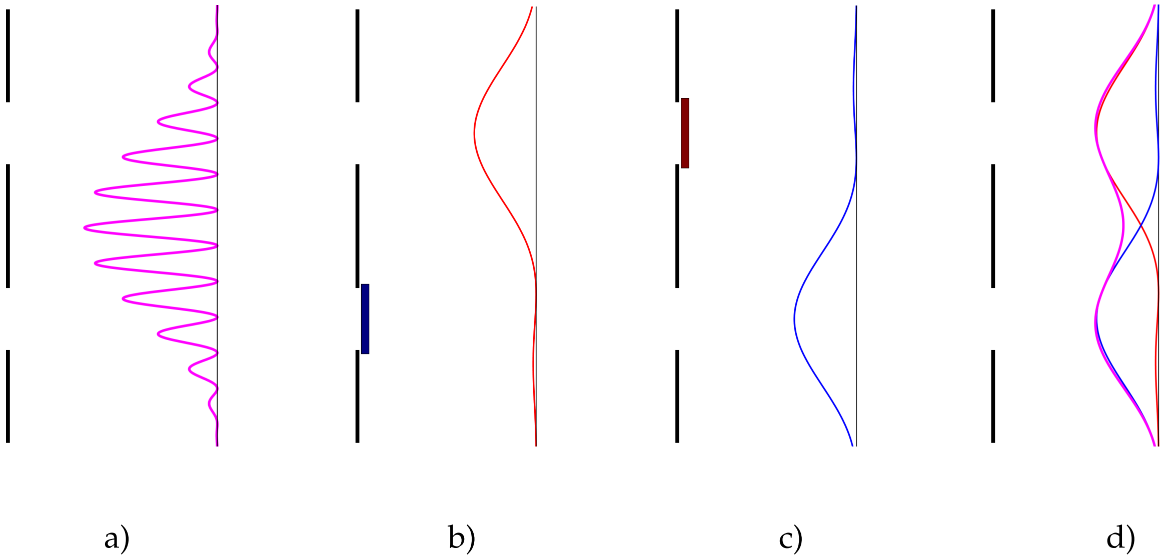
* λ (de Broglie) mora biti primerljiv z razmikom med režama, a
* konstruktivno IF pričakujemo pod koti θ, kjer velja $a \sin\theta = n\lambda$.
  → slika a)
* če posamezno režo zapremo, IF izgine → samo uklonska slika, kot jo pričakujemo z ene same reže → sliki b) in c)
* kaj pa tole: odprti obe reži, nanju pošiljamo posamezne elektrone

Kaj dobimo?

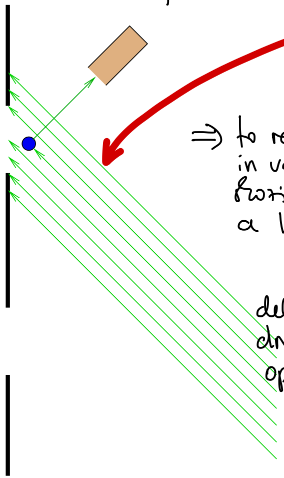
sliko a) ✓ **!**

sliko d) ✗

Delci interferirajo sami s seboj !!!


a)
b)
c)
d)

Lahko merimo, skozi katero režo je šel elektron:



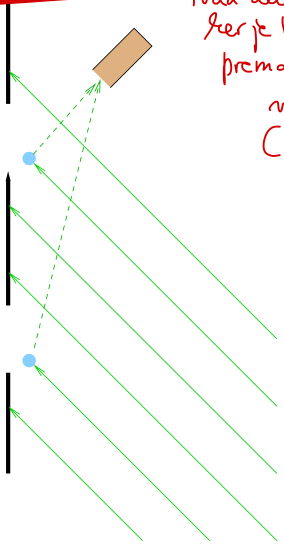
a)

$\Rightarrow$ to res lahko storimo in ugotovimo režo, skozi katero je šel, a IF slika izgine

$\Downarrow$

delec se obnaša drugače, če ga opazujemo, kot če ga ne (!?)

Kolaps valovne funkcije (wave-function collapse)



b)

toda delec smo zmotili, ker je bila ta $\lambda_{svetlobe}$ premajhna $\Rightarrow$ vzemimo večjo $\lambda_{svetlobe}$ (delca ne zmotimo)

$\Downarrow$

spet dobimo IF

$\Downarrow$

ampak s to $\lambda_{svet.}$ ne moremo več ločiti med režam

Ψ_1 = VF, ki opisuje "tir" e skozi prvo režo

Ψ_2 = VF, drugo

$\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$ skupna VF = superpozicija (linearnost!)

a) verjetnostna gostota na zaslonu:

koherentna vsota, ne moremo določiti reže

$$\rho_{12}^{(a)} = |\Psi_{12}|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$$

$$= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \underbrace{\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*}_{\text{IF člen} \Rightarrow \text{IF slika}}$$

b) ali c), ko je ena od rež zaprta:

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

d) $$\rho_{12}^{(d)} = \rho_1^{(b)} + \rho_2^{(c)} = \underbrace{|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2}_{\text{nekoherentna vsota, OK, kadar lahko ugotovimo, po kateri poti je šel delec}} + \emptyset$$

Who killed Schrödinger's cat?

Inside a sealed box, a random radioactive decay may release poison gas from a vial, killing a cat. If you discover a dead cat when you open the box, how you interpret that finding will depend on your interpretation of quantum mechanics

STANDARD (COPENHAGEN) INTERPRETATION

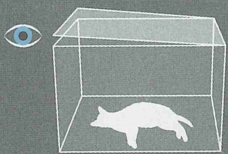
Before observation

The cat was simultaneously alive and dead

$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\quad + \quad)$

On observation

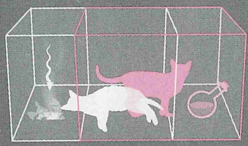
The cat is dead. Your measurement killed the cat



MANY WORLDS INTERPRETATION

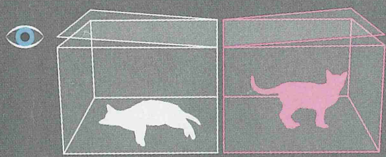
Before observation

The cat was simultaneously alive and dead



On observation

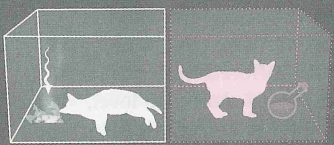
The universe splits. The cat is dead, but in a parallel world it remains alive



QUANTUM BAYESIANISM

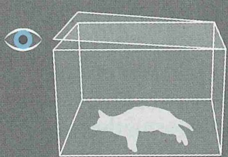
Before observation

The cat is what it is: you just don't know what it is yet



On observation

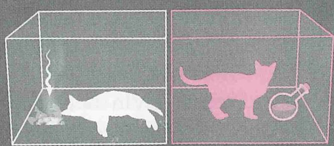
Your brain processes it as dead



OBJECTIVE COLLAPSE THEORY

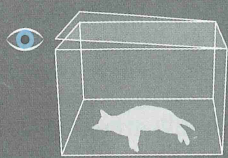
Before observation

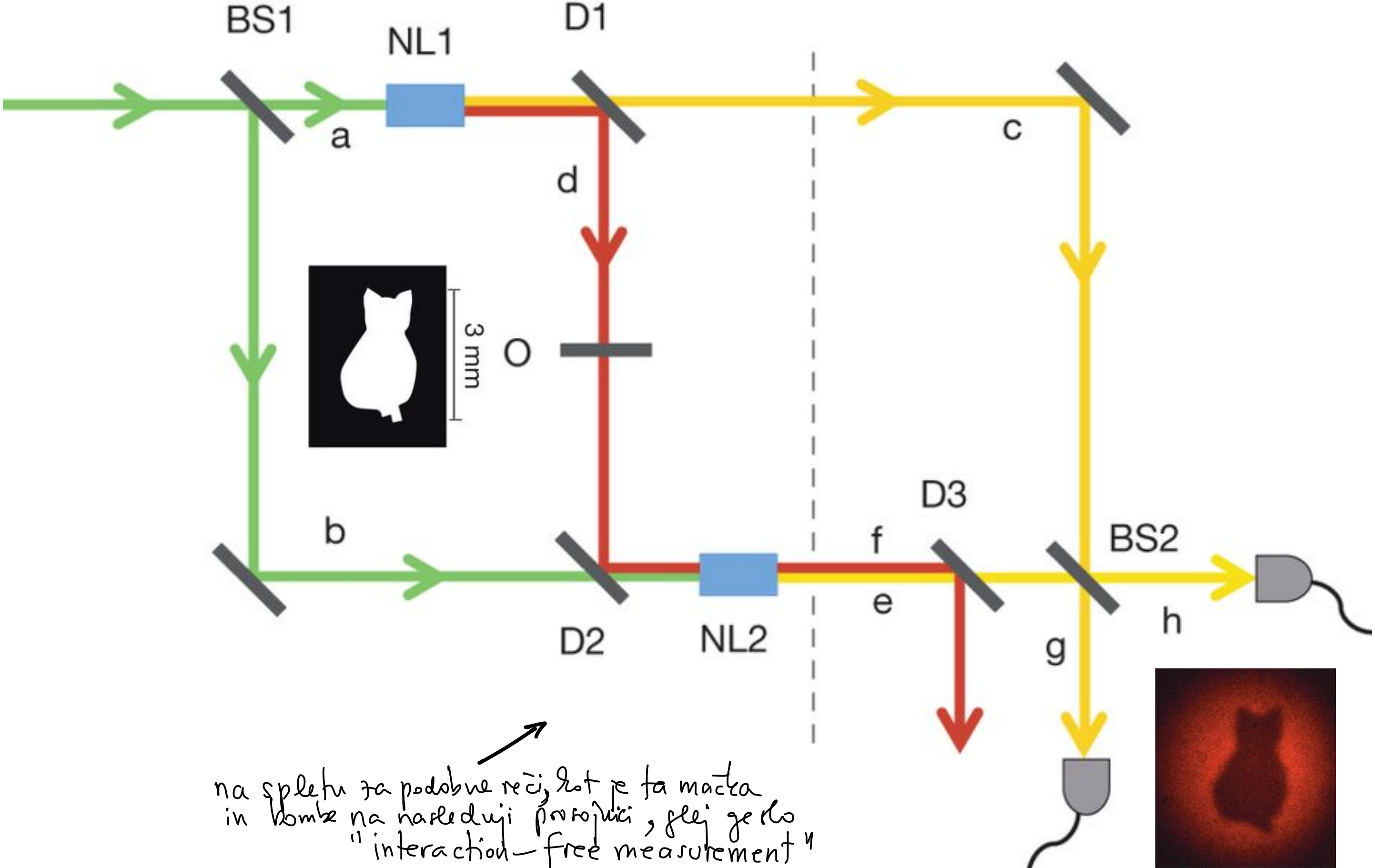
The cat was either alive or dead until spontaneous wave function collapse killed it



On observation

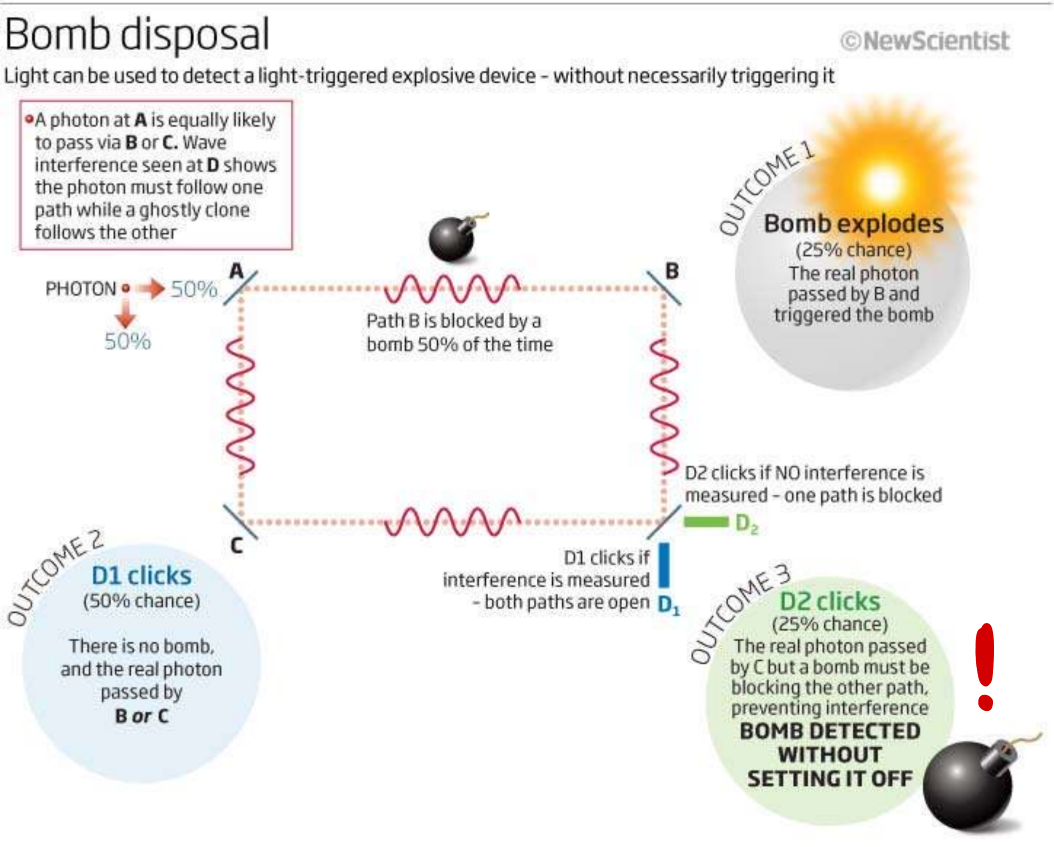
The cat is dead. You don't know when it died





na spletu za podobne reči, kot je ta macka in bombe na naslednji prosojnici, glej geslo "interaction-free measurement"

G. B. Lemos et al., Nature **512** (2014) 409



Bomb disposal
©NewScientist
Light can be used to detect a light-triggered explosive device - without necessarily triggering it
A photon at A is equally likely to pass via B or C. Wave interference seen at D shows the photon must follow one path while a ghostly clone follows the other
PHOTON
50%
50%
A
B
C
Path B is blocked by a bomb 50% of the time
OUTCOME 1
Bomb explodes
(25% chance)
The real photon passed by B and triggered the bomb
D2 clicks if NO interference is measured - one path is blocked
D_2
D1 clicks if interference is measured - both paths are open
D_1
OUTCOME 2
D1 clicks
(50% chance)
There is no bomb, and the real photon passed by B or C
OUTCOME 3
D2 clicks
(25% chance)
The real photon passed by C but a bomb must be blocking the other path, preventing interference
BOMB DETECTED WITHOUT SETTING IT OFF

NERELATIVISTIČNA KVANTNA MEHANIKA, 1d

Schrödingerjeva enačba

* vse v 1d, smer x, vse nerelativistično, potencialna en. $V(x)$, sila $F=-\frac{dV}{dx}$
* v klasični mehaniki bi radi $x(0), \dot{x}(0) \longrightarrow x(t) \quad t>0$
  v kvantni meh. pa bi radi našli valovno funkcijo $\Psi(x,t)$
  in potem napovedovali verjetnosti za detekcijo delca

  $\Rightarrow$ potrebujemo "gibalno enačbo", ki je očitno parcialna dif. enačba, ker mora vsebovati odvoda po t in x

Valovna enačba (upr. 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

splošneje $\Rightarrow$ $\sum_k a_k u_k$ rešitev)

Načelo superpozicije bi radi obdržali, sicer za naše "snovne valove" ne bomo dobili IF pojavov

Kasneje pokažemo: enačba za $\Psi(x,t)$ bo morala biti 1. reda v čas. odvodu.

Še enkrat: prej smo napovedovali eksaktne $x(t)$

zdaj: $\Psi(x,t)$ in bomo lahko napovedali upr. samo

$$P(a \leq x_{delec} \leq b) = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx \text{ ob času } t$$

Najprej samo prost delec ($V = 0$, $F = -dV/dx = 0$)

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

Od val. paketov vemo:

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

Disperzijska relac. za delec z maso m

globlje ozadje: razlika med fazno in grupno hitrostjo valovanja:

$c_f = \frac{E}{p} = \frac{v}{2}$, $c_g = \frac{dE}{dp} = v$

ta je smiselna, ker imamo paket (="grupo valov")

Torej

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{A(k)}_{\text{forma tega ni bistvena}}\, e^{i[kx - (\frac{\hbar}{2m})k^2 t]}\, dk$$

Uvidimo:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, (ik)^2\, e^{i[\dots]}\, dk$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \left(-i\frac{\hbar}{2m}\right) k^2\, e^{i[\dots]}\, dk$$

$\Rightarrow$ količini $(i\hbar/2m)\,\partial^2\Psi/\partial x^2$ in $\partial\Psi/\partial t$ sta identični!

$\Rightarrow$

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

Odvod 1. reda po t in odvod 2. reda po x $\Longleftrightarrow$ disperz. relacija $\omega \propto k^2$

To Schröding. enačbo (ki še ne vsebuje potenciala) bi lahko pojmovali kot "delovanje" dveh diferencialnih operatorjev na Ψ:

$$\underbrace{p^2}_{\substack{\text{iz klas. mehanike,}\\ \text{"številka"}}} \longrightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \textbf{in} \quad \underbrace{E}_{\text{"številka"}} \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Ta dif. op. delujeta na $\Psi(x,t)$ in pomenita reprezentacijo "pravila" za količini p^2 in E.

NB

* nismo strogo "izpeljali" (se je ne da)
  ... je pa konsistentna z vsemi našimi zahtevami in željami (in še mnogimi, ki jih še ne poznamo)

* jasno, da v Newtonovem režimu in pri $v \to c$ ne bo dobra

Radi bi vključili še potenciale:

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

Uporabimo kar "monokromatsko" VF, $\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)}$

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

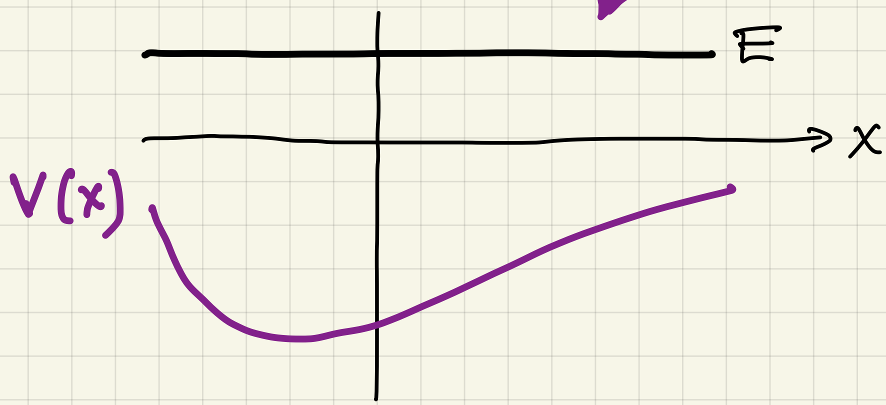
vedno celotna en.

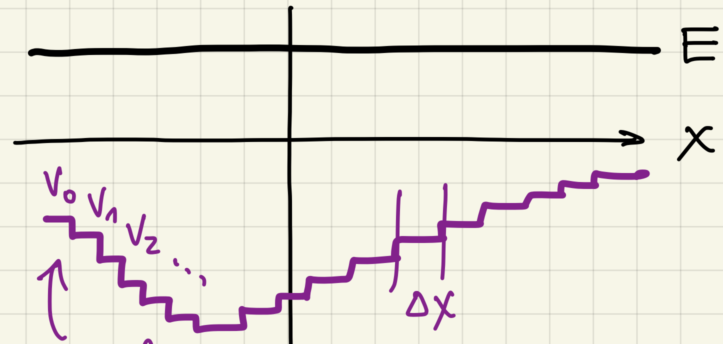
$\Rightarrow$ $\Psi(x,t)$ mora zadoščati dif. en.:

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

za zdaj konstanten, $-dV/dx = 0$

Če hočemo $V \neq$ konst.





odsekoma konst. potenciali:

* E ves čas konst. in $E = \hbar\omega$
* k je navadi stopnički drugačen, i.e.

$$E = V_0 + \hbar^2 k_0^2/2m = V_1 + \hbar^2 k_1^2/2m = \dots$$

⇝ to "stopničavost" poženemo v limito $\Delta x \to 0$, torej za poljuben $V(x)$:

"deluje na..."

strešica = operator

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

Časovno odvisna (nestacionarna) Schrödingerjeva enačba (NSE)

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$\hat{H}$ = Hamiltonov operator (celotne energije) "Hamiltonka" "Hamiltonian"

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$\hat{V} = V(x)$ za zdaj samo multiplikativen...

Opomba.

* Vemo, da so $\cos(kx-\omega t)$, $\sin(kx-\omega t)$, $e^{i(kx-\omega t)}$, ... možne rešitve običajne (klasične) valovne enačbe

$\longrightarrow$ ker so v njej 2. odvodi po x in t !

* toda $\sin(\dots)$ in $\cos(\dots)$ nista OK za Schröd. enačbo, ki je 1. reda v čas. odvodu; in že to nam pove, da mora biti časovna odvisnost $\Psi(x,t)$ kompleksna.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad !$$

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

npr. $$\Psi(x,t) = \frac{A}{2}\left[e^{i(kx-\omega t)} + e^{i(-kx-\omega t)}\right]$$
$$= A\cos kx\cdot e^{-i\omega t}$$

Ali to res zadosti NSE ?

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)A\cos kx\, e^{-i\omega t} = \left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2+V\right)A\cos kx\, e^{-i\omega t}$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hbar\omega\, A\cos kx\, e^{-i\omega t}$$

Torej Schröd. en. velja, če $\frac{\hbar^2k^2}{2m}+V=\hbar\omega=E$ ✓, tem smo začeli

Verjetnostna interpretacija $\Psi(x,t)$

* "gibalno" enačbo imamo $\longrightarrow$ kaj pa vemo o značaju njene rešitve, Ψ?
* kako iz Ψ dobimo informacijo o verjetnosti za detekcijo delca?

Schrödinger: je še sam Ψ tolmačil kot fizikalni "val" oz. reprezentacijo

Born: Ψ samo mat. objekt (= val. funkcija), edina <u>opazljiva</u> reč pa je $|\Psi|^2$.

Osnovni argument $\Psi(x,t) \in \mathbb{C}$ (nujno!)

$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ zaradi $i\hbar \partial\Psi/\partial t$

* vrnimo se k poskusu na dveh režah:

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \qquad \Psi_1 = |\Psi_1| e^{i\phi_1}, \quad \Psi_2 = |\Psi_2| e^{i\phi_2}$$

Verjetnost za detekcijo na zaslonu:

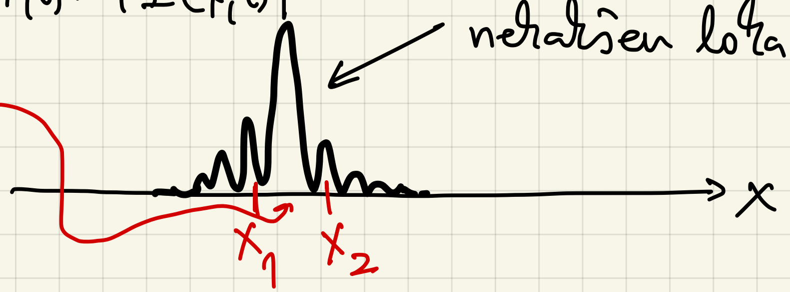
$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= (\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2) \\ &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_2^* \Psi_1 + \Psi_2 \Psi_1^* \\ &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \underbrace{2|\Psi_1||\Psi_2| \cos(\phi_1 - \phi_2)}_{\text{IF člen}} \end{aligned}$$

fazi odvisni od tega, kje opazimo sliko

* za poljuben delec: (ob času t)

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

nekakšen lokaliziran "delec"



sem damo detektor in čakamo...

$\longrightarrow$

verjetnost, da ga zaznamo med x_1 in x_2, je

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

ZAKAJ je t na desni strani? (k temu se še vrnemo)

in dogovorimo se, da

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

delec zagotovo najdemo nekje na $\mathbb{R}$

(NSE je linearna, zato Ψ ok in $a\Psi$ ok)

* ker imamo v splošnem čas. odvisno $\rho(x,t)$, se lahko vprašamo po **TOKU VERJETNOSTI**.

* oglejmo si, kakšnim enačbam zadoščata Ψ in Ψ^* ($V=0$):

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

... se nadaljuje

... od zadnjič: $|\Psi|^2$ pri vzetem x seveda v splošnem lahko odvisna od t:
zato uvedemo količino, s katero predstavimo tok verjetnosti.

Enačbi za Ψ in Ψ^*:

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi$$

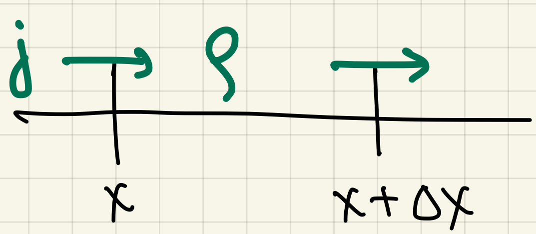
$$= \Psi^*\left(-\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right)\Psi$$

$$= -\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x}\Bigg[\underbrace{\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)}_{\text{gostota verjetnostnega toka (probability current density), } j(x,t)}\Bigg]$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0}$$

ohranitveni zakon za verjetnost: časovno spremembo verjetnosti kompenzira sprememba fluksa preko lokalnega območja



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

samo neto fluks je važen

⤳ ohranitveni zakon velja tudi za neproste delce, $V \neq 0$, biti mora $V = V^*$ (i.e. $V \in \mathbb{R}$)

Subtilna poanta:

Rekli smo $$\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x,t)|^2\,dx = 1$$ @ ? Leva stran je še odvisna od t?

Prepišimo ★ v obliko:

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

* na katerem koli končnem intervalu $\Delta x = x_2 - x_1$ je lahko verjetnost za detekcijo odvisna od t, saj desna stran te enačbe v splošnem $\neq 0$.

Toda @ zadeva $(-\infty,\infty)$ = celotno def. območje Ψ $\Rightarrow$ za ta odgovor sta relevantni limiti $x_1 \to -\infty$, $x_2 \to \infty$.

$\Rightarrow$ VF Ψ mora biti smiselno lokalizirana:

$$\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\Bigg|_{x_1}^{x_2} \to 0 \quad \text{za} \quad \begin{matrix} x_1 \to -\infty \\ x_2 \to \infty \end{matrix}$$

Sprejemljive VF

* Ψ zvezna : ker verjetnost za detekcijo $|\Psi|^2 \Delta x$ ne sme nezvezno "skakati" od ene točke do druge.
* Ker Schröd. enačba vsebuje Ψ'', mora biti zvezen tudi Ψ'.
  Izjema : ko $V \to \infty$, je lahko Ψ' nezvezen (Ψ pa je vedno zvezna).

Stacionarna stanja

← separacija krajevnih in časovnih koordinat
Ta separacija je ključna za rešitev Schröd. enačbe in neposredno pripelje do pojma stac. stanj

Rešitve iščemo s produktnim nastavkom (ansatz), produktno val. funkcijo:

$$\underline{\Psi(x,t) = \psi(x)\, f(t)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} f + V\psi f = i\hbar\, \psi \frac{df}{dt}$$

običajni odvodi: OK

$$\underbrace{\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi}{\psi}}_{\text{odvisno samo od } x} = \underbrace{\frac{i\hbar \frac{df}{dt}}{f}}_{\text{odvisno samo od } t} \equiv \lambda$$

separacijska konstanta (ne val. dolžina!)

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{df}{dt} = \lambda f \qquad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = \lambda\psi \qquad (2)$$

ta mora biti odvisen samo od x, sicer separacija ne deluje!

ω ω

Rešitev (1): $f(t) = e^{-i\lambda t/\hbar} = \cos\frac{\lambda}{\hbar}t - i\sin\frac{\lambda}{\hbar}t$

(ali še * multiplikativna konst.)

$$E = \hbar\omega = \lambda$$

še enkrat: separac. konst.!
= enaka energiji stanja, v katerem je delec

Da to stanje dobimo, pa moramo rešiti (2), in to je glavna naloga pri danem $V(x)$:

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

Časovno neodvisna (= stacionarna) Schrödingerjeva en. (SSE)

Kratek zapis: $\hat{H}\psi = E\psi$

operator celotne energije (Hamilton)

* Produktna rešitev $\Psi = \psi f$ je veljavna rešitev SE ob pogoju, da je ψ rešitev SSE! (čas. odvisnost, vsebovana v $f(t)$, je trivialna)

!
* Dovoljena vrednost $\mathbf{E}$ = lastna vrednost energije (energy eigenvalue)
  pripadajoča $\boldsymbol{\psi}$ = lastna funkcija (eigenfunction) [operatorja energije]

* Tudi ψ je normiran: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1$

* ni nujno vsak Ψ takega tipa, $\psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, lahko imamo njihove superpozicije, ampak če so oblike $\Psi = \psi \cdot e^{-iEt/\hbar}$, opisujejo STACIONARNA STANJA sistema:

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

$\Rightarrow$ stanje STACIONARNO, ker verjetnostni vidiki ustrezne VF (ne pa VF sama!) niso odvisni od časa

* pričakujemo množico E ($=$ spekter) in ustreznih $\psi(x)$ za vsak določeni $V(x)$

Zgled dve stanji (E_1, E_2): $\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}$ in $\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$

$$|\Psi_1|^2 = |\psi_1|^2 \qquad |\Psi_2|^2 = |\psi_2|^2$$

Toda superpozicija __ni__ stacionarna:

$$\Psi(x,t) = a_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + a_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(a_1^*\psi_1^* e^{iE_1t/\hbar} + a_2^*\psi_2^* e^{iE_2t/\hbar}\right)\left(a_1\psi_1 e^{-iE_1t/\hbar} + a_2\psi_2 e^{-iE_2t/\hbar}\right)$$

$$= |a_1|^2|\psi_1|^2 + |a_2|^2|\psi_2|^2 + a_1^*a_2\psi_1^*\psi_2 e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} + a_1a_2^*\psi_1\psi_2^* e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}$$

in to je v splošnem odvisno od t !

Tak $\Psi(x,t)$ ne opisuje stac. stanja, ker $|\Psi(x,t)|^2$ vsebuje oscilatorne člene s krožno frekvenco

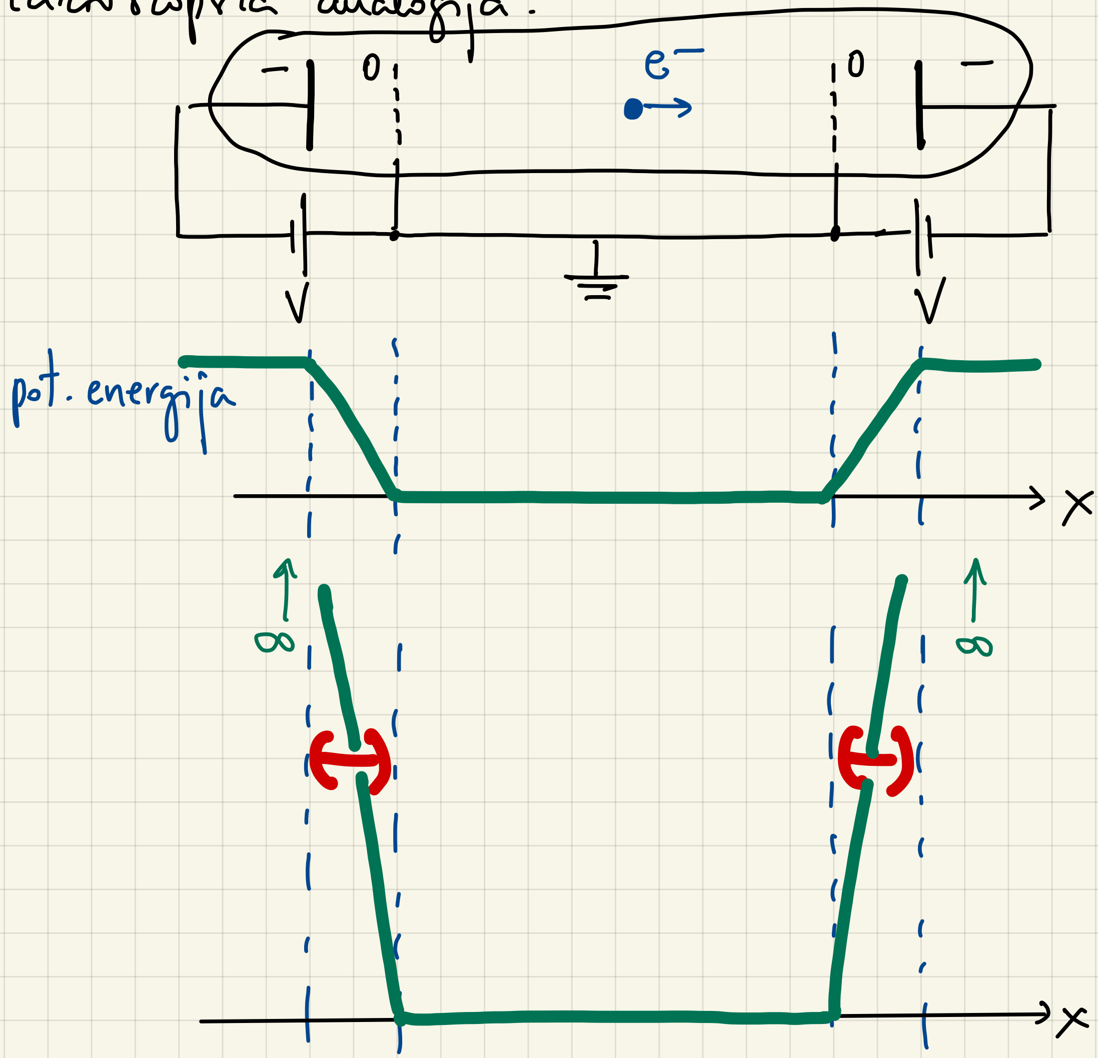
$$\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}$$

$\Rightarrow$ vse statistične lastnosti bodo oscilirale s takšno ω

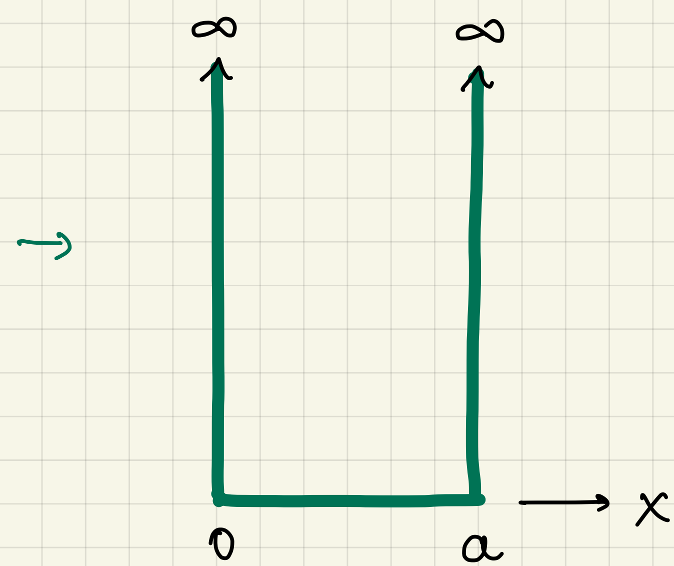
Neskončna potencialna jama / lonec

= infinite square well
= particle in a box

Makroskopska analogija:



$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x < 0,\ x > a \end{cases}$$



Delec ima samo kinet. energijo, saj $V=0$, in $E=T$

Delec ne more iz jame (tudi kvantno ne) $\Rightarrow$ robna pogoja $\underline{\psi(0)=\psi(a)=0}$

$V(x)=0$ znotraj jame (in tu rešujemo SSE!):

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

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

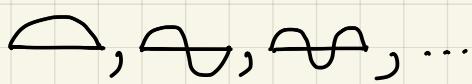
Rešitve so $\psi(x) = A\sin kx + B\cancel{\cos kx}$, $A,B=$ konst.

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

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

$$\Downarrow$$

$$\underline{k_n = \frac{n\pi}{a}} \qquad n=1,2,3,\dots$$

Spomni se na struno:  ...

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

Za energije to pomeni:

kvantno število ($n \geq 1$)

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

nabor lastnih energij delca z maso m v ∞ pot. loncu širine a

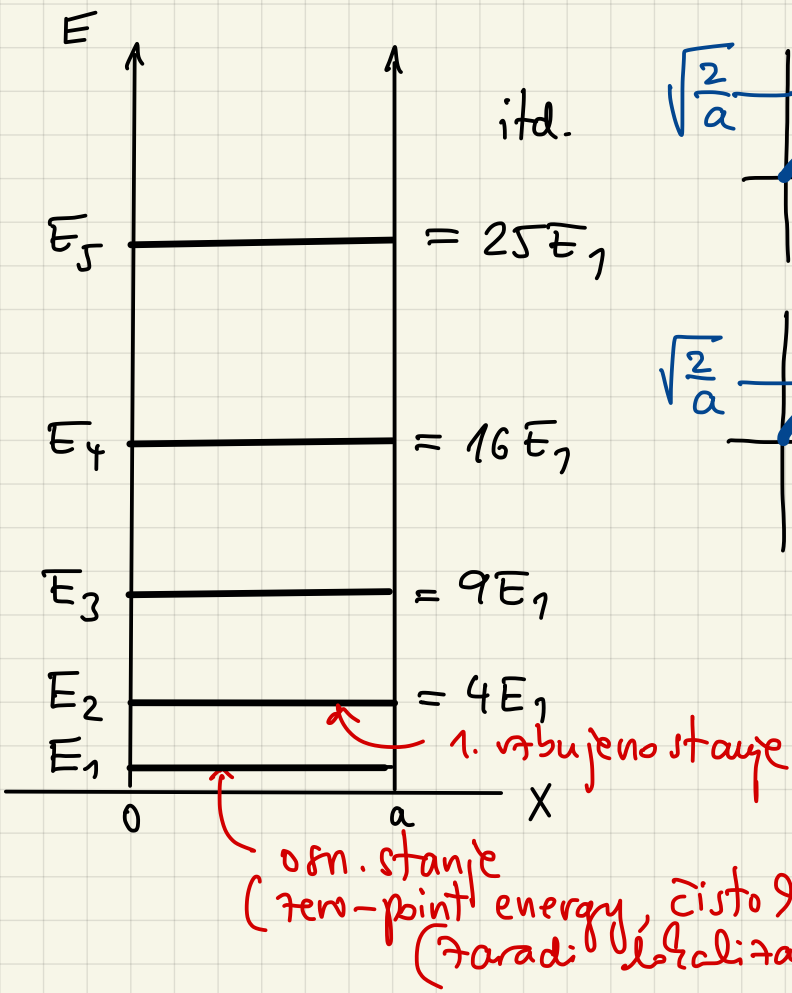
(= energijski spekter!)

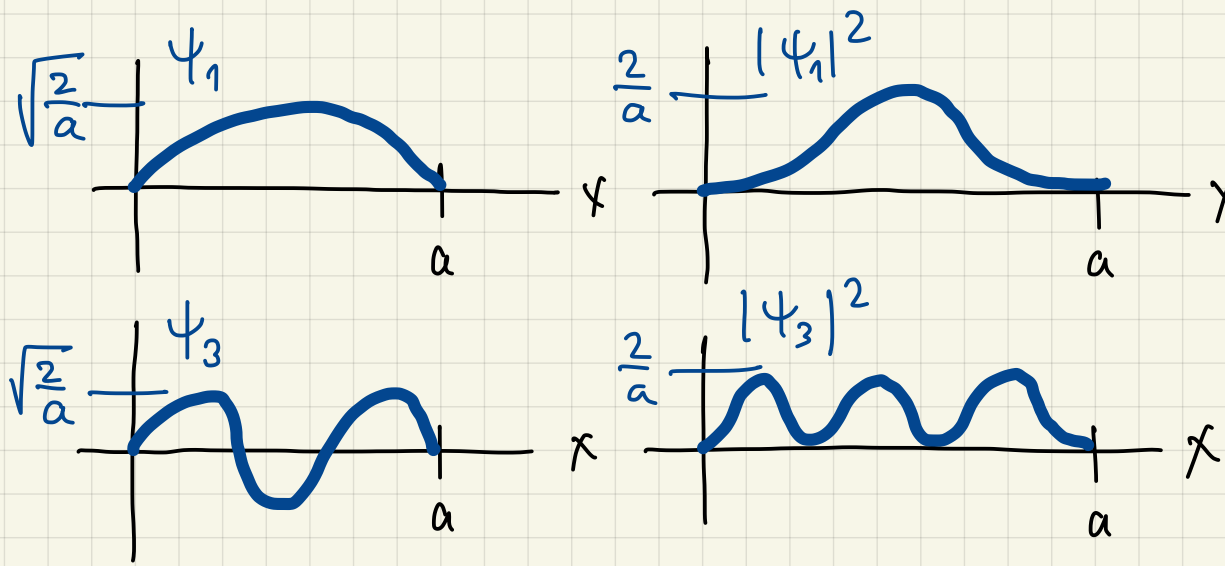
Lastne funkcije so $\quad \psi_n(x) = A_n \sin k_n x$

Normiramo jih: $\quad \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = \int_0^a |A_n|^2 \sin^2\!\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1$

$$\Rightarrow \quad A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (\text{recimo} \in \mathbb{R})$$

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



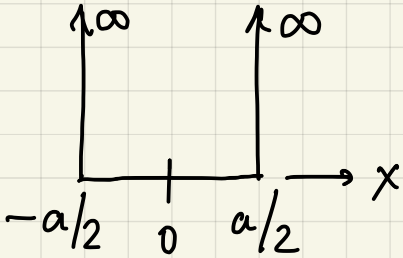


ipd.

Lastne funkcije $\psi_n(x)$ so **ortonormirane:**

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

Opomba

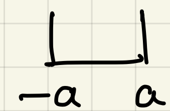


je lahko možna izbira ...
... lepša, če bi radi hitreje videli simetrije

Toda tedaj imamo dve vrsti VF:

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

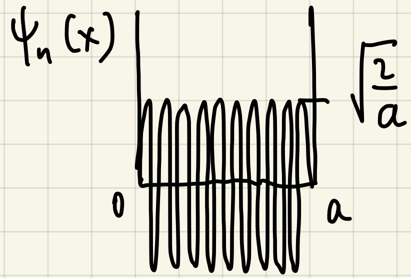
(izraz za E_n ostane enak!)

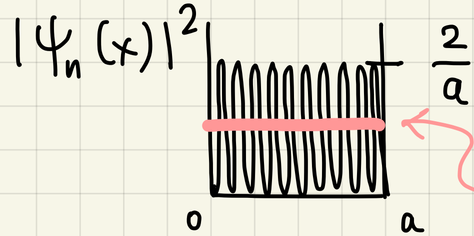
↳ razen če izberete  $\rightarrow \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{8ma^2}$

⇒ (pazi!)

Opomba (korespondenčno načelo):

kakšna je $\psi_n(x)$ oz. $|\psi_n(x)|^2$, ko $n \to \infty$?

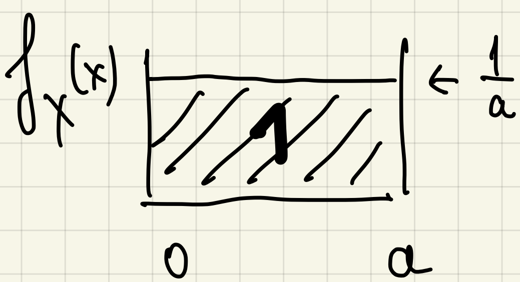




← kvantno

povprečje kvadrata $= \frac{2}{a}\frac{1}{2} = \frac{1}{a}$

Klasično? $f_X(x) = \frac{1}{a}$



$$\int_0^a f_X(x)\,dx = 1$$

✓

Lastnosti lastnih funkcij

* ker so $\psi_n(x)$ ortonormirane, lahko katero koli VF delca (ne le v ∞ jami, povsod!) razvijemo po lastnih f. energije:

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

zač. pogoj

za jamo:

$$\int_0^a \psi_m(x)\Psi(x,0)\,dx = \sum_n c_n \underbrace{\int_0^a \psi_m(x)\psi_n(x)\,dx}_{\delta_{m,n}}$$

$$= \sum_n c_n \delta_{m,n}$$

$$= c_m$$

$\Rightarrow$ izvemo tudi, kako se bo s časom spreminjala $\Psi(x,t)$!

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}}$$

Zgled Lokaliziran delec (= val. paket v ∞ jami)

Vzemimo Gaussov paket s širino $\sigma \ll a$, s središčem pri $x = x_0$, in naj ima povprečno GK $\hbar k_0$:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x}$$

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

te morajo biti lastne za sistem, v katerem to delamo

$$c_n = \underbrace{\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}}_{\text{od } \Psi(x,0)} \underbrace{\sqrt{\frac{2}{a}}}_{\text{od } \psi_n} \int_0^a e^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

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

ker $\sigma \ll a$

to je rezultat (grd) za c_n, ampak ga imamo

... in zdaj imamo $\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

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

$\Rightarrow$ **movie**

* paket se razleze, zmanjša se mu amplituda (zaradi disperzije, različni k!)
* IF vpadnega in odbitega vala / valov na steni (kvantni pojav!)

svarilo: za prost delec (= ravni val) so lastna stanja E tudi lastna stanja GK!
pri delcu v ∞ jami to ne velja; namreč

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

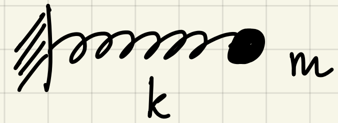
Lastno stanje $\hat{H}$ (celotne E)

superpozicija dveh lastnih stanj GK

dobro določena GK $k_n\hbar$ v eno smer

GK $k_n\hbar$ v nasprotno smer

(Linearni) harmonski oscilator (LHO)



* klasično: delec z maso m na vzmeti s koef. k

$$V(x)=\frac{1}{2}kx^2 \;\longrightarrow\; F=-\frac{dV}{dx}=-kx \quad \text{(Hooke)}$$

$$m\ddot{x}=-kx \;\longrightarrow\; x(t)=x_0\cos(\omega_0 t+\phi) \qquad \omega_0=\sqrt{\frac{k}{m}}$$

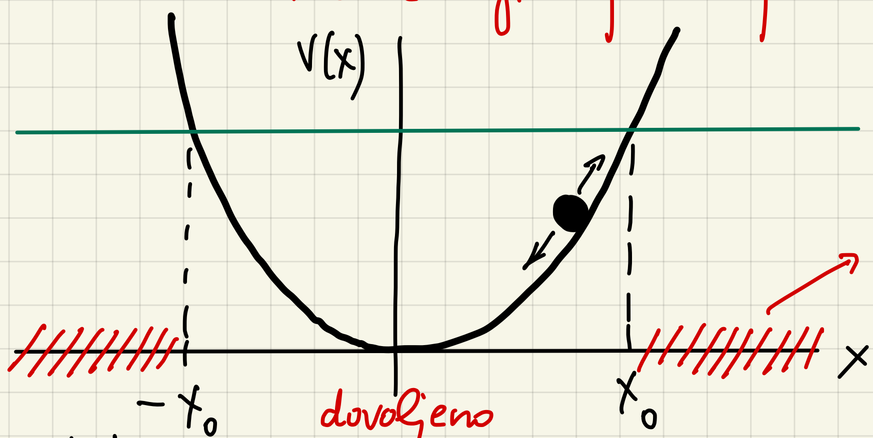
$$v(t)=\dot{x}(t)=-\omega_0 x_0\sin(\omega_0 t+\phi)$$

Celotna energija (konstanta gibanja) je

$$E=T+V=\frac{1}{2}mv^2+\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m x_0^2\omega_0^2\sin^2(\ )+\frac{1}{2}kx_0^2\cos^2(\ )=\underline{\underline{\frac{1}{2}kx_0^2}}$$

$$v(x)=\sqrt{\frac{2}{m}\left(E-\frac{1}{2}kx^2\right)}=\sqrt{\frac{k}{m}\left(x_0^2-x^2\right)} \qquad ★$$

$\Rightarrow$ klasično gibanje omejeno na $-x_0\le x\le x_0$



E = poljuben!

prepovedano

klasično

Kakšna je verj. gostota?

$$\rho_{klas}(x)\,dx=\frac{dt}{T/2}=\frac{dx/v(x)}{T/2} \qquad \omega=2\pi/T$$

Uporabimo v ★: $\rho_{klas}(x)=\frac{2}{T v(x)}=\frac{\omega_0}{\pi}\frac{1}{v(x)}=\frac{\sqrt{k/m}}{\pi}\frac{1}{v(x)}=\frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2-x^2}}\;\longrightarrow$

$$\int_{-x_0}^{x_0} f_{klas}(x)\,dx = 1 \quad ✓$$

klasično ne moremo preko $\pm x_0$ (obračališči) turning points

Zdaj pa kvantna obravnava:
rešiti moramo SSE:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \qquad V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

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

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

Radi bi brezdimenzijsko obliko enačb:

$$\xi^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x^2$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{\hbar\omega_0}$$

$\Rightarrow$ dobimo

$$\underline{\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(\xi^2 - \lambda\right)\psi} \qquad \psi = \psi(\xi)$$

klasičen delec omejen na $|x| \leq x_0$, v novih spremenljivkah to pomeni

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

$$E = \frac{1}{2}kx_0^2$$

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

$\xi^2 < \lambda \Rightarrow \psi$ drug predznak kot ψ'' (dovoljeno območje)

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

$\Rightarrow$ kvantni problem ima neničelno rešitev v klasično prepovedanem območju!

$\rightsquigarrow$ neničelna verjetnost, da delec detektiramo tam, kjer ga klasično več ne najdemo nikoli!

Rešitev na pol uganemo: pričakujemo zelo hitro padanje $\psi(x)$ proti $\pm\infty$

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

To izpolni SSE, če velja $\lambda_0 = 1$

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

Celotna VF osn. stanja:

$$\Psi_0(x,t) = \underbrace{\left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}}_{\text{norm. konst.}} \underbrace{e^{-m\omega_0 x^2/2\hbar}}_{\text{"Gaussovka"}} \cdot \underbrace{e^{-iE_0 t/\hbar}}_{\text{čas. faktor}} = \psi_0(x) e^{-iE_0 t/\hbar}$$

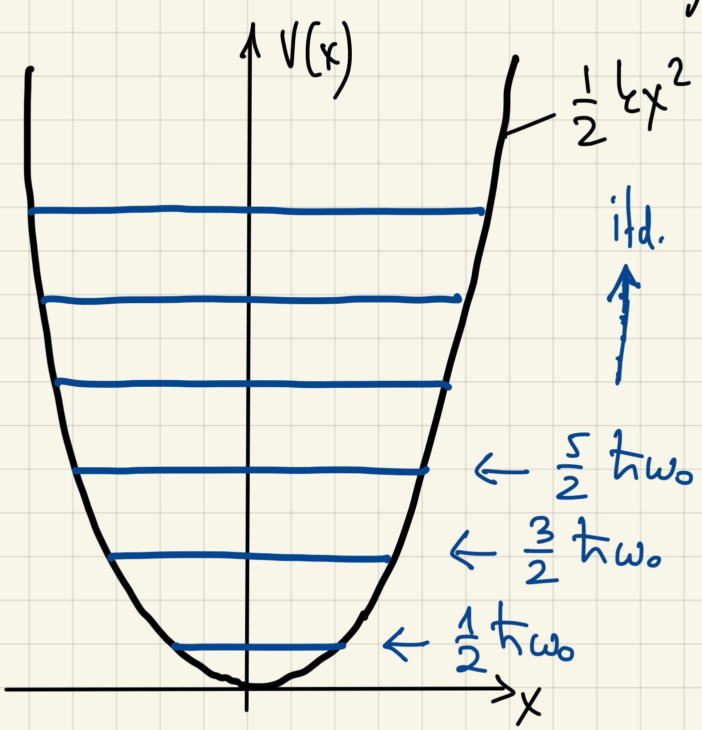
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(x)\, dx = 1$$

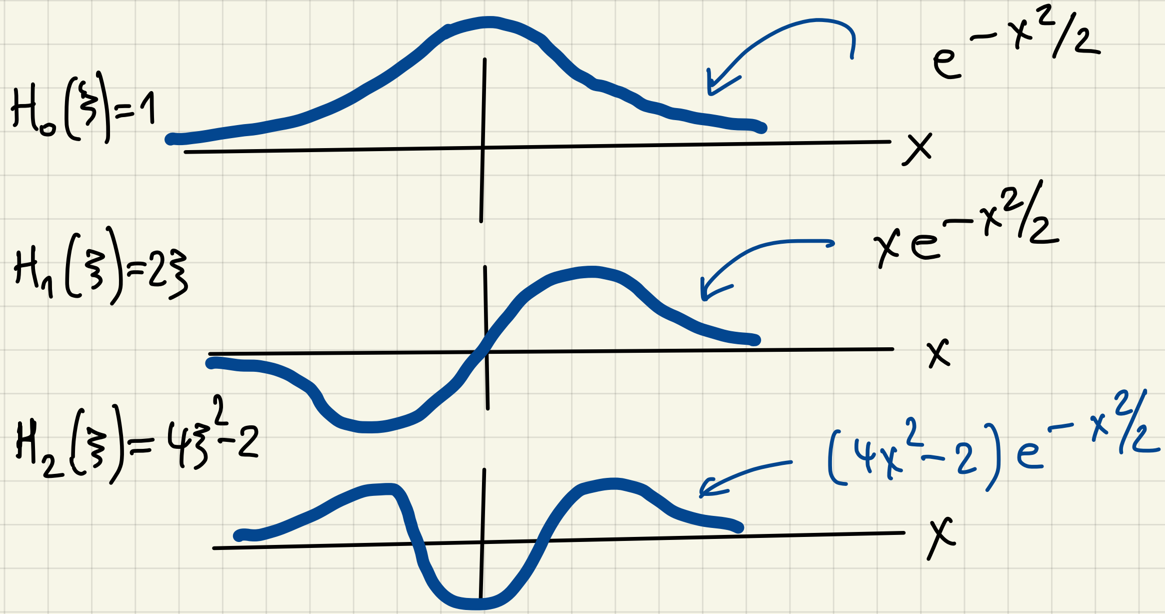
Če bi s tem ugibanjem nadaljevali (ali pogledamo v knjige ali Schröd. knj.):

$$\psi(\xi) = \underbrace{p(\xi)}_{\text{polinomi, stopnje } n} \underbrace{e^{-\xi^2/2}}_{\text{vedno!}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_n(x) &= \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}}\, \underbrace{H_n(\xi)}_{\text{Hermite}}\, e^{-\xi^2/2} \\ E_n &= \frac{\hbar\omega_0}{2}\lambda_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) \end{aligned}}$$

kvantno število $n = 0, 1, 2, \ldots$

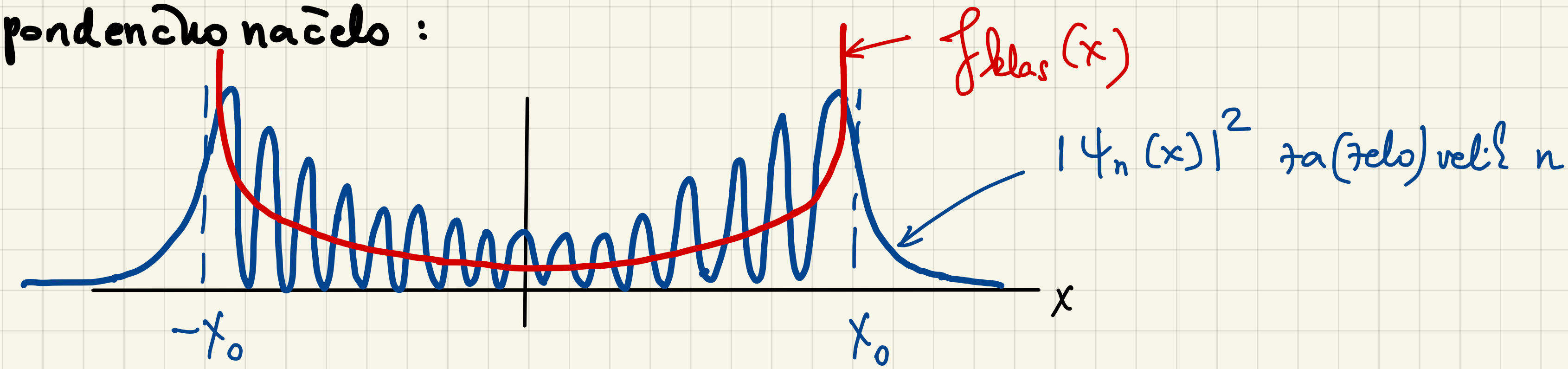




⋮

Izmenjujejo se sode in lihe

? Korespondenčno načelo :



Zgled gaussov paket v harmonskem ($\sim \frac{1}{2} k x^2$) potencialu
(paket spet lokaliziran, ampak ne tako "grobo" kot v ∞ jami)

$\Psi(x,0) =$ Gaussov paket

lastne f. energije za LHO !

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

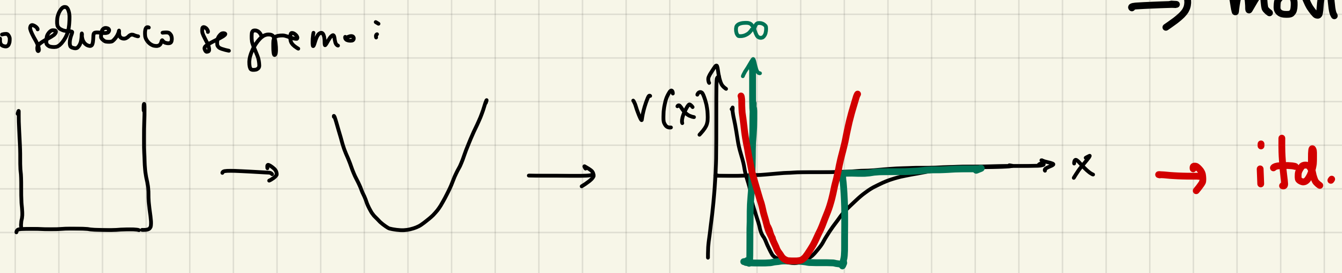
$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0)\, \psi_n(x)\, dx$$

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$E_n = \hbar\omega_0 (n + 1/2)$$

$\Rightarrow$ **movie**

≈ tako sekvenco se gremo:



Pričakovane vrednosti (expected, expectation value), oznaka $\bar{A}$ ali $\langle A \rangle$

* Ψ, $|\Psi|^2$ imamo, v njiju je "zakodirana" vsa informacija, a manjkajo nam izrazi za izračun vseh opazljivk, npr E, GK, lega (v smislu: verj. za detekcijo na Δx), itd.

* A verjetnostne teorije:
$$\bar{A} = \int_{-\infty}^{\infty} A(x) f_X(x)\, dx$$
običajna verj. gostota

* dobro tudi kvantno, če je $A(x)$ skalarna reč (x itd) oz. ni diferencialen operator:

$$\boxed{\langle A \rangle \left(= \bar{A}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\Psi^*(x,t)\, A(x)\, \Psi(x,t)}\, dx}$$

deluje na Ψ

če je $A(x)$ samo multiplikativna reč, je preprosto
$$\int_{-\infty}^{\infty} A(x) \underbrace{|\Psi(x,t)|^2}_{\text{to potem igra vlogo običajne gostote}} dx$$

* Npr.:
$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* V(x) \Psi\, dx$$
$$\langle x \rangle = \int \ldots\ x\ \ldots$$
$$\langle x^2 \rangle = \int \ldots\ x^2\ \ldots$$
vrstni red ni pomemben

* tako kot pri verjetnosti v fiziki ($E[X]$, $E[X^2]$):
$$\underbrace{(\delta x)^2}_{\text{negotovost } x\text{, ki jo rabimo pri Heisenbergu}} = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \right\rangle$$
$$= \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

! !

Kaj pa gibalna količina? Klasično bi si mislili : $\langle p \rangle = m \frac{d}{dt}\langle x \rangle$???

V kvantnem ogrodju:

$$m \frac{d}{dt}\langle x \rangle = m \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi \, dx = m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^* x \Psi)\, dx$$

čas. odvisnost je samo v Ψ !

$$= m \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi + \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx$$

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

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

$$\Rightarrow m \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \left[-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \cancel{\frac{V}{i\hbar}\Psi^*} \right] x \Psi + \Psi^* x \left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \cancel{\frac{V}{i\hbar}\Psi} \right] \right\} dx$$

$$= \frac{i\hbar}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi \right) dx$$

$$= \frac{i\hbar}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi + \Psi^* \Psi \right) - 2\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right\} dx$$

$$= \underbrace{\frac{i\hbar}{2}\left(\Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi + \Psi^* \Psi \right)\Bigg|_{-\infty}^{\infty}}_{\text{ker } \Psi \text{ mora dovolj hitro padati proti } 0, \text{ ko } x \to \pm\infty} - i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\, dx$$

%

$$\Rightarrow \quad \boxed{\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \underbrace{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)}_{= \, \hat{p}} \Psi(x,t) \, dx}$$

$\hat{p}$ = operator gibalne količine

..., od zadnjič:

$$\langle p\rangle = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \ldots = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\underbrace{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)}_{\hat{p}\,=\text{ operator GK}}\Psi(x,t)\,dx$$

$$\hat{p} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

"predpis" za izračun GK
($\hat{p}$ deluje samo na krajevni del VF)

Torej je operator kinet. energije:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \longrightarrow \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \Big\}\ \text{operator kinet. energije}$$

$\rightsquigarrow$ znamo izračunati $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$, torej tudi nedoločenosti

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

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

$$\delta x\cdot\delta p \geq \hbar/2 \qquad \longrightarrow \text{ primeri na vajah}$$

Celotna energija: $E = T + V$

kvantno: $\langle E\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle + \langle V\rangle$

$$\rightsquigarrow \langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi}_{=\hat{H}\Psi\,=\,i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}\,dx \quad \leftarrow \text{NSE !}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)}_{\hat{E}\ (\text{ali } \hat{H})}\Psi\,dx$$

deluje samo na čas. del Ψ

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

Še o stacionarnih stanjih

Oglejmo si pričakovano vrednost energije v stac. stanju

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)\, e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = E_n \underbrace{\psi_n(x)\, e^{-iE_nt/\hbar}}_{\Psi_n} = E_n \Psi_n$$

Torej

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi_n\, dx = E_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*\Psi_n\, dx}_{1\text{, ker je } \psi_n \text{ normalizirana}} = E_n$$

ni presenečenje

Podobno

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \Psi_n = E_n^2 \Psi_n$$

$$\langle E^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \Psi_n\, dx = E_n^2$$

tudi to ni presenečenje

$\Rightarrow$ $\langle E^2\rangle = \langle E\rangle^2 = E_n^2$ $\Rightarrow$ energija stac. stanja je enaka 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: $|\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$ $\rightarrow$ verj. gostota neodvisna od t

$\Rightarrow$ to pomeni neskončno <u>delokalizacijo v času</u>

$\rightsquigarrow$ to je videti kot $\delta E = 0$ in $\delta t = \infty$

$$\delta x\, \delta p \geq \hbar/2$$
$$\delta t\, \delta E \geq \hbar/2$$

$\rightsquigarrow$ najkasneje pri sevanju bo postalo jasno, da strogo stac. stanj ne more biti, sicer sistemi ne bi sevali (perturbacije / fluktuacije)

Meritev energije

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

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

Pričakovana vrednost energije v tem stanju je

$$\langle E \rangle = \int \psi^*(x)\, \hat{H}\, \psi(x)\, dx$$

$$= \sum_{mn} c_m^* c_n \int \psi_m^*(x) \underbrace{\hat{H} \psi_n(x)}_{= E_n \psi_n(x)} dx$$

$= E_n \psi_n(x) \longleftarrow$ SSE

$$= \sum_{mn} c_m^* c_n E_n \underbrace{\int \psi_m^* \psi_n \, dx}_{\delta_{m,n} \text{ (ortogonalnost)}} = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

Zaradi normalizacije je

$$\int \psi^* \psi \, dx = \sum_{mn} c_m^* c_n \underbrace{\int \psi_m^* \psi_n \, dx}_{\delta_{m,n}} = \sum_n |c_n|^2 \equiv 1$$

* $|c_n|^2$ = verjetnost, da delcu v stanju ψ izmerimo n-to lastno vrednost energije.

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

* pri kateri koli posamezni meritvi lahko izmerimo samo eno od lastnih vrednosti hamiltonovega op.!

Primer: povprečna GK valovnega paketa

$$\psi(x) = A\, e^{-x^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x}$$

$$\frac{d\psi}{dx} = A\left(-\frac{x}{2\sigma^2} + ik_0\right) e^{-x^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x}$$

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d\psi}{dx}\, dx$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} A^* e^{-x^2/4\sigma^2} \cancel{e^{-ik_0 x}}\, A\left(ik_0 - \frac{x}{2\sigma^2}\right) e^{-x^2/4\sigma^2} \cancel{e^{ik_0 x}}\, dx$$

$$= \underbrace{\hbar k_0 |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2\sigma^2} dx}_{\text{A nastavljen tako, da je to 1}} + \underbrace{\frac{i\hbar}{2\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} x\, e^{-x^2/2\sigma^2} dx}_{=0 \text{ (lih integrand na sodih mejah)}}$$

$$\langle p \rangle = \hbar k_0$$

✓ paket "leze" na desno
ni presenečenja ... kot pričakujemo klasično

Kaj pa $\langle T \rangle$?

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2}\, dx$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\right) e^{-x^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x} + A\left(-\frac{x}{2\sigma^2} + ik_0\right)^2 e^{-x^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x}$$

%

$$= A\left(-\frac{1}{2\sigma^2} - k_0^2 + \frac{x^2}{4\sigma^4} - \cancel{i\frac{k_0 x}{\sigma^2}}\right) e^{-x^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x}$$

bo spet dal nič pri $\int_{-\infty}^{\infty}$

$$\Rightarrow \langle T\rangle = -|A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{1}{2\sigma^2} - k_0^2 + \frac{x^2}{4\sigma^4}\right) e^{-x^2/2\sigma^2}\, dx$$

$$= |A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(\frac{1}{2\sigma^2} + k_0^2\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2\sigma^2} dx - \frac{1}{4\sigma^4} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2/2\sigma^2} dx \right\}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2/2} = \sqrt{2\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-u^2/2} = \sqrt{2\pi}$$

$u = x/\sigma$, $dx = \sigma\, du$

$$= \ldots = |A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(\frac{1}{2\sigma^2} + k_0^2\right) \cancel{\sqrt{2\pi}}\,\cancel{\sigma} - \frac{1}{4\cancel{\sigma^4}_{\,\sigma^2}} \cancel{\sqrt{2\pi}}\,\cancel{\sigma^3} \right\}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2}\right)$$

$$|A|^2 = \frac{1}{\cancel{\sqrt{2\pi}}\,\cancel{\sigma}}$$

(normalizacija Gauss. paketa)

povsem kvantna pridobitev! → različno od nič tudi tedaj, ko delec klasično miruje (ko $k_0 = 0$) (*)

$$\langle T\rangle = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_0^2\right.}_{\text{običajni } p^2/2m\text{, kot pričakujemo klasično}} + \left.\frac{1}{4\sigma^2}\right)$$

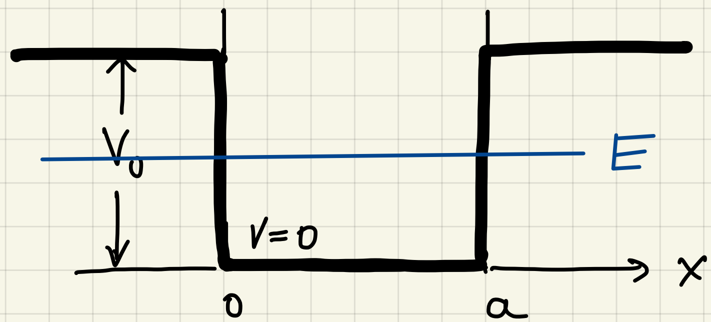
(*) to pride od lokalizacije delca (paket ima širino ≈ nekaj takega kot σ)

Kvalitativne slike valovnih funkcij vezanih stanj

* intuitivne rešitve SSE za poljuben potencial, ne da bi šli računat...
* tudi dobra predpriprava za validacijo numeričnih računov ("sanity check")
* dobra popotnica za 3d probleme!

Ukrivljenost VF

Kakšna bi bila prva lastna VF (osn. stanje) za delec v končni jami?



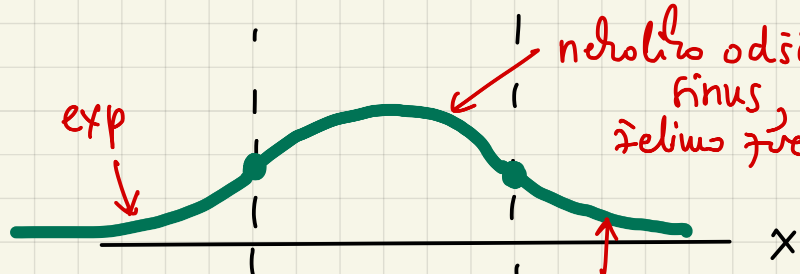
Kvantno imamo rešitev tudi pri $x<0$ in $x>a$:

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

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

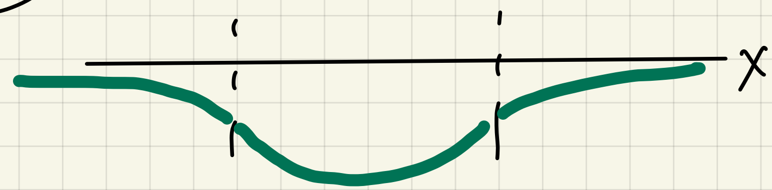
Rešitve: $\psi(x) = e^{\kappa x} \quad (x<0)$

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



nekoliko odščipnjen sinus, ker želimo zveznost in zvezno odvedljivost pri $x=0$ in $x=a$

$(-\psi)$ je ravno tako v redu:



* Zakaj je to VF za najnižje stanje? Ker je to sinusoida z najmanjšo ukrivljenostjo ($=$ najmanjši d^2/dx^2 $=$ najmanjša p, T)

* znotraj kakršnegakoli "lonca" mora stanje z najnižjo energijo ustrezati najnižji možni GK v katerikoli točki potenciala!

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

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

oz. celo: osn. stanje ima najnižjo možnost razmerja $\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2}$

... se nadaljuje

* znotraj katerekoli "lonca" mora stanje z najnižjo energijo ustrezati najnižji možni GK v kateri koli točki potenciala!

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

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

oz. celo: osn. stanje ima najnižjo možnost razmerja $\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2}$

... se nadaljuje

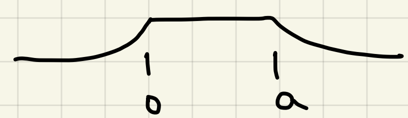
... obnova:

stanje z najnižjo E ima po vsej širini jame konstanten p, in temu p pripada največja možna λ oz. najmanjše možno $k = 2\pi/\lambda$.

$\rightsquigarrow$ sinusoida z najmanjšo ukrivljenostjo + gladko zlepljena z exp( ) na levi in desni

* Kaj pa $\psi(x) = $ konst. čez vso jamo ?

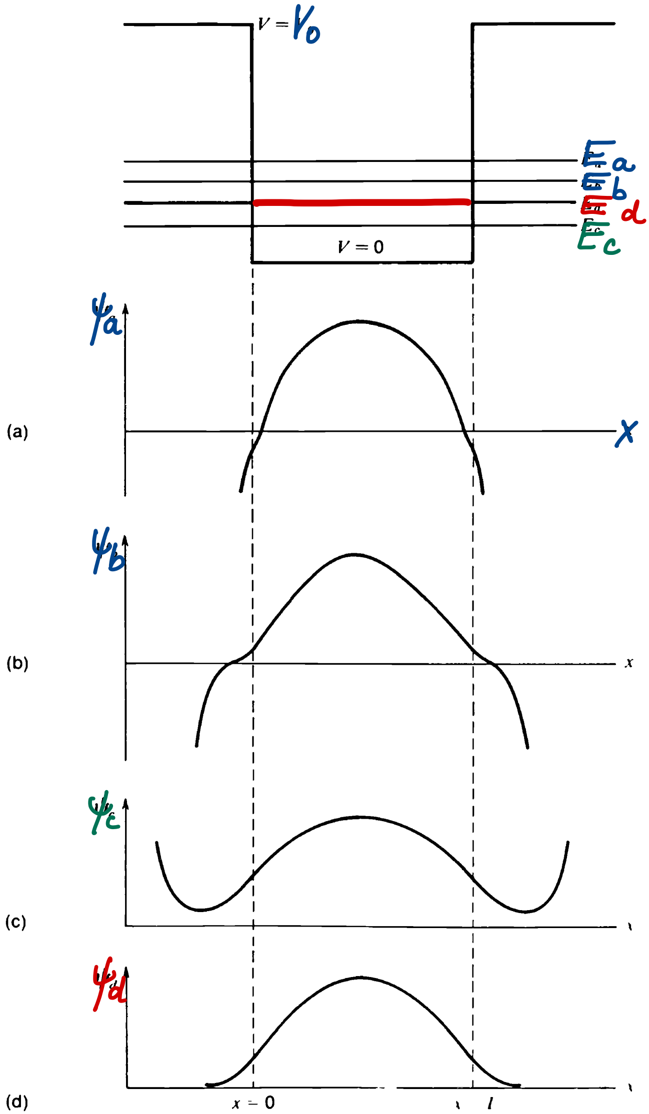
ukrivljenost 0 $\to$ OK, ampak tega ni mogoče gladko zlepiti z exp( ):



* Kaj pa $\psi(x)=0$? To ni pa nič!

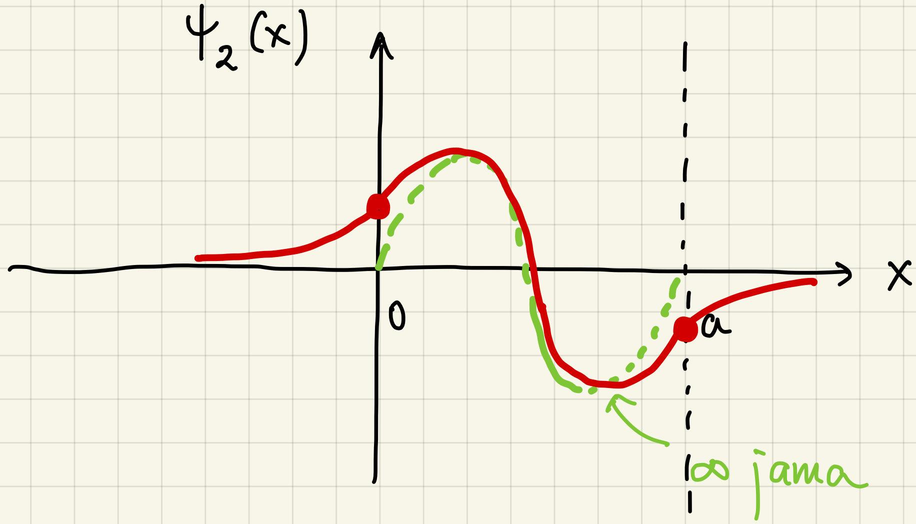
is smaller in the exponential decay constant $\alpha = [2m(V - E)]^{1/2}/\hbar$.

Fig. 3-11 Trial fittings to determine the lowest energy state of a particle bound in a square well. The potential-energy diagram is shown at the top with four trial values for the ground-state energy. Wave functions corresponding to the trial values E_a, E_b, E_c, and E_d. (a) The trial function for $E = E_a$ intersects the axis within the well. A lower trial energy value is needed. (b) The trial function for $E = E_b$ intersects the axis just outside the well and then diverges. A still lower trial value is needed. (c) For E ... E_c, the trial function turns up and diverges outside the well, never crossing the axis. A higher *trial value is needed. (d) The trial function converges smoothly toward the axis. The lowest allowed energy for the given well is E_d.*



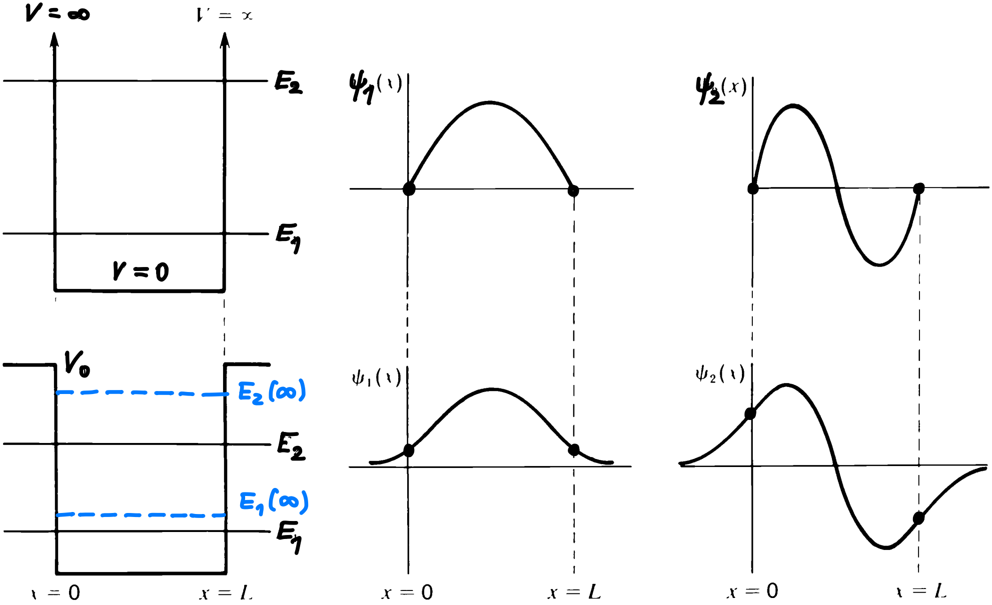
* Kaj pa prvo vzbujeno stanje?

$\rightsquigarrow$ spet sinusoida, ki bo imela malo manj kot eno λ na $[0, a]$



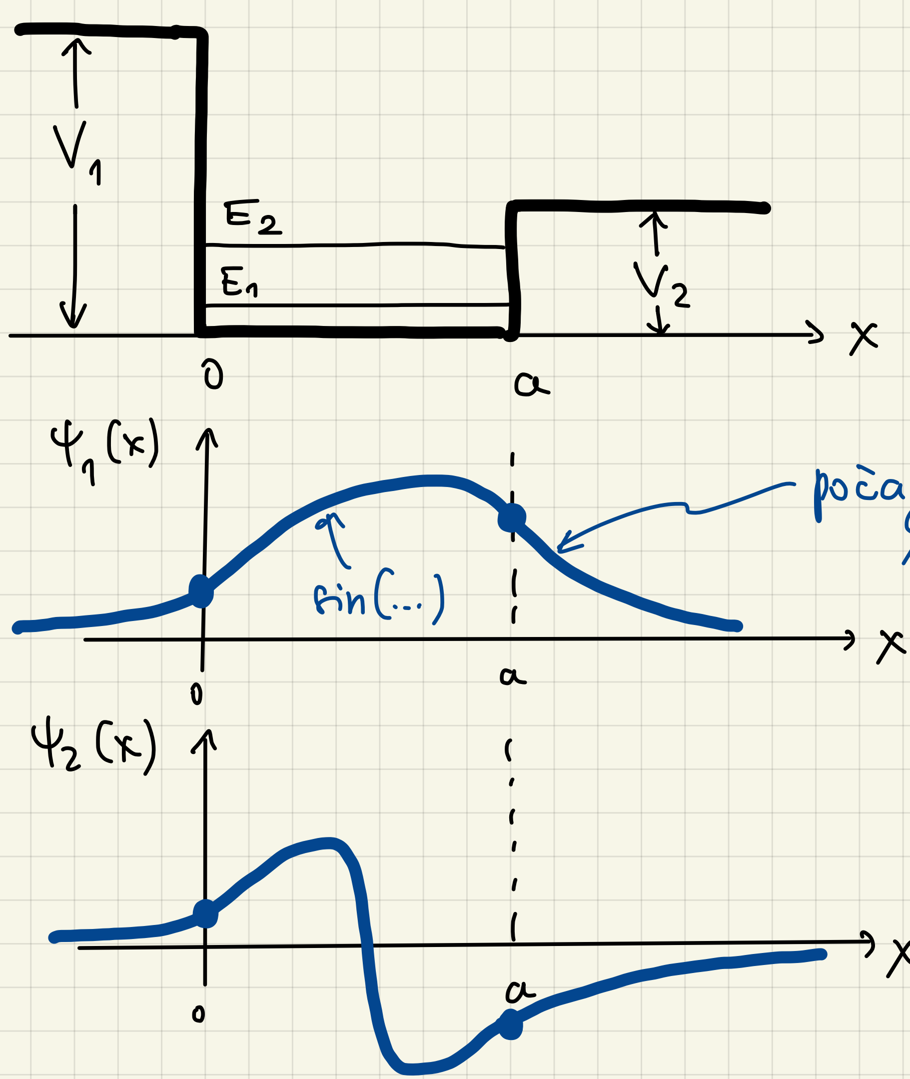
* lastne E v končni jami so vse manjše od energij ustreznih stanj v neskončni jami $\searrow$ ker imamo vedno (malo) manjšo ukrivljenost oz. nekoliko "odščipnjene" sinusoide

gl. sliko $\longrightarrow$



$V = \infty$
$V = \infty$
E_2
E_1
$V = 0$
V_0
$E_2(\infty)$
E_2
$E_1(\infty)$
E_1
$\psi_1(x)$
$\psi_2(x)$
$\psi_1(x)$
$\psi_2(x)$
$x = 0$
$x = L$
$x = 0$
$x = L$
$x = 0$
$x = L$

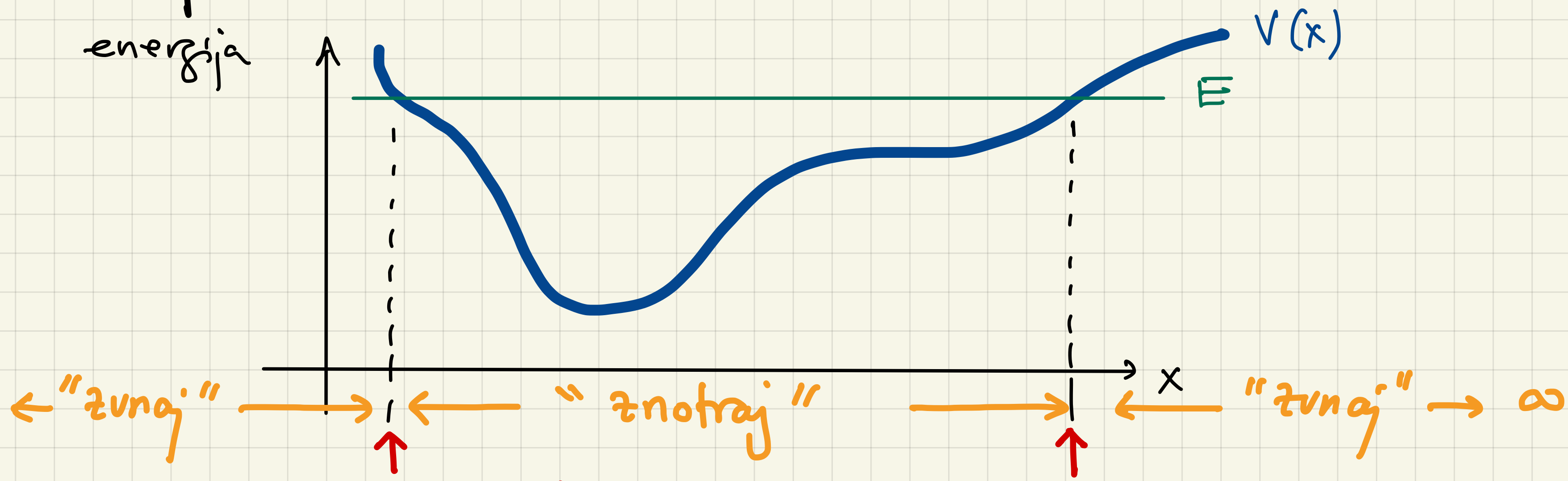
Vaja



počasnejši padec fkt na levi strani jame, ker

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_2-E)}}{\hbar} < k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_1-E)}}{\hbar}$$

Poljubni potenciali: V(x)



meji za gibanje klasičnega delca z energijo E

* "λ" ne moremo več smiselno definirati, lahko pa vseeno definiramo območja "znotraj" in "zunaj", kjer je značaj Schröd. enačbe drugačen:

① ZNOTRAJ ($E > V(x)$):

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

$\rightsquigarrow$ ukrivljenost ψ je vedno proti osi x!

② ZUNAJ ($E < V(x)$):

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

$\rightsquigarrow$ ukrivljenost vedno proč od osi x!

* ŠTEVILO VOZLOV (nodes):

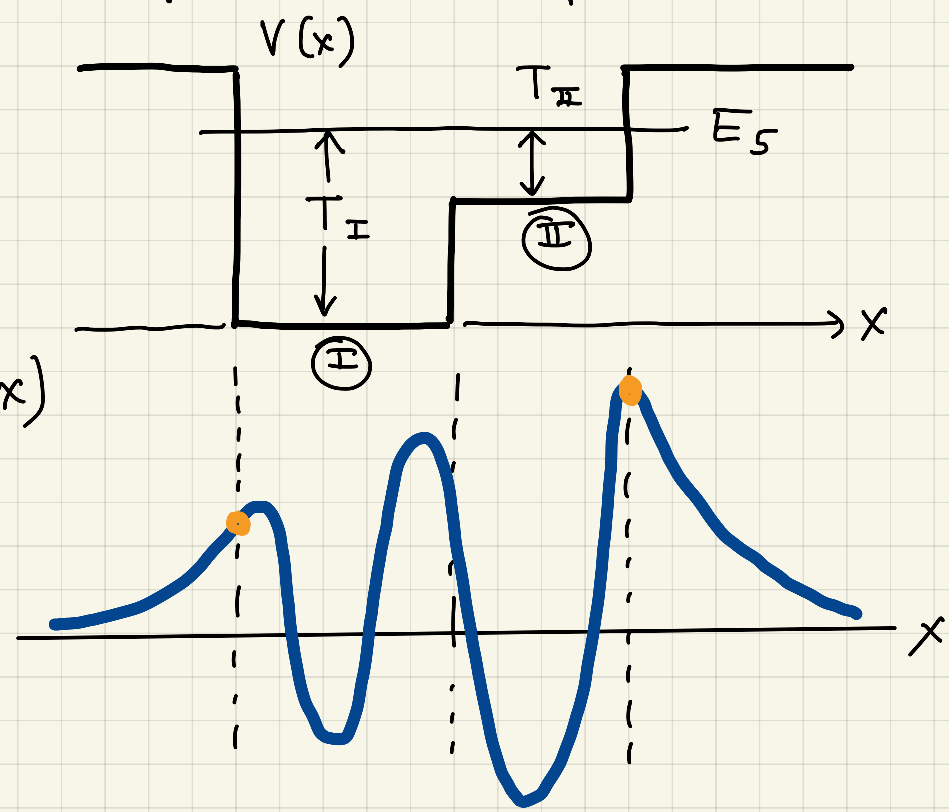
N-to lastno energ. stanje ima **N−1** vozlov

(to velja za vse potenciale, ne le "jame")

V ozadju: Sturm-Liouvilleova teorija (→ MAT)

Pazi: $N = n+1$ pri ∞ jami
$N = n$ pri LHO

* Vpliv globine/višine potenciala na amplitudo valovne funkcije?



V vsakem delu te stopničaste jame ima VF obliko

$$\psi(x) = A \sin(kx + \phi) \qquad (1)$$

Strmina VF :

$$\frac{d\psi}{dx} \equiv m = kA\cos(kx+\phi)$$

oz.

$$A\cos(kx+\phi) = \frac{m}{k} \qquad (2)$$

Enačbi (1) in (2) kvadriramo in seštejemo :

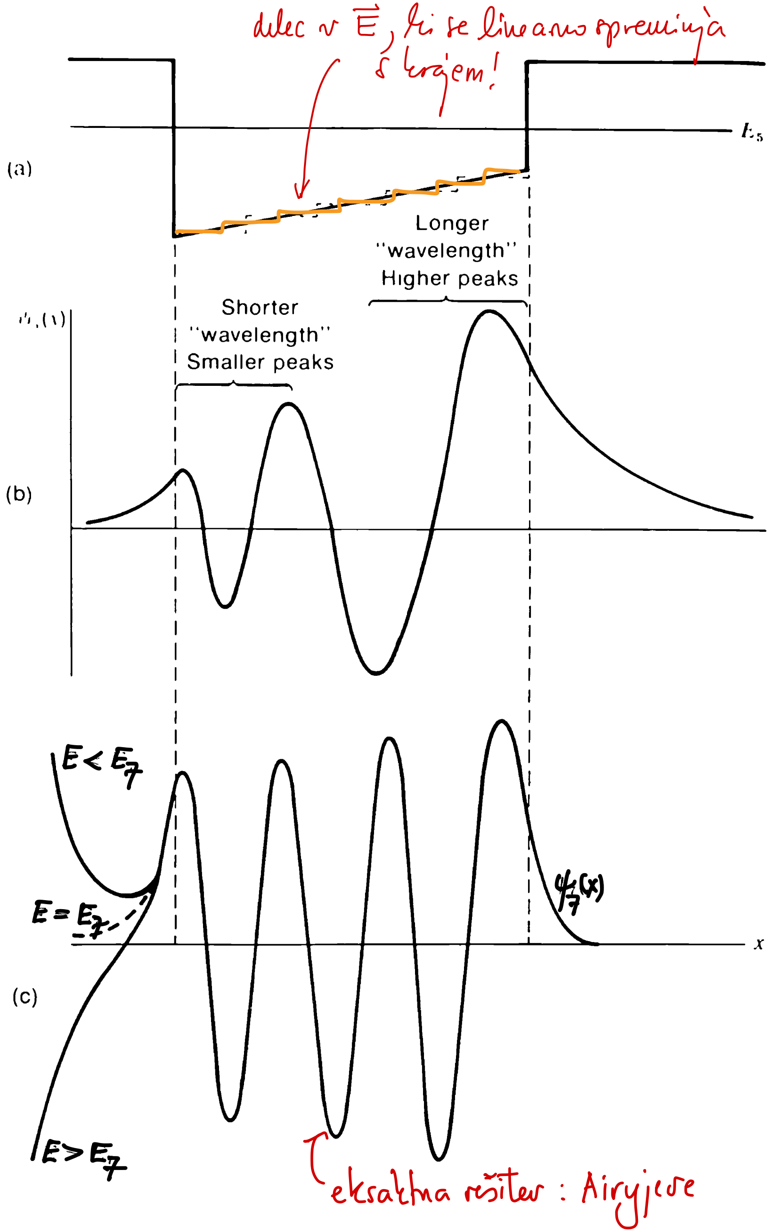
$$A = \sqrt{\psi^2 + \frac{m^2}{k^2}}$$

ψ in $\psi' = m$ sta povsod zvezna! $\Rightarrow$ ψ^2 in m^2 se ne spremenita skokovito, edino k se spremeni, ko naletimo na spremembo v potencialu.

Očitno :

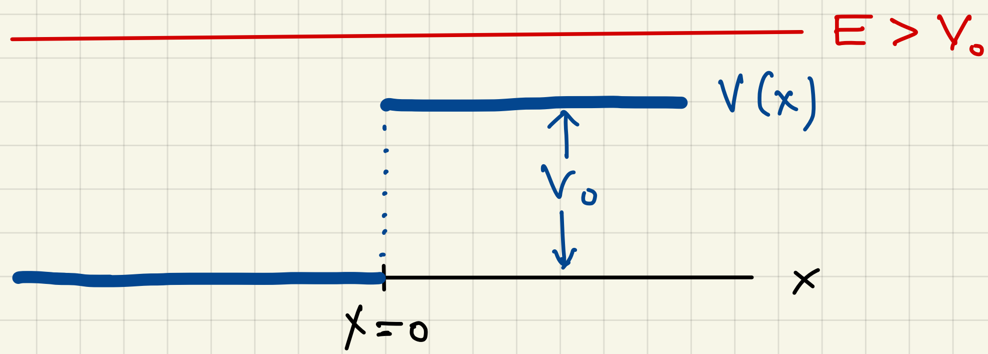
$$k \uparrow \;\Rightarrow\; A \downarrow \qquad \text{(in obratno)}$$

→ slika


delec v E, ki se linearno spreminja s krajem!
(a)
E5
Longer
"wavelength"
Higher peaks
Shorter
"wavelength"
Smaller peaks
(b)
E < E7
E = E7
E > E7
ψ7(x)
x
(c)
eksaktna rešitev : Airyjeve

⤳ zdaj pa od vezanih stanj k nevezanim

Odboj na potencialni stopnici (= skoku)



1. težava: sunkovit skok lahko zgladimo (mrežica, kjer potencial ne skoči sunkovito)

2. težava: normalizacija VF, če delamo z ravnimi valovi:

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

Iz tega smo naredili stoječe valovanje:

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

Vse te VF so stac. rešitve SE za prost delec z isto lastno vred. energije

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

Mimogrede: $(*)$ sta lastni stanji operatorja GK $(= -i\hbar\,\partial/\partial x)$ z lastno vrednostjo $\pm\hbar k$, stanji $(**)$ pa ne, ker sta superpoziciji gibanj $\rightarrow$ in $\leftarrow$.

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

\# delcev v žarku

Bolje: $\psi(x) = \tilde{A}\, e^{ikx}$

$$\rightarrow \quad j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx}\right) = \frac{|A|^2 \hbar k}{m} = \frac{|A|^2 p}{m} = |A|^2 v$$

to navežemo na električni tok

Pri $x < 0$ imamo $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$

in kinet. energijo $E = \dfrac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$

Pri $x > 0$ imamo kinet. energijo $E - V_0$,

zato $k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

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

$$\psi_1(x) = A\, e^{ik_1 x} + B\, e^{-ik_1 x} \qquad x < 0$$

to bomo normirali na el. tok

tole še iščemo

pri $x>0$ pa imamo samo prepuščeni val:

$$\psi_2(x) = C\, e^{ik_2 x} \qquad x > 0$$

iščemo

zveznost ψ in ψ' pri $x = 0$:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{oz.} \quad \lim_{\varepsilon \searrow 0} \psi_1(0-\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \searrow 0} \psi_2(0+\varepsilon)$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

Zveznost ψ: $\quad A + B = C$

Zveznost ψ': $\quad k_1 A - k_1 B = k_2 C$

} 2 enačbi za 3 neznanke (A, B, C), ampak A načeloma poznamo (el. 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:
$$R = \frac{j_1}{j_0} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \frac{\cancel{k_1}}{\cancel{k_1}} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

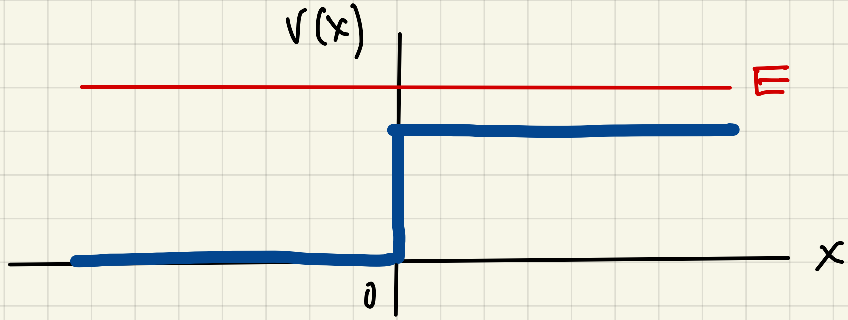
ker sta hitrosti delcev → in ← enaki

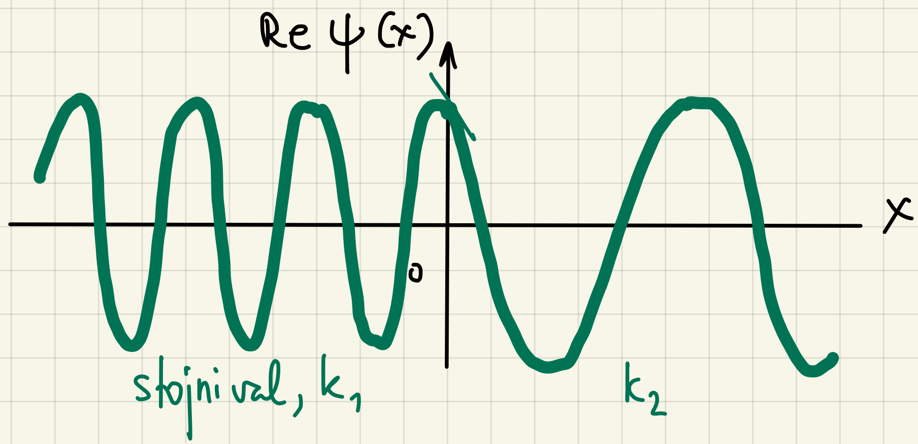
Prepustnost pa kot razmerje prepuščenega in vpadnega toka:
$$T = \frac{j_2}{j_0} = \frac{|C|^2}{|A|^2} \frac{k_2}{k_1} = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

hitrosti delcev → in → različni!

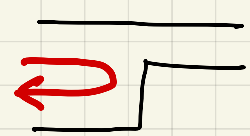
Seveda $R + T = 1$.

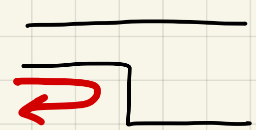
Kako je videti celotna rešitev?



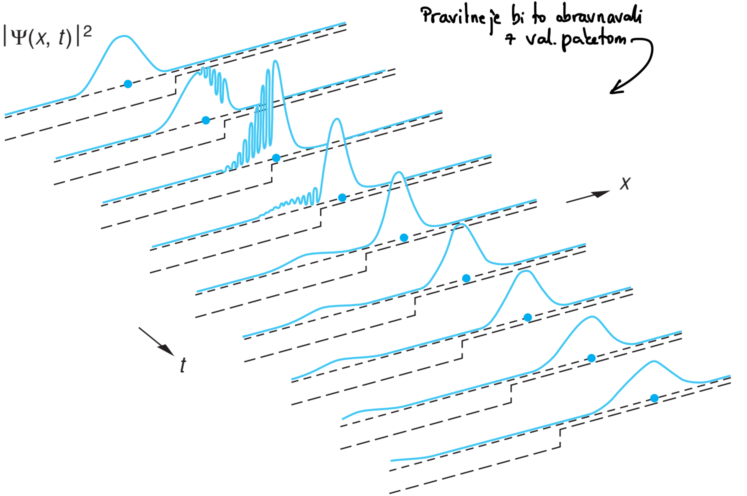


* Čeprav $E > V_0$, imamo $R \neq 0$! (Povsem v nasprotju s klasično fiziko.)
* Velikost R je odvisna od $k_1 - k_2$, ampak ni važno, ali je $k_1 > k_2$ ali $k_2 > k_1$: stopnica navzdol za V_0 povzroči enako odbojnost kot stopnica navzgor!





!



$|\Psi(x, t)|^2$
Pravilneje bi to obravnavali
z val. paketom
x
t

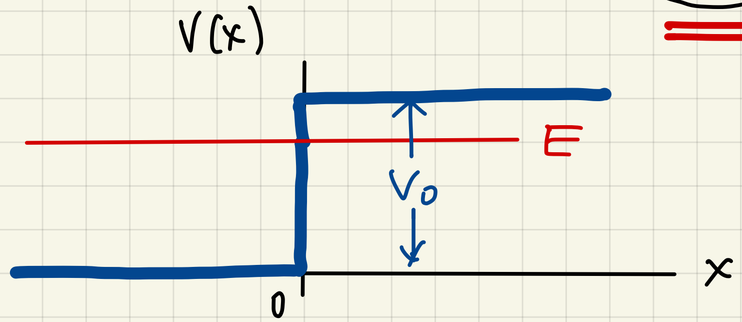
Kaj se zgodi, če $E < V_0$?

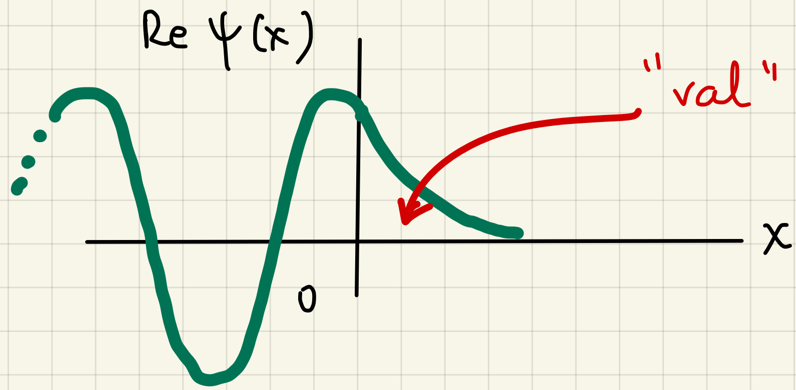
Klasično pričakujemo: vse se odbije.

Kvantno: $k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar = i \underbrace{\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar}_{\kappa} = i\kappa \in \mathbb{C}$!

Torej je VF na desni

$$\psi_2(x) = C e^{ik_2 x} = C e^{-\kappa x} \;!$$





"val" prodre v klasično prepovedano območje, a se vseeno odbije

⤳ verjetnostna gostota, da najdemo delec v (klasično) prepovedanem območju — kjer je njegova kinetična energija negativna (!!!) — je različna od nič!

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

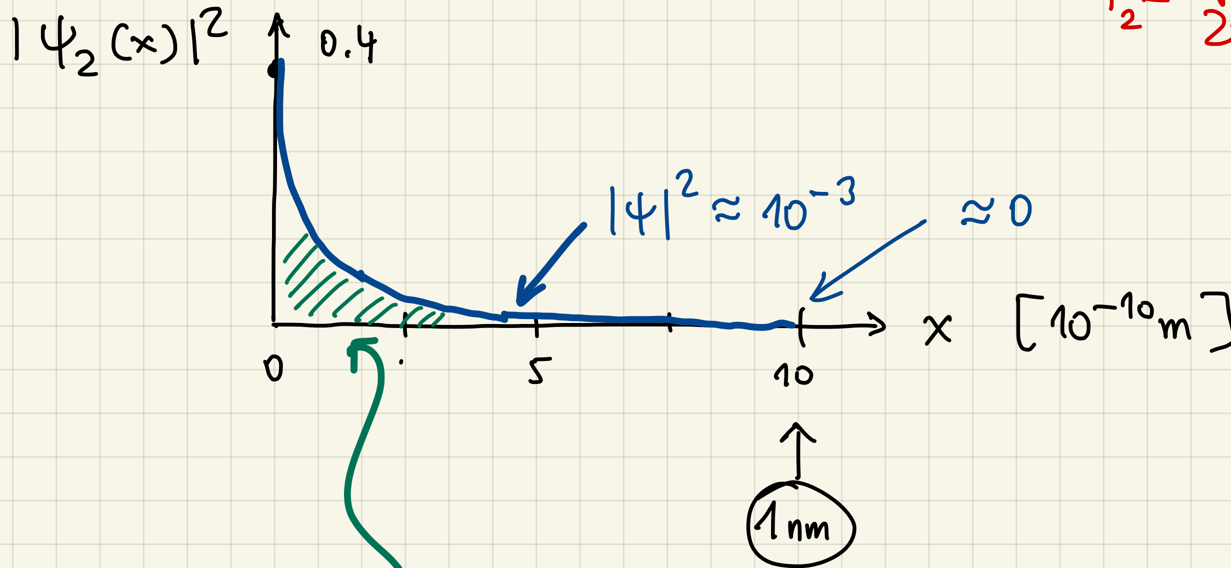
$$|\psi_2(x)|^2 = |C|^2 e^{-2\kappa x} \qquad x > 0$$

Ali lahko pri $x > 0$ res "vidimo" negativno kinetično energijo $\propto (i\kappa)^2 < 0$

$$T_2 = \frac{p_2^2}{2m} = \frac{k_2^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} < 0$$

Numerični zgled z $V_0 = 2\,\mathrm{eV}$, $E = 0.1\,\mathrm{eV}$, $m = m_e$

$$\to \left|\frac{C}{A}\right|^2 \approx 0.4$$



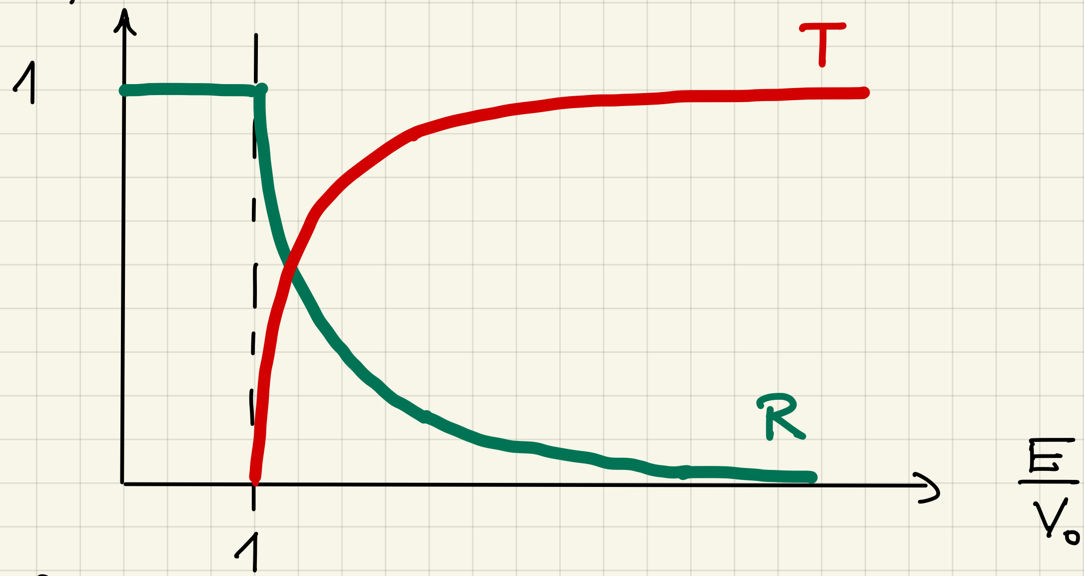
če bi z "meritvijo" energije prišli tako blizu, bi lahko "videli" $T < 0$, če ne bi bilo Heisenbergove neenakosti.

$$\left(\delta x \cdot \delta p \geq \hbar/2 \right)$$

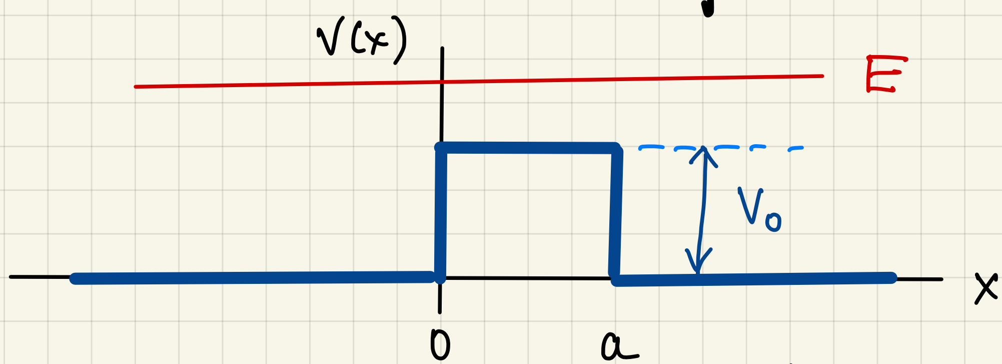
$$\downarrow$$

$$\delta T$$

Povzetek znanja o pot. stopnici:



Potencialna plast in tunelski pojav (= tuneliranje)



najprej obravnavamo tak primer

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} & x < 0 \\ \psi_2(x) = C e^{ik_2x} + D e^{-ik_2x} & 0 < x < a \\ \psi_3(x) = F e^{ik_1x} & x > a \end{cases}$$

Gladko zlepimo ψ_1 s ψ_2 pri $x=0$ in ψ_2 s ψ_3 pri $x=a$:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \longrightarrow A + B = C + D$$
$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \longrightarrow k_1(A-B) = k_2(C-D)$$
$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \longrightarrow Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} = Fe^{ik_1a}$$
$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \longrightarrow k_2(Ce^{ik_2a} - De^{-ik_2a}) = k_1Fe^{ik_1a}$$

Iz teh 4 enačb za 5 neznank poiščemo samo razmerja $|B/A|^2, |C/A|^2, \dots$

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

Iz prvih dveh pa
$$F = (k_1, k_2, a)\,A$$

DN

$$B = (k_1, k_2, a)\,A$$

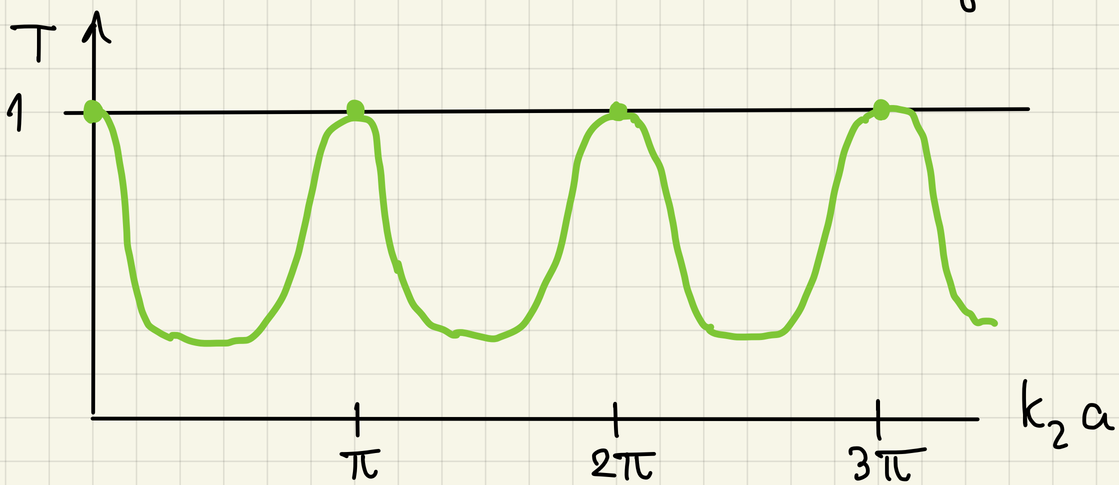
$$T = \frac{j_2}{j_0} = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \sin^2 k_2 a\right]^{-1}$$

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

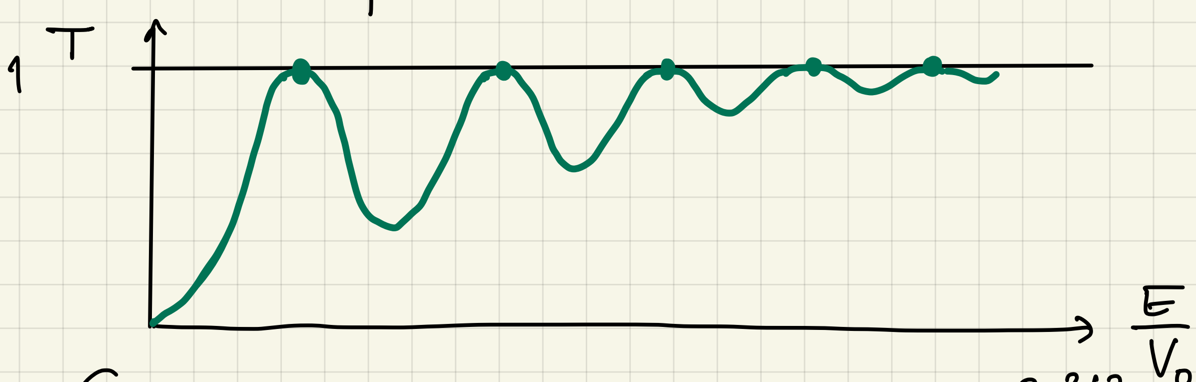
Zanimiva je zlasti odvisnost T od $k_2 a$:

povsod, kjer je $\sin k_2 a = 0$, je $T = 1$, torej kadar $k_2 a = n\pi$

debelina plasti ravno enaka celemu mnogokratniku polovične val. dolž. delca



Še z reskaliranjem abscise:

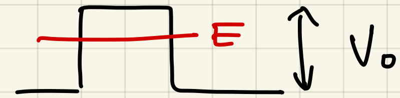


Ramsauerjev pojav v žlahtnih plinih:

v prvem približku so elektronski oblaki teh atomov preproste potencialne plasti, skozi katere vpadni e^- nemoteno švigajo...

(Za energijo tedaj velja $E = V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.)

... od zadnjič ostala možnost: $E < V_0$



* klasično bi se morali vsi delci odbiti, prepustnost $\to 0$
* kvantno: k_2 na $0<x<a$ postane imaginaren:

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

$\to$ VF znotraj plasti je torej

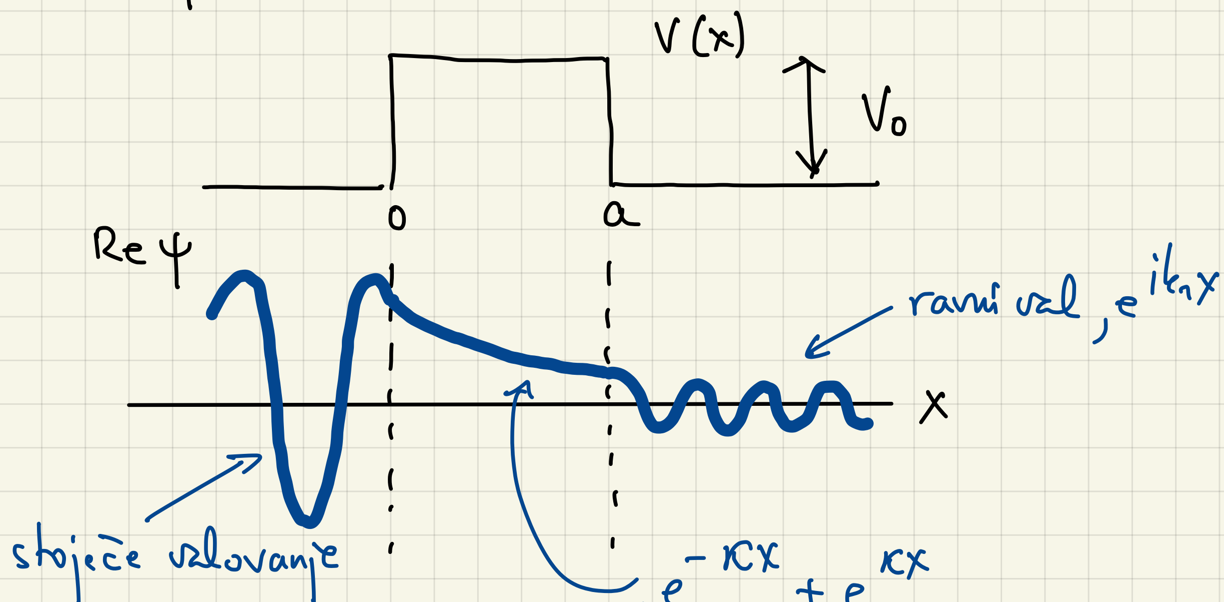
$$\psi_2(x) = C e^{ik_2x} + D e^{-ik_2x} = C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x}$$

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

$$F = \frac{2ik_1\kappa e^{-ik_1a}}{2ik_1\kappa\cosh\kappa a + (k_1^2-\kappa^2)\sinh\kappa a}A$$

(preveri)

$\Rightarrow$ Delci prehajajo skozi plast! = **TUNELSKI POJAV, TUNELIRANJE**



Prepustnost je $T = |F/A|^2$, in če je $\kappa a \gg 1$, sta funkciji v imenovalcu T

$$\cosh \kappa a \approx \sinh \kappa a \approx e^{\kappa a}$$

in dobimo

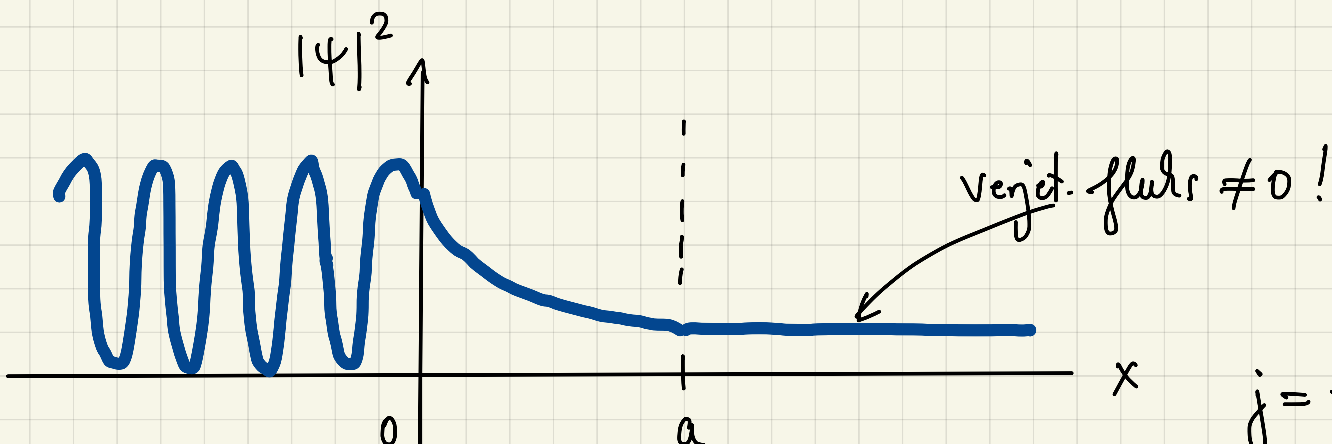
$$T \approx \frac{4k_1^2\kappa^2}{(k_1^2+\kappa^2)} e^{-2a\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar}$$

Še lepši zapis:

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

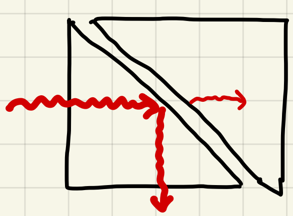
$\rightsquigarrow$ v limiti $\kappa a \gg 1$:

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

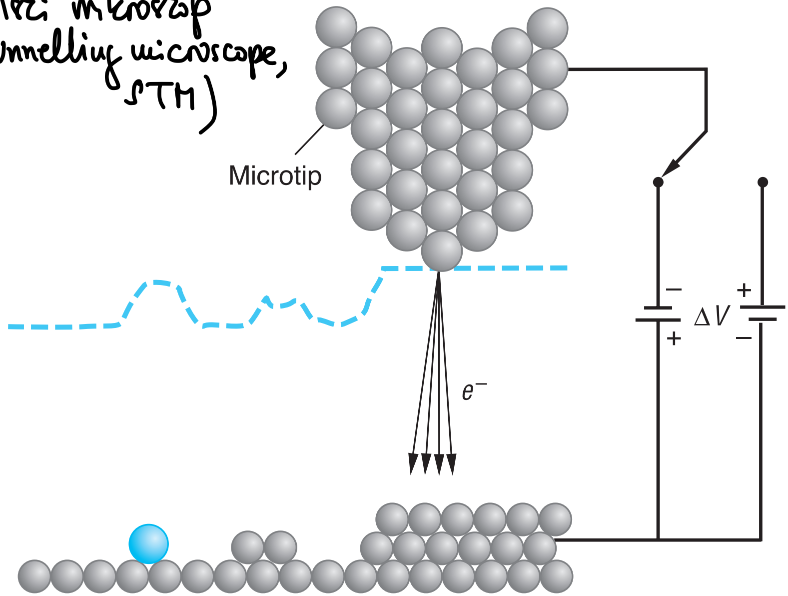


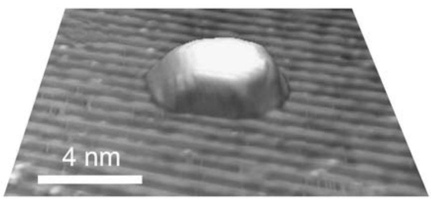
$$\psi(x) = Fe^{ik_1x}$$
$$|\psi(x)|^2 = |F|^2$$
in
$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi^*}{dx}\right) = |F|^2\frac{\hbar k_1}{m}$$

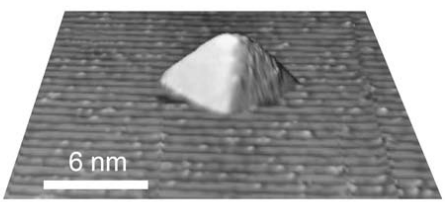
opt. analogija:

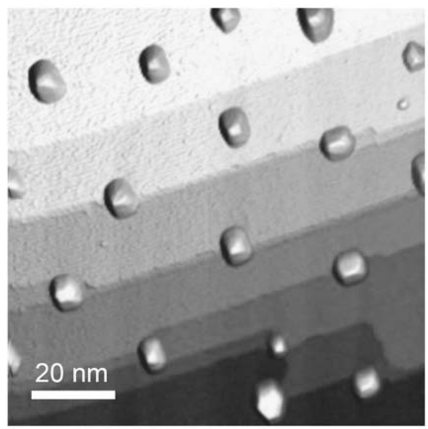


Vrstični tunelski mikroskop
(Scanning tunnelling microscope, STM)









KVANTNA MEHANIKA V 3d

* $\Psi(x,t) \rightarrow \Psi(x,y,z,t) = \Psi(\vec{r},t)$
* $\psi(x) \rightarrow \psi(\vec{r})$
* $dx \rightarrow dV = dx\,dy\,dz = d^3\vec{r}$, ali pa $r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$
* normalizacija VF : $\int \Psi^* \Psi \, dV = 1$
* izračun pričakovanih vrednosti : $\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi \, dV$
* GK : $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\nabla$
* kinet. energija:

$$\hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

* celotna energija: $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(\vec{r})$
* **NSE:**

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

* **SSE:**

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

Stanje prostega delca z dobro določeno GK je 3d ravni val

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

→ lastne vrednosti komponent GK so po analogiji z 1d:

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

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

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

Neskončna jama v 3d

* Koda z ∞ visokimi "zidovi" : $V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 \; ; & 0 < x, y, z < a \\ \infty \; ; & \text{sicer} \end{cases}$

* rešujemo SSE:

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

Uganemo $\psi(x,y,z) = A \cdot \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z$

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

⇒ to nam da sinuse in "ubije" kosinuse

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

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

$$\rightarrow \quad E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)$$

Tu prvič srečamo **DEGENERACIJO** = kadar imajo stanja z različnimi VF enako energijo!.

Npr. funkcija z $n_x=2,\ n_y=n_z=1$ opisuje delec z enako energijo kot $n_x=1,\ n_y=2,\ n_z=1$, ipd.

$$\rightsquigarrow \quad E_{211} = E_{121} = E_{112} \quad !$$

Degeneracija je (vedno) povezana s simetrijo fizikalnega sistema — v primeru od jame v 3d: vse stranice so enake $\underline{\underline{a}}$.

Če porušimo (=zlomimo) to simetrijo, degeneracija izgine: $a, a, a \rightarrow$ **a, b, c**

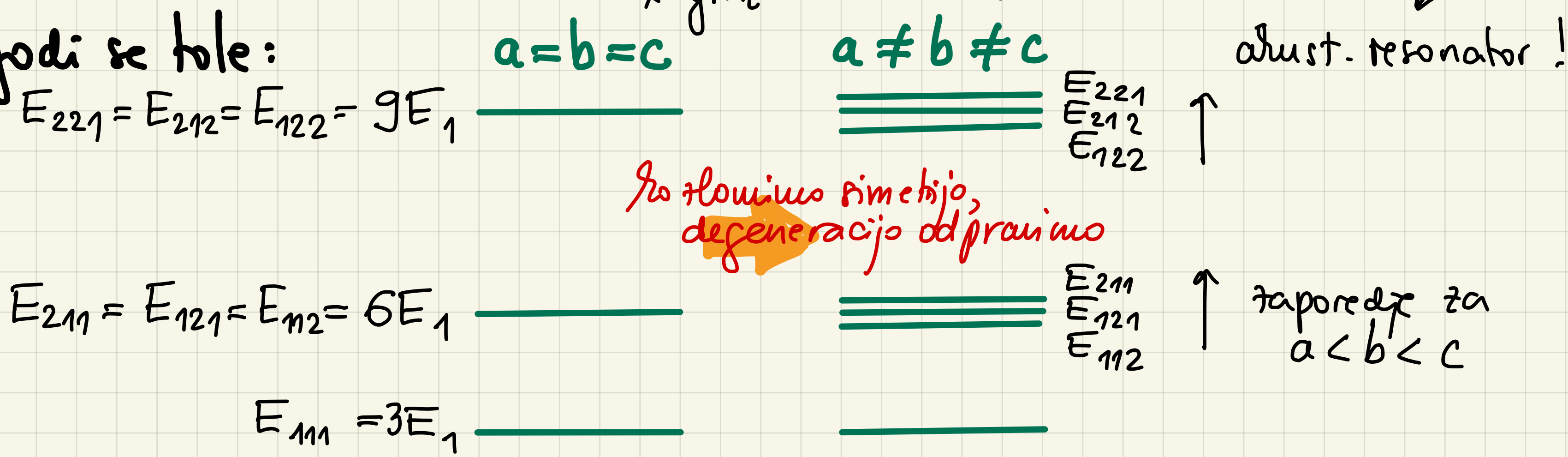
$$\rightarrow \quad \psi(x,y,z) = A \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z$$

$$k_x = \frac{n_x\pi}{a}, \quad k_y = \frac{n_y\pi}{b}, \quad k_z = \frac{n_z\pi}{c}$$

$$\rightarrow \quad E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{c^2}\right)$$

akust. resonator!

Zgodi se tole:



Harmonski oscilator v 3d

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

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

Robni pogoj: $\psi(x, y, z \to \pm\infty) \to 0$

Rešitev iščemo kot produkt VF: $\psi(x,y,z) = u(x)\, v(y)\, w(z)$

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

Delimo z uvw:

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{u}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2}_{=\lambda_x} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{v}\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{1}{2}ky^2}_{=\lambda_y} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{w}\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{1}{2}kz^2}_{=\lambda_z} = E$$

(separac. konst.)

$\Rightarrow$ samo "vsota" treh 1d LHO, z $E = \lambda_x + \lambda_y + \lambda_z$

$$\lambda_\alpha = \hbar\omega\left(n_\alpha + \frac{1}{2}\right)$$

$\alpha \in \{x, y, z\}$

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

$\Rightarrow$ prav tako $\exists$ možnost degeneracije, dokler ne "zlomimo" simetrije $\to$ $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

Nedoločenost in komutatorji operatorjev

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

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

KOMUTATOR

Oglejmo si primer $\hat{A} = \hat{x} = x$ in $\hat{B} = \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

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

$$= -i\hbar\left(\cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}} - \underbrace{\frac{\partial x}{\partial x}}_{1}\psi - \cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}}\right) = i\hbar\psi$$

Ker je ψ poljubna,

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

operator lege (kraja) in operator GK ne komutirata

Če operatorja ne komutirata, ne obstaja stanje, v katerem bi bili vrednosti obeh količin ostro določeni: če bi takšno stanje obstajalo, recimo mu ψ_{AB}, bi namreč imeli:

$$\cdot\hat{B} \;\{\quad \hat{A}\psi_{AB} = A\psi_{AB}$$

$$\cdot\hat{A} \;\{\quad \hat{B}\psi_{AB} = B\psi_{AB}$$

$$\hat{B}\hat{A}\psi_{AB} = A\hat{B}\psi_{AB} = AB\psi_{AB}$$

$$\hat{A}\hat{B}\psi_{AB} = B\hat{A}\psi_{AB} = AB\psi_{AB}$$

$$\ominus \qquad [\hat{A}, \hat{B}]\psi_{AB} = (AB - BA)\psi_{AB} = 0$$

$\Rightarrow$ predpostavili $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, dobili pa smo $= 0$ $\Rightarrow$ $\nexists\,\psi_{AB}$

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

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0 \text{ (ne komutirata)} \iff \delta x \cdot \delta p_x \neq 0$$

$$(\geq \hbar/2)$$

Splošno:

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

(ni za izpit)

Primer: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \Rightarrow \delta x \cdot \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

pač pa $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0 \Rightarrow \delta x \cdot \delta p_y = 0$

nič problematičnega!

Na lepem so drugače populirani tudi energ. nivoji (**nadaljevanje od zadnjič**):

$l=0$ | $l=1$ | $l=2$ | $l=3$ | ...

(2) 4s | (6) 4p | (10) 4d | (14) 4f itd.

"osamljeni" e^- v Ag

(2) 3s | (6) 3p | (10) 3d } **lupina M**, 18 stanj

itd.

(2) 2s | (6) 2p } **lupina L**, 8 stanj

$l=0, m_s = \pm\frac{1}{2}$

$l=1 \Rightarrow m_l = 0, \pm 1$
$m_s = \pm 1/2$

toda ta e^- je v resnici na 5s, ki ima $l=0$, in zato res vidimo samo $m_s = \pm 1/2$ pri S&G. (Ampak zakaj je 5s pred 4f, za zdaj še ne razumemo)

Degeneracija (pri danem n):

$$2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2n^2$$

Zakaj sta S&G uzela ravno Ag atome ($Z=47$)
$\Downarrow$
$+Ze_0$ jedro
Z elektronov

(2) $n=1$ (1s) } **lupina K**, 2 stanji

$l=0, m_s = \pm 1/2$

E

Nauk Stern-Gerlachovega poskusa: poleg $\vec{L}$ obstaja tudi $\vec{S}$, ki je prav tako kvantizirana, in tako $\vec{L}$ kot tudi $\vec{S}$ pripadajo kedinstveni mag! momenti z ustreznimi g-faktorji:

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{\mu}_\ell &= -g_\ell \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} \qquad && g_\ell = 1 \\ \vec{\mu}_s &= -g_s \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} \qquad && g_s = 2 \end{aligned}}$$

spinsko žiromag. razmerje (spinski g-faktor)

O tem, da je $g_s = 2$, nam nič ne pove ne klasična mehanika ne nerelativistična kvantna mehanika! Šele relativistična kvantna mehanika (Diracova enačba) nam dejansko napove $g_s = 2$ za elektron. To moramo vzeti, a obenem vemo:

$$\frac{\mu_e}{\mu_B} - 1 = \frac{g_s - 2}{2} = 0.00115965218091 \pm 0.00000000000026 \quad \text{(EXP!)}$$

(PDG 2018)

i.e. mag. moment elektrona je določen tako natančno:

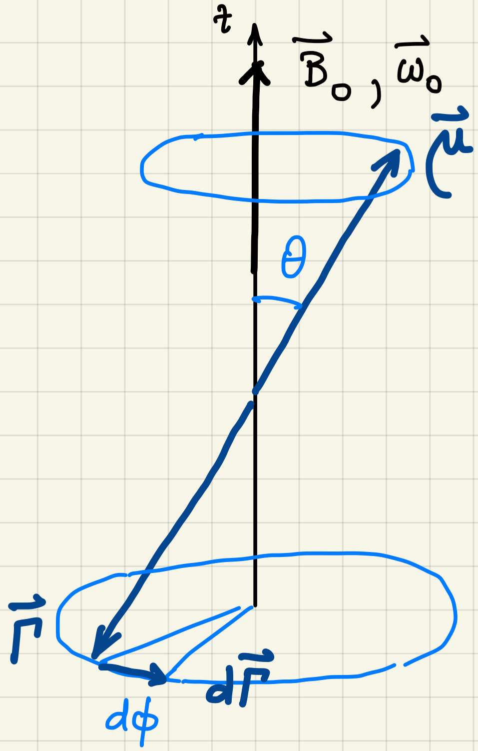
$$\mu_e = (1.00115965218091 \pm 0.000\ldots00026)\,\mu_B$$

Dejstvo, da to eksperimentalno in teoretično razumemo na ≈ 12 decimalk, je eden od večjih triumfov moderne fizike $\rightarrow$ teorija kvantne elektrodinamike (QED)

Težave pa bo povzročalo ravno to, da je $g_\ell = 1$ in $g_s = 2$:

$$\vec{\mu}_\ell + \vec{\mu}_s = -(g_\ell \vec{L} + g_s \vec{S})\frac{\mu_B}{\hbar} = -(\underbrace{\vec{L} + 2\vec{S}}_{\neq \text{ celotna VK}})\frac{\mu_B}{\hbar}$$

Magnetna resonanca (seminar)



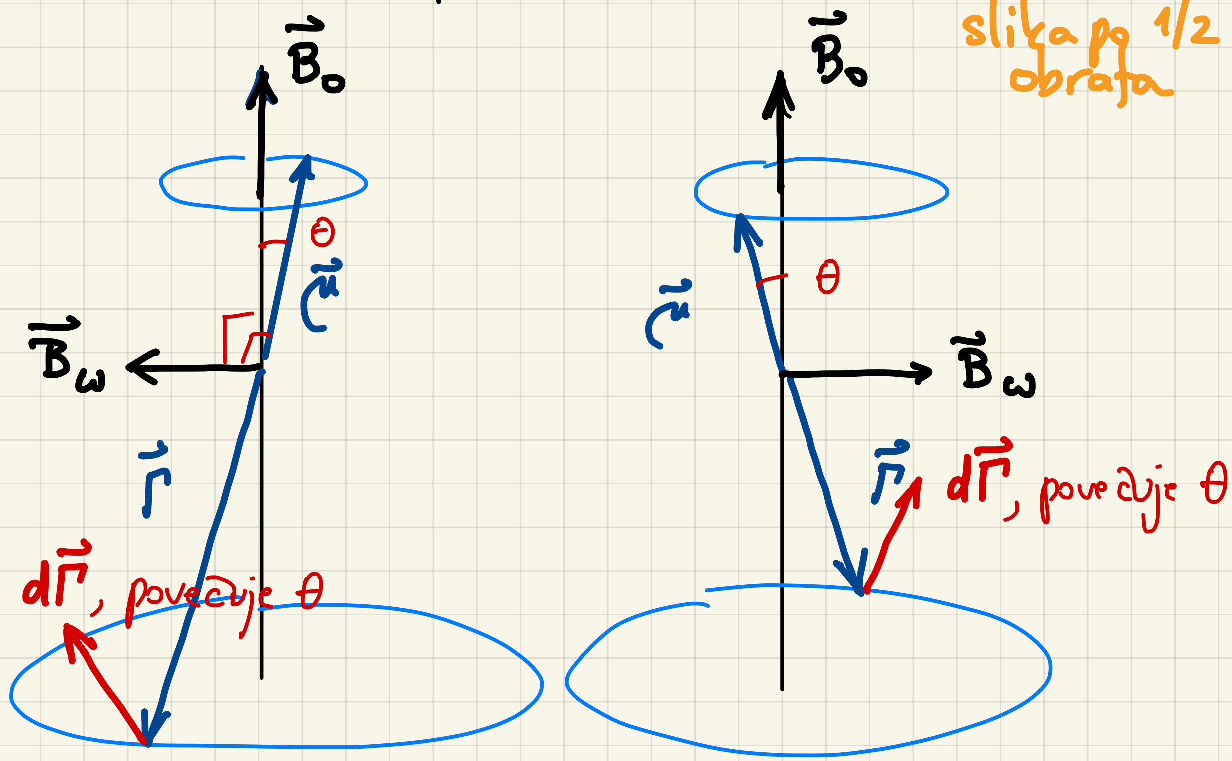
$\vec{B}_0$ = statično zunanje MP (čim bolj homogeno)

Larmorjeva precesijska frekvenca: $\omega_0 = \dfrac{eB_0}{2m_e}$

$E^{(0)}_{mag} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}_0$

Indeks se nanaša na B_0

Kaj bi se zgodilo, če na $\vec{B}_0$ superponiramo še časovno spremenljivo polje $\vec{B}_\omega$, in sicer $\perp$ na $\vec{B}_0$:



$d\vec{\Gamma} = \vec{M}\,dt$, $\vec{M} = \vec{\mu}\times\vec{B}_\omega$

Če bo ω primerno izbrana (v bližini ω_0), lahko spremenimo smer $\vec{\mu}$ z dovajanjem ustrezne energije:

$$\underbrace{\hbar\omega}_{\substack{\text{pošljemo not} \\ (\text{to dostavi } \vec{B}_\omega)}} = \Delta E^{(0)}_{mag} = g\frac{e\hbar}{2m_e}B_0 = g\hbar\omega_0$$

ni važno, kateri (gre le za princip)

Ko s $\hbar\omega$ točno "ulovimo" razliko $\Delta E^{(0)}_{mag}$, dobimo resonanco in preskočimo v višje mag. stanje

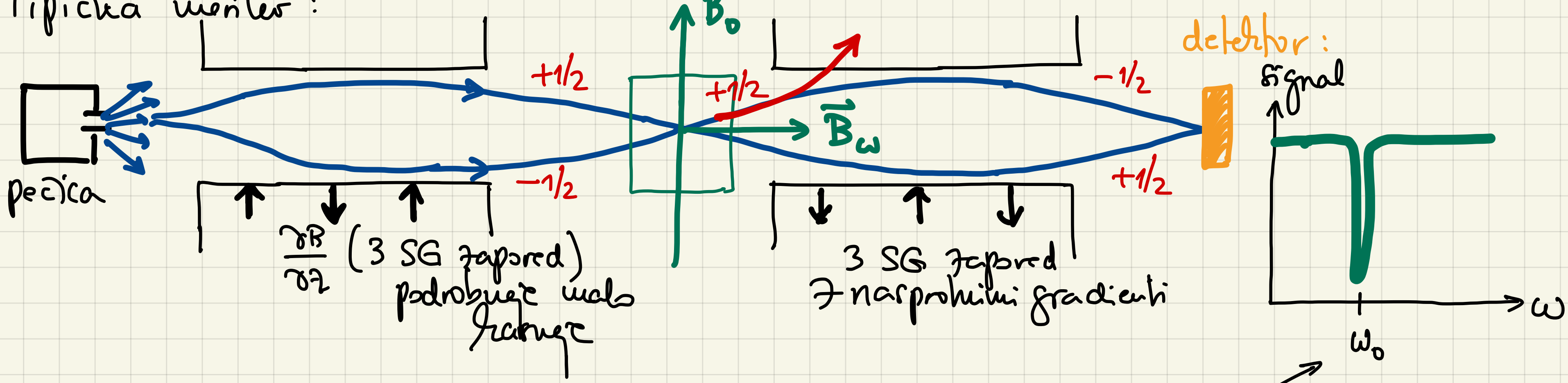
Značilni računi: $\Delta E^{(0)}_{mag} \approx 10^{-4}\,\text{eV} \Rightarrow B_\omega$ v področju GHz (mikrovalovi), tipično $B_0 \approx 1\,\text{T}$.

Zakaj je to dobro

* če natančno poznamo $B_0 \Rightarrow$ 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

$\Rightarrow$ to kemiki uporabljajo za meritev lokalnih polj v molekulah

Tipična meritev:

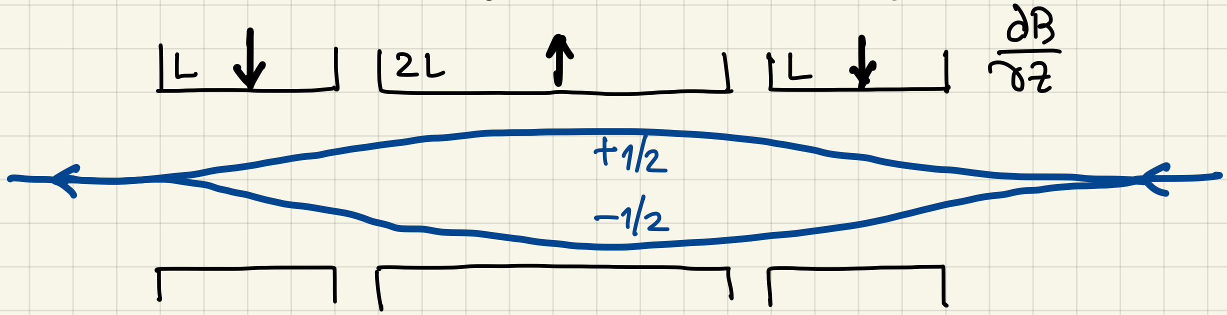


reson. frekvenca odvisna le od sistema
(jedra, elektroni, atomi, ...)

MRI ≡ NMR (magnetic resonance imaging, nuclear magnetic resonance)

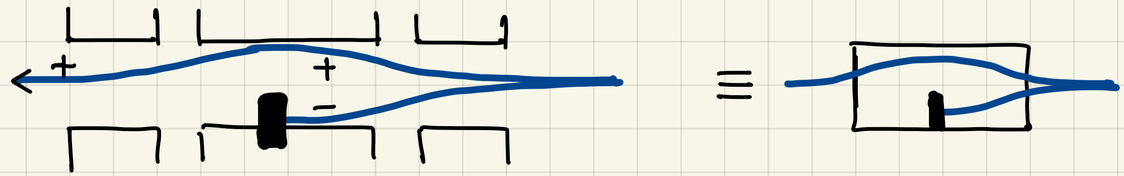
Če delamo z e^-: **ESR** = elektronska spinska resonanca

Miselni poskusi s spinom 1/2 (Gedankenexperimente)



Tole "ne naredi nič".

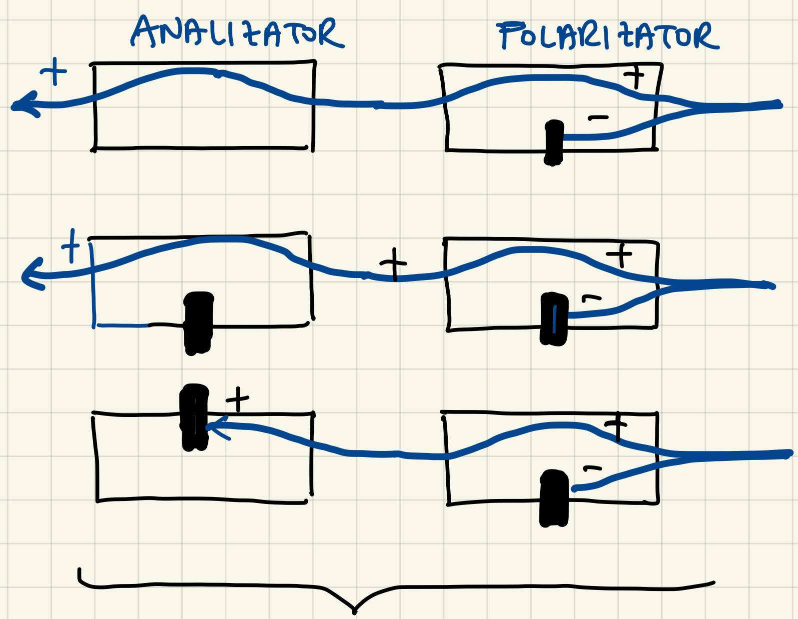
Polarizator (oz. filter):



a)

b)

c)



v vseh teh S&G je kvantizacija os ista (z)!

Opišimo to dogajanje z verjetnostnimi amplitudami:

$$\chi(d, p)$$

detektirano (detected) — pripravljeno (prepared) stanje, pošiljamo v SG

Verjetnost za detekcijo $= |\chi(d,p)|^2$

slika b) in c): $p = \pm z, \quad d = \pm z$

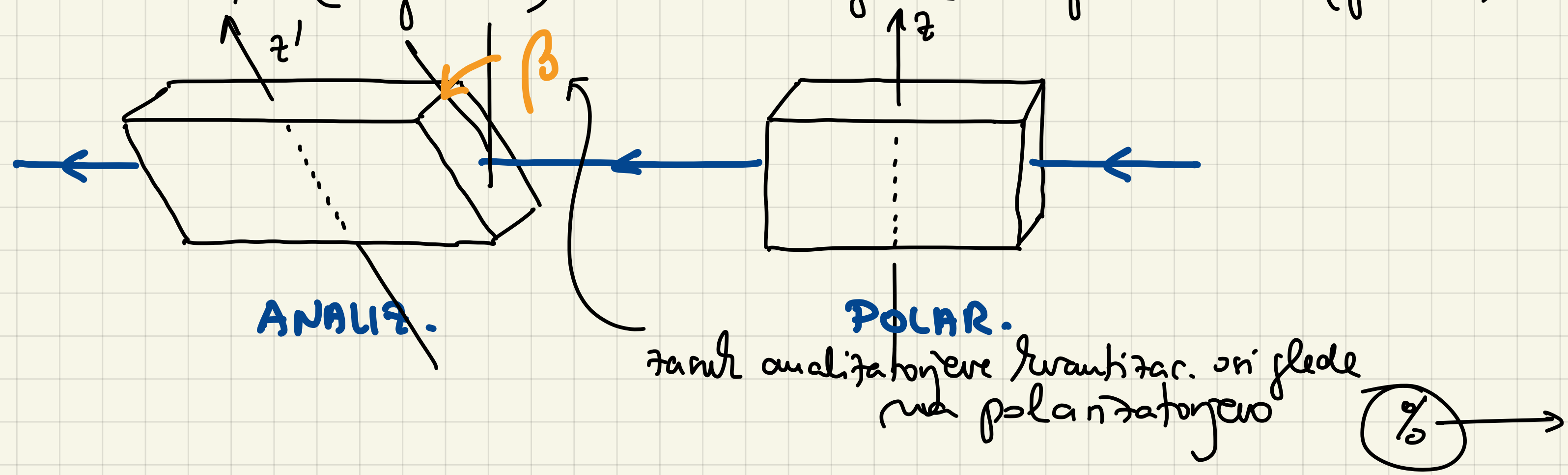
$$|\chi(+z,+z)|^2 = 1$$
$$|\chi(-z,+z)|^2 = 0$$

Podobno (zrcalna slika):

$$|\chi(+z,-z)|^2 = 0$$
$$|\chi(-z,-z)|^2 = 1$$

ni presenečenj

Kaj pa, če analizator (drugi SG) zasukamo glede na polarizator (prvi SG):



Ko je $\beta \neq 0$, dobimo dve kvantizacijski osi (= odlikovani smeri) in pričakujemo

$$|\chi(+z',+z)|^2 \neq 1$$

in $$|\chi(-z',+z)|^2 \neq 0$$

→ zato ker "±" 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 vedno samo dve možnosti (in pričakujemo ohranitev verjetnosti):

$$|\chi(+z',+z)|^2 + |\chi(-z',+z)|^2 = 1$$

in $$|\chi(+z',-z)|^2 + |\chi(-z',-z)|^2 = 1$$

Zaradi periodičnosti v β ne ostane drugega kot

$$\boxed{\begin{aligned} |\chi(+z',+z)|^2 &= |\chi(-z',-z)|^2 = \cos^2\frac{\beta}{2} \\ |\chi(-z',+z)|^2 &= |\chi(+z',-z)|^2 = \sin^2\frac{\beta}{2} \end{aligned}}$$

Zgled

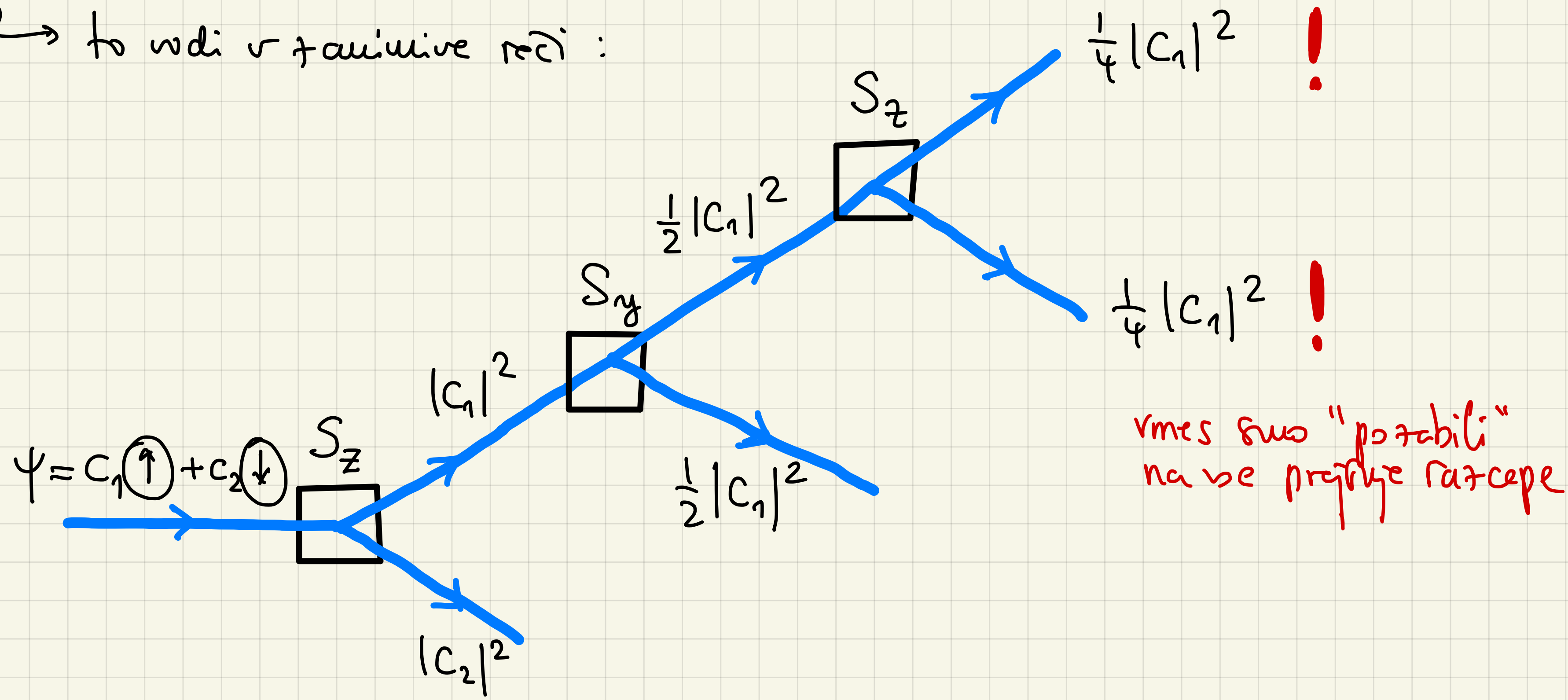
a) z' zasukana za $180°$ glede na z, polarizator pripravi atome v stanju s spinom "dol" vzdolž z. Torej

$$|\chi(-z',-z)|^2 = \cos^2\frac{\pi}{2} = 0 \quad , \quad |\chi(+z',-z)|^2 = \sin^2\frac{\pi}{2} = 1$$

b) z' zasukan za $90°$ glede na z, polarizator pripravi atome s spinom "gor" v z:

$$|\chi(+z',+z)|^2 = \cos^2\frac{\pi}{4} = \frac{1}{2} \quad , \quad |\chi(-z',+z)|^2 = \sin^2\frac{\pi}{4} = \frac{1}{2}$$

→ to vodi v zanimive reči:



Seštevanje vrtilnih količin

* enoelektronski atom ima dve vrsti VK — eno, ki ustreza orbitalnemu gibanju ("kroženje")
  — elektronski spin = spinska VK
* vsaki ustreza svoj magnetni moment in svoja interakcija z mag. poljem
* Stern-Gerlach: ugodno $l=0$, da vidimo samo efekt spina $s=1/2$

$\leadsto$ splošnejše rezultate dobimo, če znamo sešteti $\vec{L}$ in $\vec{S}$:

$$\boxed{\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}}$$

celotna VK
(total ang. momentum)

tirna (l, m_l) spinska $(s=1/2, m_s)$

seštevanje vektorjev: $\big|\,|\vec{L}| - |\vec{S}|\,\big| \leq |\vec{J}| \leq |\vec{L}| + |\vec{S}|$

Tudi za $\vec{J}$ bi radi imeli kvantizirane vrednosti in ustrezna kvantna števila, tako da bo

$$\boxed{\begin{aligned} |\vec{J}|^2 &= \hbar^2 j(j+1) \\ \text{in} \quad J_z &= \hbar m_j \end{aligned}}$$

j = KŠ celotne VK
$|m_j| \leq j$ ($2j+1$ vrednosti)

za tretje komponente je očitno:

vedno celo št. vedno le $\pm 1/2$

$$J_z = L_z + S_z \quad \Rightarrow \quad \underline{m_j = m_l + m_s}$$

vedno polštevilski ($\pm 1/2, \pm 3/2, \ldots$)

Dovoljene vrednosti j pa se spreminjajo z l.

Lažji primer: $\underline{l=0}$ $\Rightarrow$ $\vec{L}$ ne prispeva k $\vec{J}$, zato $\vec{J}=\vec{S}$

$\Rightarrow$ $\boxed{j = 1/2,\ m_j = \pm 1/2 \text{ za katero koli stanje z } l=0}$

$\underline{l \neq 0}$: ker $s=1/2$ (vedno), je lahko le

$$\boxed{j = l \pm 1/2 \quad \text{za katero koli stanje z } l \neq 0}$$

slike $\longrightarrow$

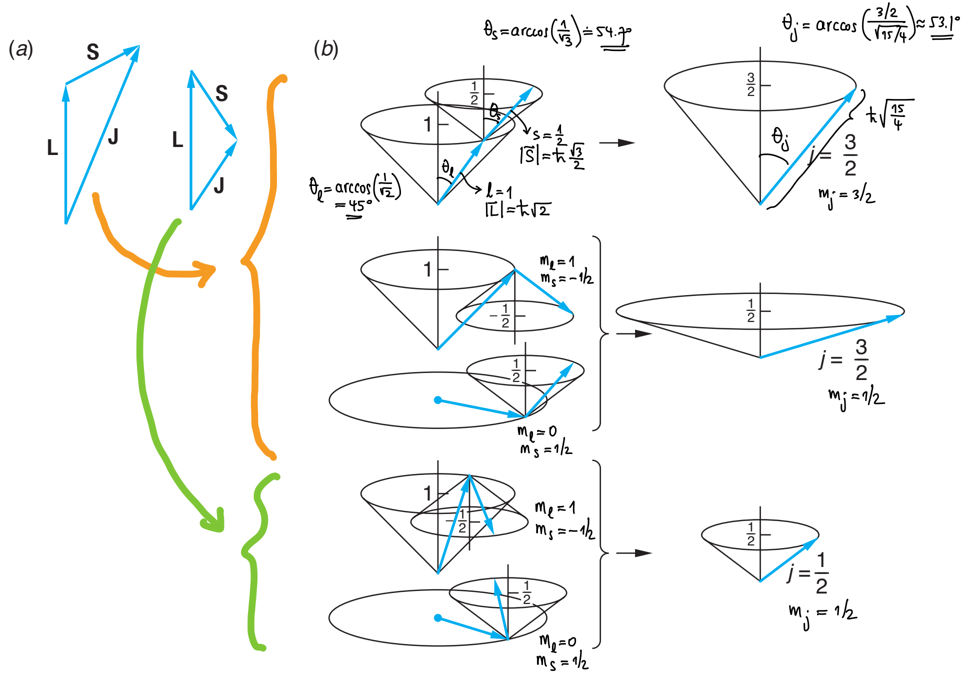


FIGURE 7-16 (*a*) Simplified vector model illustrating the addition of orbital and spin angular momenta. Case shown is for $\ell = 1$ and $s = \frac{1}{2}$. There are two possible values of the quantum number for the total angular momentum: $j = \ell + s = \frac{3}{2}$ and $j = \ell - s = \frac{1}{2}$. (*b*) Vector addition of the orbital and spin angular momenta, also for the case $\ell = 1$ and $s = \frac{1}{2}$. According to the uncertainty principle, the vectors can lie anywhere on the cones corresponding to the definite values of their *z* components. Note in the middle sketch that there are two ways of forming the states with $j = \frac{3}{2}$, $m_j = \frac{1}{2}$ and $j = \frac{1}{2}$, $m_j = \frac{1}{2}$.

Kaj to pomeni za organizacijo energijskih nivojev?

Kvantna števila: n, l, m_l, m_s $(s = 1/2)$ $\rightarrow \psi_{n l m_l m_s}$

ali: n, l, j, m_j $\rightarrow \psi_{n l j m_j}$

	$l=0$ (S)	$l=1$ (P)		$l=2$ (D)	
	$j=1/2$	$j=1/2$	$j=3/2$	$j=3/2$	$j=5/2$
E_3, $n=3$	$3S_{1/2}$ (2)	$3P_{1/2}$ (2)	$3P_{3/2}$ (4)	$3D_{3/2}$ (4)	$3D_{5/2}$ (6)
E_2, $n=2$	$2S_{1/2}$ (2)	$2P_{1/2}$ (2)	$2P_{3/2}$ (4)		
E_1, $n=1$	$1S_{1/2}$ (2 stanji) $\uparrow\downarrow$				

↑ itd.

deg. $2n^2$ ✓

$m_j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2$

$n = 1, 2, \ldots$

$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$

$j = l \pm 1/2$ za $l \neq 0$ (sicer $j = 1/2$)

$|m_j| \leq j$

t.i. Spektroskopske oznake:

$$n\,{}^{2s+1}X_j$$

$2s+1 = 2$, ker $s = 1/2$, in to večinoma izpuščamo

n: glavno KŠ

j: KŠ celotne VK

X: S, P, D, F, … glede na $l = 0, 1, 2, \ldots$

Seštevanje poljubnih VK

* $\max. m_j = j$, $\max. m_\ell = \ell$, $\max. m_s = s$
* trikotniška neenakost: $\underbrace{\left| |\vec{L}| - |\vec{S}| \right| \leq |\vec{J}|}_{*} \leq |\vec{L}| + |\vec{S}|$
* kvadriramo $*$:

$$|\vec{J}|^2 \geq \left(|\vec{L}| - |\vec{S}| \right)^2$$

$$\hbar^2 j(j+1) \geq \left(\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} - \hbar\sqrt{s(s+1)} \right)^2$$

$$j(j+1) \geq \left(\sqrt{\ell(\ell+1)} - \sqrt{3/4} \right)^2$$

$$j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \geq -\sqrt{3\ell(\ell+1)}$$

Izpolnjeno samo za $j = \ell \pm 1/2$ za poljuben ℓ

* Če seštevamo poljubni $\vec{L}_1$ in $\vec{L}_2$ (to sta katerikoli VK, spinski/tirni/celotni)
  ... to sta le izbrani oznaki, ki ustrezata tirni VK

Projekcije niso problematične:

$$L_z = L_{1z} + L_{2z} = \hbar(m_1 + m_2) = \hbar m \quad \checkmark$$

Velikosti pa so:

$$\vec{L}^2 = (\vec{L}_1 + \vec{L}_2)^2 = \vec{L}_1^2 + \vec{L}_2^2 + 2\vec{L}_1 \cdot \vec{L}_2$$

$$= \vec{L}_1^2 + \vec{L}_2^2 + 2\left(L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y} + L_{1z}L_{2z} \right)$$

vse te komponente so popolnoma nedoločene! (azimutalni kot)

$\Rightarrow$ Lastne vrednosti $\vec{L}^2$ so dane s celim številom l in so $\hbar^2 l(l+1)$, ustrezna lastna stanja pa ne morejo biti lastna stanja L_1^2 in L_2^2, temveč njihove linearne kombinacije

Vedno velja trikotniška neenakost

$$\left.\begin{array}{l} |l_1 - l_2| \le l \le l_1 + l_2 \\ \text{in} \quad m_1 + m_2 = m \end{array}\right\} \circledast$$

$\Rightarrow$ stanje z danima l, m je linearna kombinacija stanj l_1, m_1 in l_2, m_2, tako da je izpolnjeno $\circledast$:

Intermezzo (Diracova bra-ket notacija)

$$\psi_n = \underbrace{|n\rangle}_{\text{“ket”}}$$

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dx = \underbrace{\langle m|}_{\text{“bra”}}\underbrace{|n\rangle}_{\text{“ket”}}$$

$$\underbrace{|lm\rangle}_{\text{ali } \psi_{lm}} = \sum_{\substack{m_1+m_2=m \\ + \text{ trikot. neen.}}} C^{lm}_{l_1 m_1 l_2 m_2} \underbrace{|l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle}_{\text{ali } |l_1 m_1, l_2 m_2\rangle \text{ ali } \psi_{l_1 m_1, l_2 m_2}}$$

Clebsch-Gordanovi koeficienti

upr.
$$|\underset{l\,m}{1\,0}\rangle = C^{10}_{1-121} |1-1, 21\rangle + C^{10}_{1020} |10, 20\rangle + C^{10}_{112-1} |11, 2-1\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{3}{10}} |1-1, 21\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |10, 20\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |11, 2-1\rangle$$

Seveda $\left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{2}{5}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^2 = 1$ ✓

nova "poštevanka" :)

36. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

ℓ_1 ℓ_2 (koeficienti)^2 !

Note: A square-root sign is to be understood over *every* coefficient, *e.g.*, for −8/15 read $-\sqrt{8/15}$.

Notation:

m_1	m_2	J M	J M	...
m_1	m_2	Coefficients		
m_1	m_2			
.	.			

saj je vse tu razloženo...

1/2×1/2 (ℓ, m, m_1 m_2)

m_1	m_2	$J=1$, $M=+1$
+1/2	+1/2	1

m_1	m_2	$J=1$, $M=0$	$J=0$, $M=0$
+1/2	−1/2	1/2	1/2
−1/2	+1/2	1/2	−1/2

m_1	m_2	$J=1$, $M=-1$
−1/2	−1/2	1

1×1/2 (ℓ_1 ℓ_2)

m_1	m_2	$J=3/2$, $M=+3/2$
+1	+1/2	1

m_1	m_2	$J=3/2$, $M=+1/2$	$J=1/2$, $M=+1/2$
+1	−1/2	1/3	2/3
0	+1/2	2/3	−1/3

m_1	m_2	$J=3/2$, $M=-1/2$	$J=1/2$, $M=-1/2$
0	−1/2	2/3	1/3
−1	+1/2	1/3	−2/3

m_1	m_2	$J=3/2$, $M=-3/2$
−1	−1/2	1

zgled na prejšnji strani

2×1

m_1	m_2	$J=3$, $M=+3$
+2	+1	1

m_1	m_2	$J=3$, $M=+2$	$J=2$, $M=+2$
+2	0	1/3	2/3
+1	+1	2/3	−1/3

m_1	m_2	$J=3$, $M=+1$	$J=2$, $M=+1$	$J=1$, $M=+1$
+2	−1	1/15	1/3	3/5
+1	0	8/15	1/6	−3/10
0	+1	2/5	−1/2	1/10

m_1	m_2	$J=3$, $M=0$	$J=2$, $M=0$	$J=1$, $M=0$
+1	−1	1/5	1/2	3/10
0	0	3/5	0	−2/5
−1	+1	1/5	−1/2	3/10

(ℓ, m, koef., m_1 m_2)

m_1	m_2	$J=3$, $M=-1$	$J=2$, $M=-1$	$J=1$, $M=-1$
0	−1	2/5	1/2	1/10
−1	0	8/15	−1/6	−3/10
−2	+1	1/15	−1/3	3/5

m_1	m_2	$J=3$, $M=-2$	$J=2$, $M=-2$
−1	−1	2/3	1/3
−2	0	1/3	−2/3

m_1	m_2	$J=3$, $M=-3$
−2	−1	1

1×1

m_1	m_2	$J=2$, $M=+2$
+1	+1	1

m_1	m_2	$J=2$, $M=+1$	$J=1$, $M=+1$
+1	0	1/2	1/2
0	+1	1/2	−1/2

m_1	m_2	$J=2$, $M=0$	$J=1$, $M=0$	$J=0$, $M=0$
+1	−1	1/6	1/2	1/3
0	0	2/3	0	−1/3
−1	+1	1/6	−1/2	1/3

m_1	m_2	$J=2$, $M=-1$	$J=1$, $M=-1$
0	−1	1/2	1/2
−1	0	1/2	−1/2

m_1	m_2	$J=2$, $M=-2$
−1	−1	1

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\phi}$$

$$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$$

$$d^{\ell}_{m,0} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\, Y_\ell^m\, e^{-im\phi}$$

2×1/2

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=+5/2$
+2	+1/2	1

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=+3/2$	$J=3/2$, $M=+3/2$
+2	−1/2	1/5	4/5
+1	+1/2	4/5	−1/5

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=+1/2$	$J=3/2$, $M=+1/2$
+1	−1/2	2/5	3/5
0	+1/2	3/5	−2/5

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=-1/2$	$J=3/2$, $M=-1/2$
0	−1/2	3/5	2/5
−1	+1/2	2/5	−3/5

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=-3/2$	$J=3/2$, $M=-3/2$
−1	−1/2	4/5	1/5
−2	+1/2	1/5	−4/5

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=-5/2$
−2	−1/2	1

3/2×1/2

m_1	m_2	$J=2$, $M=+2$
+3/2	+1/2	1

m_1	m_2	$J=2$, $M=+1$	$J=1$, $M=+1$
+3/2	−1/2	1/4	3/4
+1/2	+1/2	3/4	−1/4

m_1	m_2	$J=2$, $M=0$	$J=1$, $M=0$
+1/2	−1/2	1/2	1/2
−1/2	+1/2	1/2	−1/2

m_1	m_2	$J=2$, $M=-1$	$J=1$, $M=-1$
−1/2	−1/2	3/4	1/4
−3/2	+1/2	1/4	−3/4

m_1	m_2	$J=2$, $M=-2$
−3/2	−1/2	1

3/2×1

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=+5/2$
+3/2	+1	1

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=+3/2$	$J=3/2$, $M=+3/2$
+3/2	0	2/5	3/5
+1/2	+1	3/5	−2/5

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=+1/2$	$J=3/2$, $M=+1/2$	$J=1/2$, $M=+1/2$
+3/2	−1	1/10	2/5	1/2
+1/2	0	3/5	1/15	−1/3
−1/2	+1	3/10	−8/15	1/6

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=-1/2$	$J=3/2$, $M=-1/2$	$J=1/2$, $M=-1/2$
+1/2	−1	3/10	8/15	1/6
−1/2	0	3/5	−1/15	−1/3
−3/2	+1	1/10	−2/5	1/2

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=-3/2$	$J=3/2$, $M=-3/2$
−1/2	−1	3/5	2/5
−3/2	0	2/5	−3/5

m_1	m_2	$J=5/2$, $M=-5/2$
−3/2	−1	1

pazi na faze (spremembe predznakov!)

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M\rangle = (-1)^{J-j_1-j_2}\langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 J M\rangle$$

$$d^{\,j}_{m',m} = (-1)^{m-m'} d^{\,j}_{m,m'} = d^{\,j}_{-m,-m'}$$

$$d^{\,1}_{0,0} = \cos\theta \qquad d^{\,1/2}_{1/2,1/2} = \cos\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,1/2}_{1/2,-1/2} = -\sin\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,1}_{1,1} = \frac{1+\cos\theta}{2} \qquad d^{\,1}_{1,0} = -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} \qquad d^{\,1}_{1,-1} = \frac{1-\cos\theta}{2}$$

3/2×3/2

m_1	m_2	$J=3$, $M=+3$
+3/2	+3/2	1

m_1	m_2	$J=3$, $M=+2$	$J=2$, $M=+2$
+3/2	+1/2	1/2	1/2
+1/2	+3/2	1/2	−1/2

m_1	m_2	$J=3$, $M=+1$	$J=2$, $M=+1$	$J=1$, $M=+1$
+3/2	−1/2	1/5	1/2	3/10
+1/2	+1/2	3/5	0	−2/5
−1/2	+3/2	1/5	−1/2	3/10

m_1	m_2	$J=3$, $M=0$	$J=2$, $M=0$	$J=1$, $M=0$	$J=0$, $M=0$
+3/2	−3/2	1/20	1/4	9/20	1/4
+1/2	−1/2	9/20	1/4	−1/20	−1/4
−1/2	+1/2	9/20	−1/4	−1/20	1/4
−3/2	+3/2	1/20	−1/4	9/20	−1/4

m_1	m_2	$J=3$, $M=-1$	$J=2$, $M=-1$	$J=1$, $M=-1$
+1/2	−3/2	1/5	1/2	3/10
−1/2	−1/2	3/5	0	−2/5
−3/2	+1/2	1/5	−1/2	3/10

m_1	m_2	$J=3$, $M=-2$	$J=2$, $M=-2$
−1/2	−3/2	1/2	1/2
−3/2	−1/2	1/2	−1/2

m_1	m_2	$J=3$, $M=-3$
−3/2	−3/2	1

2×3/2

m_1	m_2	$J=7/2$, $M=+7/2$
+2	+3/2	1

m_1	m_2	$J=7/2$, $M=+5/2$	$J=5/2$, $M=+5/2$
+2	+1/2	3/7	4/7
+1	+3/2	4/7	−3/7

m_1	m_2	$J=7/2$, $M=+3/2$	$J=5/2$, $M=+3/2$	$J=3/2$, $M=+3/2$
+2	−1/2	1/7	16/35	2/5
+1	+1/2	4/7	1/35	−2/5
0	+3/2	2/7	−18/35	1/5

m_1	m_2	$J=7/2$, $M=+1/2$	$J=5/2$, $M=+1/2$	$J=3/2$, $M=+1/2$	$J=1/2$, $M=+1/2$
+2	−3/2	1/35	6/35	2/5	2/5
+1	−1/2	12/35	5/14	0	−3/10
0	+1/2	18/35	−3/35	−1/5	1/5
−1	+3/2	4/35	−27/70	2/5	−1/10

m_1	m_2	$J=7/2$, $M=-1/2$	$J=5/2$, $M=-1/2$	$J=3/2$, $M=-1/2$	$J=1/2$, $M=-1/2$
+1	−3/2	4/35	27/70	2/5	1/10
0	−1/2	18/35	3/35	−1/5	−1/5
−1	+1/2	12/35	−5/14	0	3/10
−2	+3/2	1/35	−6/35	2/5	−2/5

m_1	m_2	$J=7/2$, $M=-3/2$	$J=5/2$, $M=-3/2$	$J=3/2$, $M=-3/2$
0	−3/2	2/7	18/35	1/5
−1	−1/2	4/7	−1/35	−2/5
−2	+1/2	1/7	−16/35	2/5

m_1	m_2	$J=7/2$, $M=-5/2$	$J=5/2$, $M=-5/2$
−1	−3/2	4/7	3/7
−2	−1/2	3/7	−4/7

m_1	m_2	$J=7/2$, $M=-7/2$
−2	−3/2	1

2×2

m_1	m_2	$J=4$, $M=+4$
+2	+2	1

m_1	m_2	$J=4$, $M=+3$	$J=3$, $M=+3$
+2	+1	1/2	1/2
+1	+2	1/2	−1/2

m_1	m_2	$J=4$, $M=+2$	$J=3$, $M=+2$	$J=2$, $M=+2$
+2	0	3/14	1/2	2/7
+1	+1	4/7	0	−3/7
0	+2	3/14	−1/2	2/7

m_1	m_2	$J=4$, $M=+1$	$J=3$, $M=+1$	$J=2$, $M=+1$	$J=1$, $M=+1$
+2	−1	1/14	3/10	3/7	1/5
+1	0	3/7	1/5	−1/14	−3/10
0	+1	3/7	−1/5	−1/14	3/10
−1	+2	1/14	−3/10	3/7	−1/5

m_1	m_2	$J=4$, $M=0$	$J=3$, $M=0$	$J=2$, $M=0$	$J=1$, $M=0$	$J=0$, $M=0$
+2	−2	1/70	1/10	2/7	2/5	1/5
+1	−1	8/35	2/5	1/14	−1/10	−1/5
0	0	18/35	0	−2/7	0	1/5
−1	+1	8/35	−2/5	1/14	1/10	−1/5
−2	+2	1/70	−1/10	2/7	−2/5	1/5

m_1	m_2	$J=4$, $M=-1$	$J=3$, $M=-1$	$J=2$, $M=-1$	$J=1$, $M=-1$
+1	−2	1/14	3/10	3/7	1/5
0	−1	3/7	1/5	−1/14	−3/10
−1	0	3/7	−1/5	−1/14	3/10
−2	+1	1/14	−3/10	3/7	−1/5

m_1	m_2	$J=4$, $M=-2$	$J=3$, $M=-2$	$J=2$, $M=-2$
0	−2	3/14	1/2	2/7
−1	−1	4/7	0	−3/7
−2	0	3/14	−1/2	2/7

m_1	m_2	$J=4$, $M=-3$	$J=3$, $M=-3$
−1	−2	1/2	1/2
−2	−1	1/2	−1/2

m_1	m_2	$J=4$, $M=-4$
−2	−2	1

$$d^{\,3/2}_{3/2,3/2} = \frac{1+\cos\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,1/2} = -\sqrt{3}\,\frac{1+\cos\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,-1/2} = \sqrt{3}\,\frac{1-\cos\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,-3/2} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{1/2,1/2} = \frac{3\cos\theta-1}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{1/2,-1/2} = -\frac{3\cos\theta+1}{2}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,2}_{2,2} = \left(\frac{1+\cos\theta}{2}\right)^2$$

$$d^{\,2}_{2,1} = -\frac{1+\cos\theta}{2}\sin\theta$$

$$d^{\,2}_{2,0} = \frac{\sqrt{6}}{4}\sin^2\theta$$

$$d^{\,2}_{2,-1} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\sin\theta$$

$$d^{\,2}_{2,-2} = \left(\frac{1-\cos\theta}{2}\right)^2$$

$$d^{\,2}_{1,1} = \frac{1+\cos\theta}{2}(2\cos\theta-1)$$

$$d^{\,2}_{1,0} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta\cos\theta$$

$$d^{\,2}_{1,-1} = \frac{1-\cos\theta}{2}(2\cos\theta+1)$$

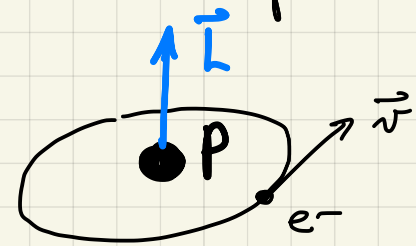
$$d^{\,2}_{0,0} = \left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)$$

Figure 36.1: The sign convention is that of Wigner (*Group Theory*, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (*The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (*Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York, 1957), and Cohen (*Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients*, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974).

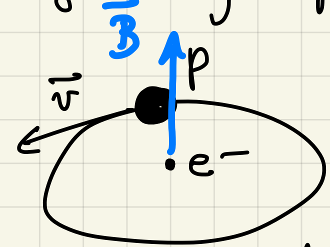
Sklopitev spin-tir (spin-orbit coupling/ interaction)

Zaradi tega efekta stanja z istimi n in istimi l, toda različnimi j, dobijo malenkost drugačne energije (= delno odpravimo degeneracijo po n).

Osnovna ideja z Bohrove slike:



v sistemu protona ("LAB")



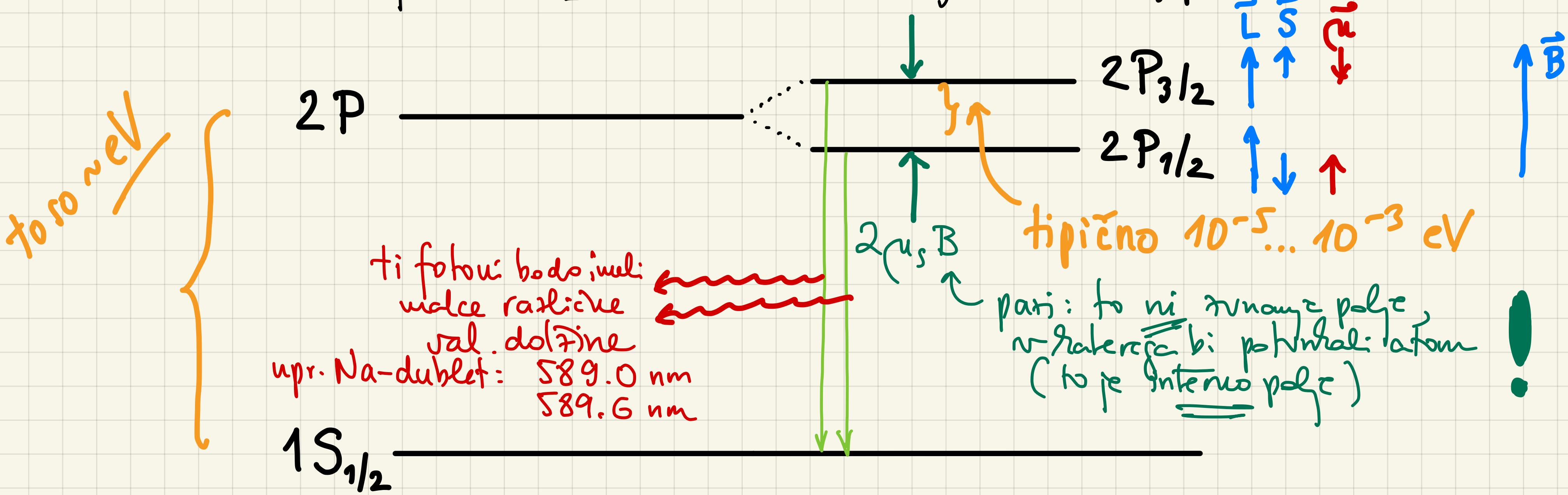
v sistemu elektrona proton ("krožna zanka") generira neki $\vec{B}$

Spin e^- ⇒ spinski mag. moment
⇒ ta interagira z mag. poljem $\vec{B}$!

Interakcijska energija je $-\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = -\mu_z B$

(največ, ko sta $\vec{\mu}$ in $\vec{B}$ antiparalelna)

Energija stanja $2P_{3/2}$ postane nekoliko višja kot energija $2P_{1/2}$:



Izpeljava prispevka $\vec{L}\cdot\vec{S}$ k energiji

$$\vec{B}_{interno} = -\frac{\vec{v}\times\vec{E}}{c^2} = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{r}\times\vec{v}}{c^2 r^3} = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m_e\vec{r}\times\vec{v}}{m_e c^2 r^3}$$

$= \vec{L}$

0.1 do 1T!

iz formul za Lorentzevo transf. el. in mag. polja

$$\vec{E} = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{r}}{r^3}$$

$$\underbrace{E_{ls}}_{\text{"spin-tir" (nista KŠ)}} = -\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}_{int} = \left(+g_s\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}\right)\cdot\left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 m_e c^2 r^3}\vec{L}\right)$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}, \quad g_s = 2$$

$$= \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{L}\cdot\vec{S}}{m_e^2 c^2 r^3}$$

še vedno klasični rezultat, osnovan na ideji, da e^- "kroži" in gledamo B_{int} od protona

* To moramo transformirati nazaj v sistem protona ($\approx$ LAB) in rigorozna izpeljava da je faktor 1/2 ("Thomasova polovička")
  $\rightsquigarrow$ približen argument: Strnad III.

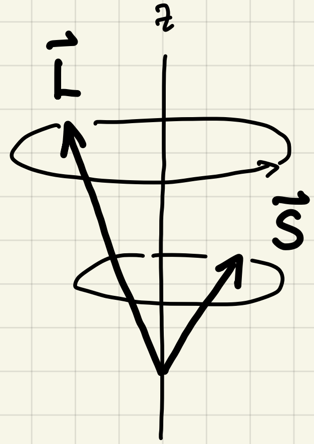
* Končni rezultat:

$$\boxed{E_{ls} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{L}\cdot\vec{S}}{2m_e^2c^2r^3}}$$

... izpeljali smo $E_{ls} \propto \dfrac{\vec{L}\cdot\vec{S}}{r^3}$

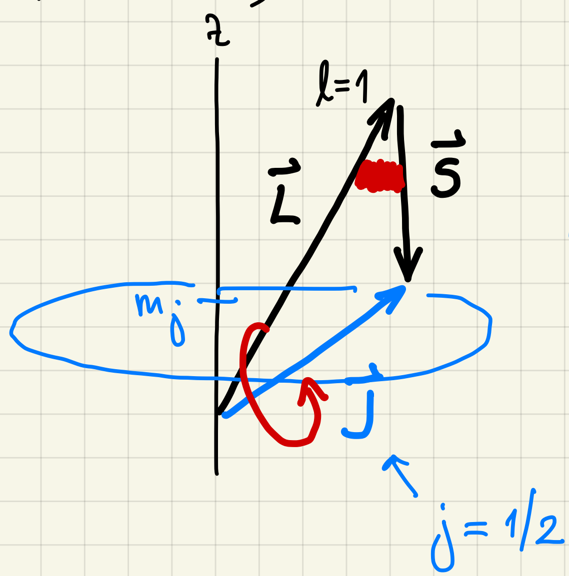
* interakcija spin-tir prinese težave v "knjigovodstvo" stanj

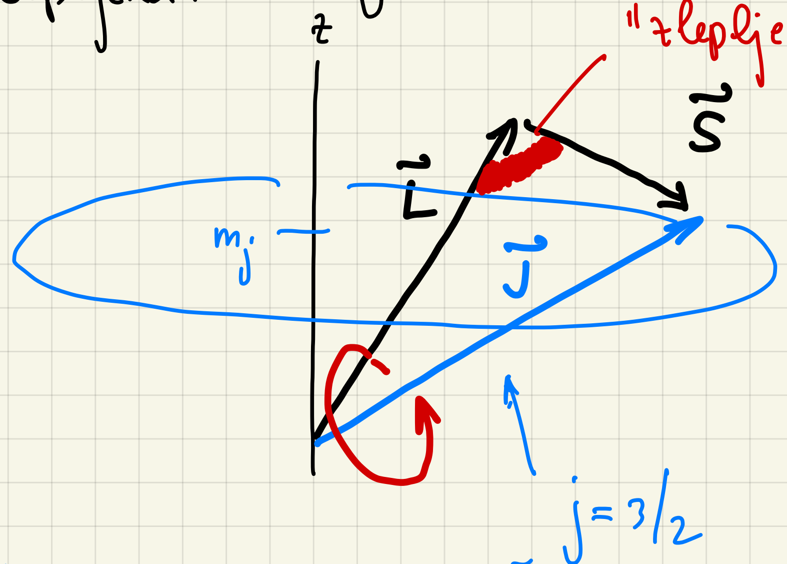
$\psi_{nlm_lm_s}$ ... KŠ m_l in m_s sta dobri za opis stacionarnih stanj, dokler lahko neodvisno določimo ustrezne lastne vrednosti operatorjev $\hat{L}_z$ in $\hat{S}_z$.



→ čista razklopljena, vsak zase precesirata okrog osi z ⟹ opis z m_l in m_s dober

* interakcija spin-tir implicira fiksno orientacijo $\vec{L}$ glede na $\vec{S}$, ker je $\vec{L}\cdot\vec{S} \propto E_{ls}$. $\vec{L}$ in $\vec{S}$ torej ne moreta več poljubno precesirati, ker sta sklopljena:





⟹ dobri KŠ sta j in m_j ! ⟹ ψ_{nljm_j}

Zaradi sklopitve spin-tir se sicer degenerirana stanja ψ_{nljm_j} razcepijo, tako da imajo atomi z istim n in l možnost različne energije za različne j.

$\rightsquigarrow$ govorimo o FINI STRUKTURI (atoma / spektra / spektralnih črt ...) (angl. Fine structure)

Primerna brezdim. količina, ki meri relativno velikost takšnih efektov glede na vodilni red, je

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} \approx 1/137$$

KONSTANTA FINE STRUKTURE (fine structure constant), karakteristična za EM interakcijo

(tudi α_{em}, da se loči od α_s)

$\rightsquigarrow$ V procesih tega reda nastopi $\alpha^2 \approx 10^{-4}$
zato tudi takoj ocenimo, kolikšni bodo razcepi nivojev:

nivoji so narazen $\approx$ 0.1 do nekaj eV $\Rightarrow$ fini razcepi bodo $\approx 10^{-4}$ 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}: $\leftarrow$ ortodoksno

$$\hat{E}_{ls} = Z\alpha \frac{\hbar}{2m_e^2 c} \frac{\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}}{r^3} = Z\alpha \frac{\hbar}{4m_e^2 c} \frac{\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2}{r^3}$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad \vec{J}^2 = (\vec{L}+\vec{S})^2 = \vec{L}^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} + \vec{S}^2$$

$$\rightarrow \quad \vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right)$$

Pričakovana vrednost $\hat{E}_{ls}$ v stanju ψ_{nljm_j}:

$$\langle E_{ls}\rangle = \int \psi^*_{nljm_j} \hat{E}_{ls} \psi_{nljm_j} \, dV$$

$$= Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m_e^2 c} \left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

$s(s+1)$, $s = 1/2$

nekoč že zapisali: $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2}{a^3 n^3 l(l+1)(2l+1)}$

integrirali smo $\int_0^\infty R_{nl}^2(r) \frac{1}{r^3} r^2 dr$

Izrazimo z α:

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \left(\frac{Z\alpha m_e c^2}{n\hbar} \right)^3 \frac{2}{l(l+1)(2l+1)}$$

$$\Rightarrow \quad E_{ls} = Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m_e^2 c} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left(\frac{Z\alpha m_e c^2}{n\hbar} \right)^3 \frac{2}{l(l+1)(2l+1)}$$

$$= \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \, \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1)(2l+1)}$$

$$E_0 = \frac{\alpha^2}{2} m_e c^2$$

Rydberg

$$\rightarrow \quad \boxed{\langle E_{ls}\rangle = \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} E_0 \, \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1)(2l+1)}}$$

! $\approx 10^{-4}$ krat manj glede na $O(E_0)$

Zgled stanja 2P, torej $n=2$, $l=1$

energijska razlika zaradi sklopitve $\vec{L}\cdot\vec{S}$ $\left(j=l-1/2,\ j=l+1/2 \right)$:

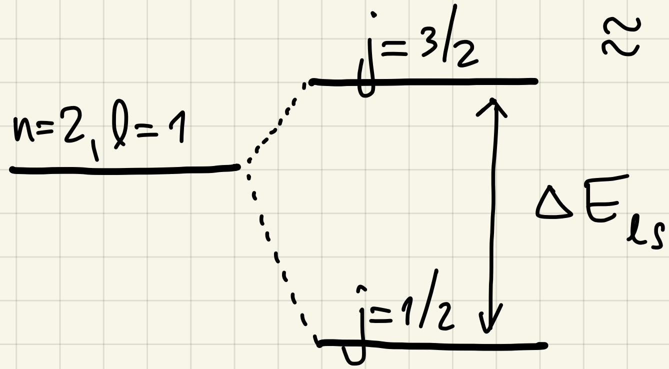
$$j=1/2:\quad \langle E_{ls} \rangle = \frac{Z^4\alpha^2}{8} E_0 \, \frac{\cancel{\frac{3}{4}} - 2 - \cancel{\frac{3}{4}}}{1\cdot 2\cdot 3} = -\frac{Z^4\alpha^2 E_0}{24}$$

$$j=3/2:\quad \langle E_{ls} \rangle = \frac{Z^4\alpha^2}{8} E_0 \, \frac{\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4}}{1\cdot 2\cdot 3} = \frac{Z^4\alpha^2 E_0}{48}$$

Za H atom $(Z=1)$:

$$\Delta E_{ls} = \alpha^2 E_0 \left(\frac{1}{48} - \left(-\frac{1}{24} \right) \right) = \frac{\alpha^2 E_0}{16}$$

$$\approx 13.6\,\mathrm{eV}/16/(137)^2 \approx \underline{\underline{4.5\cdot 10^{-5}\,\mathrm{eV}}}$$



Relativistični popravek h kinetični energiji

Namesto $T = p^2/2m$ bi morali delati z relativističnim izrazom, če želimo isto natančnost kot ob upoštevanju sklopitve ls:

$$T = \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2} - m_e c^2 = m_e c^2 \left(1 + p^2/m_e^2 c^2\right)^{1/2} - m_e c^2$$

$$= m_e c^2 \left(\cancel{1} + \frac{p^2}{2 m_e^2 c^2} - \frac{1}{8} \underline{\frac{p^4}{m_e^4 c^4}} + \ldots - \cancel{1}\right)$$

$$= \frac{p^2}{2 m_e} - \underbrace{\frac{p^4}{8 m_e^3 c^2}}_{\text{nov člen, } T_{rel}} + \ldots$$

$$\langle T_{rel} \rangle = - \frac{Z^4 \alpha^4}{n^3} m_e c^2 \left(\frac{1}{2l+1} - \frac{3}{8n} \right)$$

v stanju ψ_{nljm_j}

Skupni premik nivojev ob upoštevanju fine strukture (= obeh relativist. popravkov)

$$\langle E_{ls} \rangle + \langle T_{rel} \rangle = \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1)(2l+1)} - \frac{2}{2l+1} + \frac{3}{4n} \right]$$

$$= \ldots = - \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \left(\frac{2}{2j+1} - \frac{3}{4n} \right)$$

(velja za $l=0$ ali $l \neq 0$)

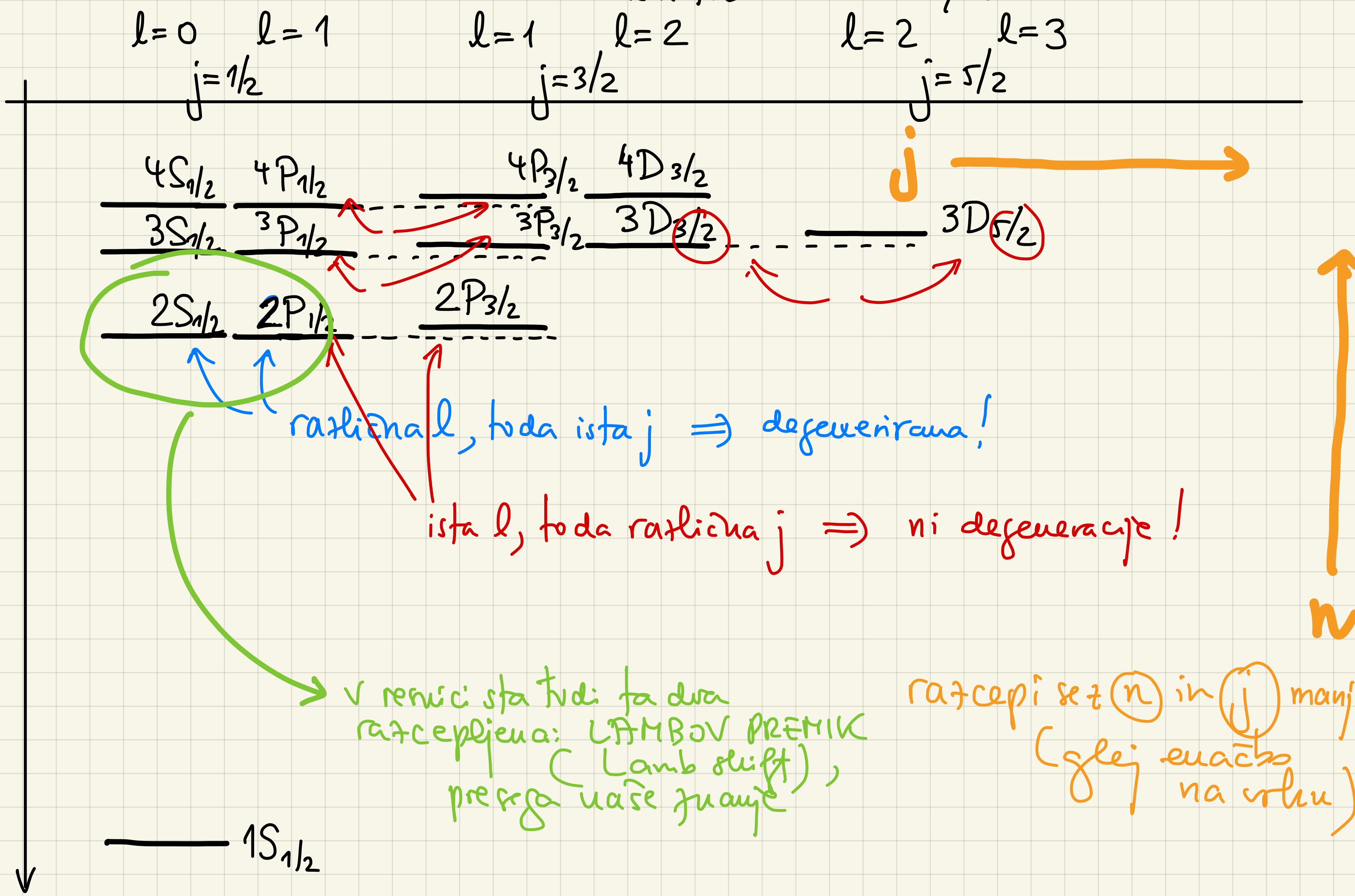
$\longrightarrow$

→ Za katero koli stanje (n, j) enoelektronskega atoma:

$$E_0 = \frac{\alpha^2}{2} m_e c^2$$

$$\boxed{E_{nj} = E_n - \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} E_0 \left(\frac{2}{2j+1} - \frac{3}{4n} \right)}$$

E_n: osnovna formula z degeneracijo pri danem n $= -E_0/n^2$



različna l, toda ista j ⇒ degenerirana!

ista l, toda različna j ⇒ ni degeneracije!

v resnici sta tudi ta dva razcepljena: LAMBOV PREMIK (Lamb shift), presega naše znanje

razcepi se z n in j manjšajo! (glej enačbo na vrhu)

Zeemanov pojav ← atom v mag. polju

Če damo atom v mag. polje, bo njegov $\vec{\mu}$ interagiral z $\vec{B}$:

$$E_{mag} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

$\vec{\mu}$ ima dva prispevka, od tirne in spinske VK:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = -\frac{\mu_B}{\hbar}\Big(\underset{\substack{\| \\ 1}}{g_l}\vec{L} + \underset{\substack{\| \\ 2}}{g_s}\vec{S}\Big) = -\frac{\mu_B}{\hbar}\left(\vec{L} + \mathbf{2}\vec{S}\right)$$

!

$$\langle E_{mag}\rangle = -\langle \mu_z\rangle B \quad , \quad \text{kvantizac. os} \parallel \vec{B}$$

pri $\vec{l}\vec{s}$ sklopitvi

Obravnavamo dva režima: 1) močno zun. polje, $B \gg B_{int.}$

2) šibko zun. polje, $B \ll B_{int.}$

... nasledujoč dalje

Zeemanov pojav ← atom v mag. polju

Če damo atom v mag. polje, bo njegov $\vec{\mu}$ interagiral z $\vec{B}$:

$$E_{mag} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

$\vec{\mu}$ ima dva prispevka, od tirne in spinske VK:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = -\frac{\mu_B}{\hbar}\left(\underset{\substack{\shortparallel \\ 1}}{g_l}\vec{L} + \underset{\substack{\shortparallel \\ 2}}{g_s}\vec{S}\right) = -\frac{\mu_B}{\hbar}\left(\vec{L} + \overset{!}{2}\vec{S}\right)$$

$$\langle E_{mag}\rangle = -\langle \mu_z\rangle B\,,$$ kvantizac. os $\parallel \vec{B}$

pri $\vec{L}\vec{S}$ sklopitvi

Obravnavamo dva režima: 1) močno zun. polje, $B \gg B_{int.}$

2) šibko zun. polje, $B \ll B_{int.}$

Močno polje (⇝ Paschen–Backov pojav)

* interakcijo spin-tir zanemarimo ⇒ vektorja $\vec{L}$ in $\vec{S}$ razklopljena in Larmorjevo precesirata okrog $\vec{B}$, relevantni projekciji VK sta (v stanju $\psi_{n l m_l m_s}$):

$$\langle L_z\rangle = \hbar m_l$$

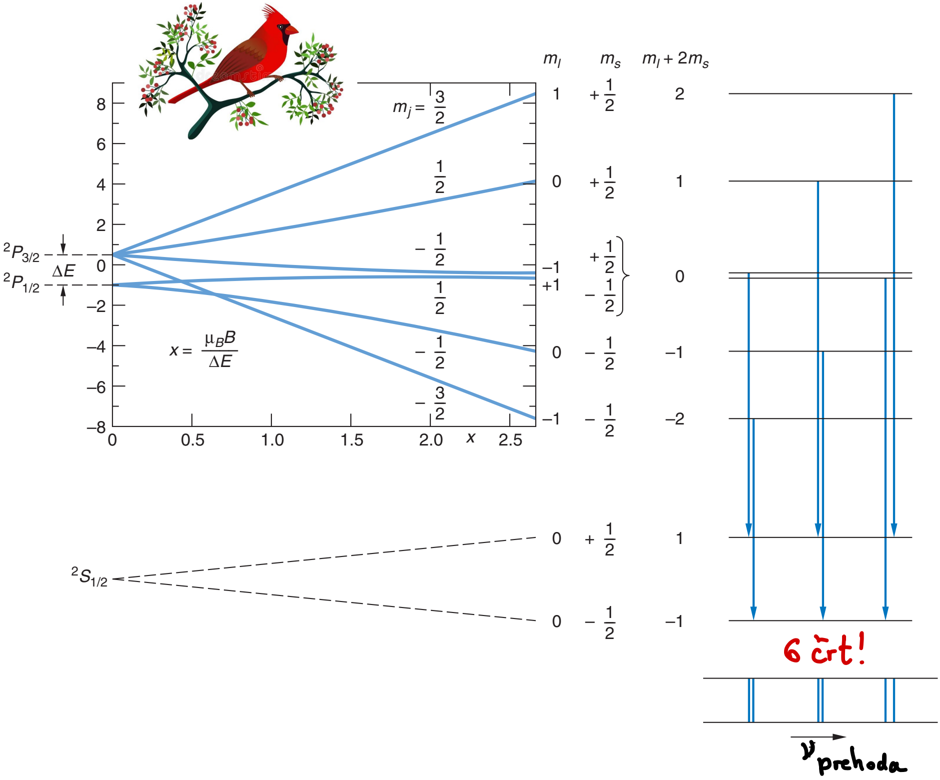
$$\langle S_z\rangle = \hbar m_s$$

in torej

$$\underline{\langle E_{mag}\rangle} = +\frac{\mu_B}{\hbar}\langle L_z + 2S_z\rangle = \underline{\mu_B B\,(m_l + 2m_s)}$$

Danima n in l ustreza $2\,(2l+1)$ magnetnih podstanj.

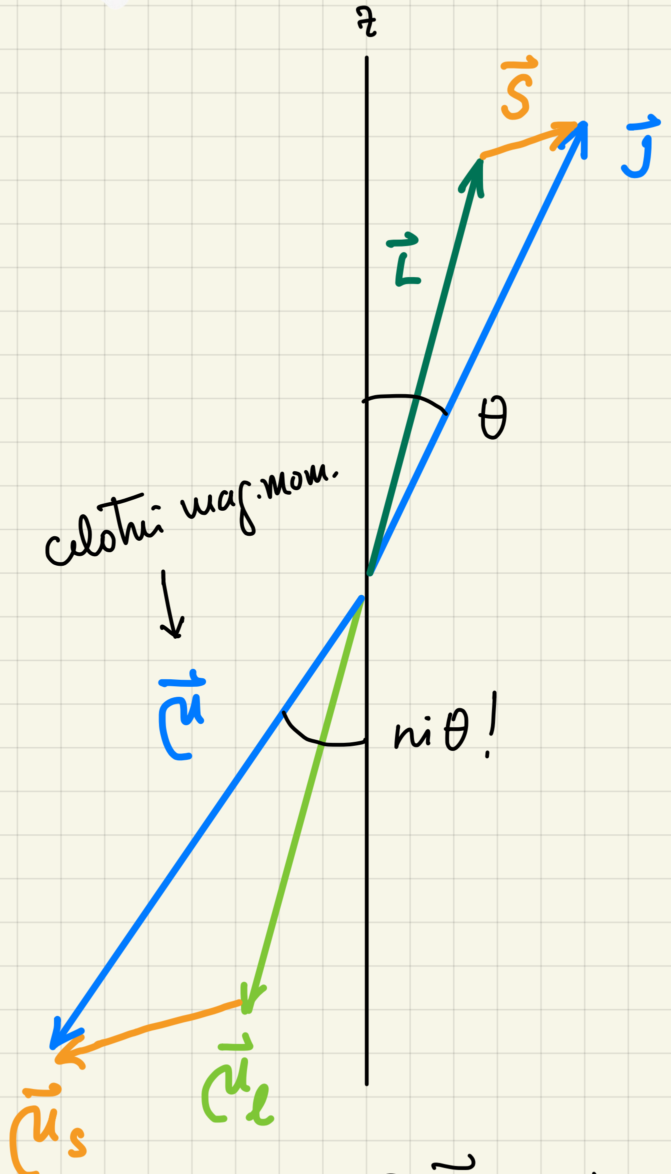
spin ↗ ↖ tirna VK, $|m_l| \le l$



m_l
m_s
$m_l + 2m_s$
$m_j = \frac{3}{2}$
$\frac{1}{2}$
$-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$
$-\frac{1}{2}$
$-\frac{3}{2}$
1 $+\frac{1}{2}$ 2
0 $+\frac{1}{2}$ 1
−1 $+\frac{1}{2}$
+1 $-\frac{1}{2}$ 0
0 $-\frac{1}{2}$ −1
−1 $-\frac{1}{2}$ −2
8
6
4
2
0
−2
−4
−6
−8
0
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
x
$^2P_{3/2}$
ΔE
$^2P_{1/2}$
$x = \frac{\mu_B B}{\Delta E}$
$^2S_{1/2}$
0 $+\frac{1}{2}$ 1
0 $-\frac{1}{2}$ −1
6 črt!
ν prehoda

ŠIBKO POLJE

(E_{ls} in E_{mag} primerljivi ali E_{mag} celo $\ll E_{ls}$)
→ dobra kš so j in m_j (ψ_{nljm_j})



Komponenta $\vec{\mu}$ (= celotni mag. moment) vzdolž $\vec{J}$:

$$\mu_J = \frac{\vec{\mu}\cdot\vec{J}}{|\vec{J}|} = -\frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{L}+2\vec{S})\cdot(\vec{L}+\vec{S})\frac{1}{|\vec{J}|}$$

$$= -\frac{\mu_B}{\hbar|\vec{J}|}\left(\vec{L}^2 + 2\vec{S}^2 + 3\vec{L}\cdot\vec{S}\right)$$

$\vec{J}=\vec{L}+\vec{S} \Rightarrow$

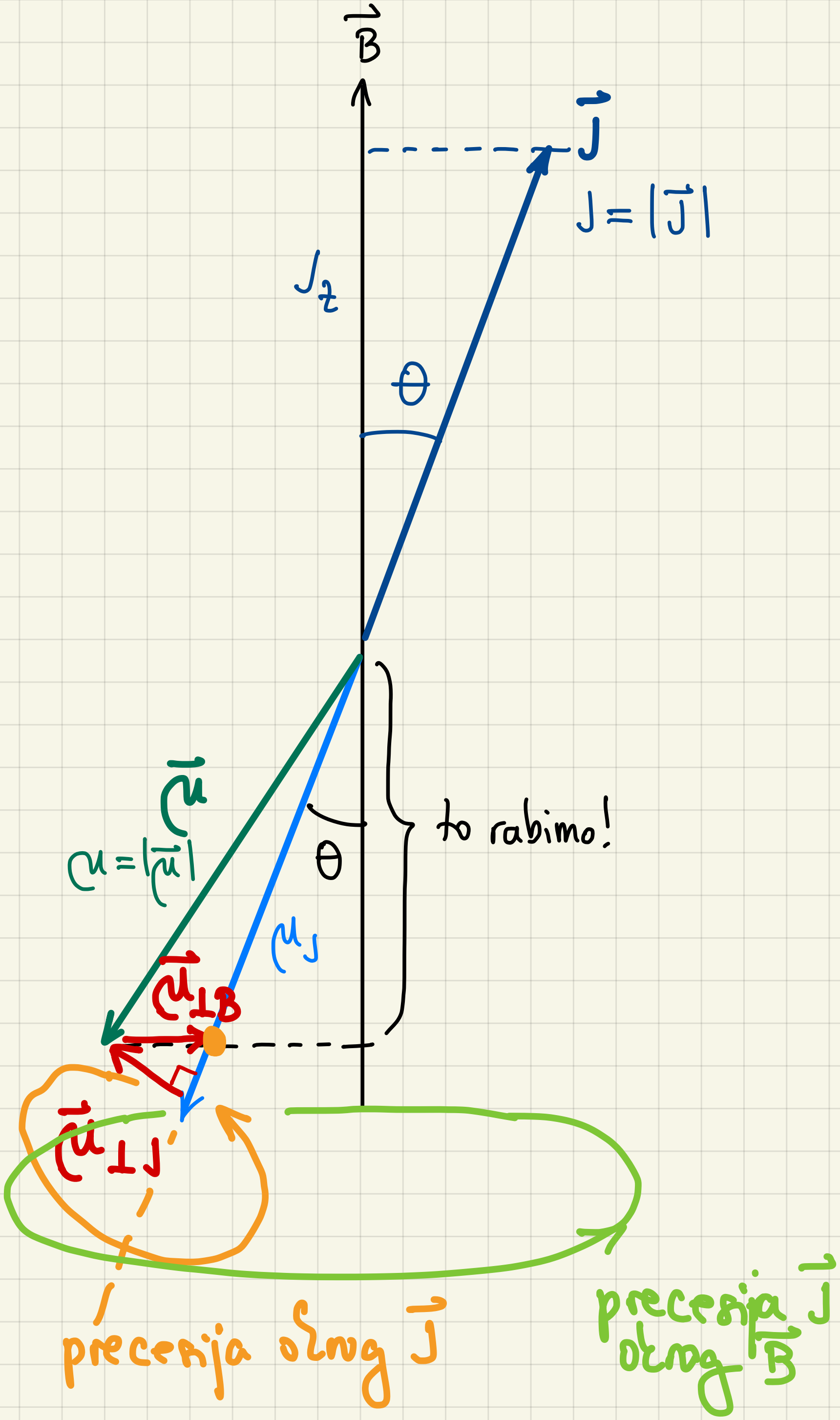
$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}\left(\vec{J}^2-\vec{L}^2-\vec{S}^2\right)$

$$= -\frac{\mu_B}{\hbar|\vec{J}|}\left(\vec{L}^2 + 2\vec{S}^2 + \frac{3}{2}\left(\vec{J}^2-\vec{L}^2-\vec{S}^2\right)\right)$$

$$= -\frac{\mu_B}{2\hbar|\vec{J}|}\left(3\vec{J}^2+\vec{S}^2-\vec{L}^2\right)$$

Toda μ_J ni tisto, kar potrebujemo za izračun mag. interakcijske energije! Potrebujemo $\underline{\underline{\mu_z}}$, komponento $\vec{\mu}$ vzdolž $\vec{B}$!

$\vec{\mu}_l = -\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L}$, $\vec{\mu}_s = -2\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}$



$$\mu_z = |\vec\mu_J + \cancel{\vec\mu_{\perp J}} + \cancel{\vec\mu_{\perp B}}| \cdot \cos\theta$$

$$\cos\theta = J_z / J$$

$$\Downarrow$$

Mislimo si, da ob sočasni precesiji $\vec\mu_\ell$ in $\vec\mu_s$ okrog $\vec\mu_J$ in $\vec J$ okrog $\vec B$ povprečimo po vseh orientacijah $\vec\mu_{\perp J}$ in $\vec\mu_{\perp B}$

$$\Downarrow$$

$$\mu_z \longrightarrow \mu_J \cos\theta = \mu_J \frac{J_z}{J}$$

Izračunamo pričakovano vrednost ne $\langle \mu_z \rangle$, temveč $\langle \mu_z \vec J^2 \rangle$:

$$\langle \mu_z \vec J^2 \rangle = \langle \mu_z \vec J \cdot \vec J \rangle = \langle J_z J \underline{\underline{\mu_J}} \rangle$$

s prejšnje strani

$$= -\frac{\mu_B}{\hbar} \langle J_z (3\vec J^2 + \vec S^2 - \vec L^2) \rangle$$

$$\langle \mu_z \vec J^2 \rangle = \langle \mu_z \rangle \hbar^2 j(j+1) \quad \text{v stanju } \psi_{n\ell j m_j}$$

$$\langle J_z (3\vec J^2 + \vec S^2 - \vec L^2) \rangle = \langle J_z \rangle \hbar^2 [3j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)]$$

Izenačimo levo in desno:

$$\boxed{\langle \mu_z \rangle = -g\mu_B \frac{\langle J_z \rangle}{\hbar} \qquad g = 1 + \frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}}$$

šibko polje!

Landéjevo giromag. 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 $\vec{l}\cdot\vec{s}$ itd.

Iz te formule dobimo $g_l = 1$, če postavimo "$s=0$" in si mislimo, da sta $\vec{L}$ in $\vec{J}$ identični stvari... Ampak pravilno je seveda $s=1/2$, in to se reducira na $g_s = 2$, če postavimo $l=0$ in $j=1/2$.

To lahko posplošimo na vektor:

$$\boxed{\langle \vec{\mu} \rangle = -g\frac{\mu_B}{\hbar}\langle \vec{J} \rangle}$$

To lahko storimo, ker je opazljivi vektor mag. dipol. momenta sorazmeren s celotno VK, edini vektor, ki karakterizira stanje atoma.

(ψ_{nljm_j})

Mag. interakcijska energija:

$$\langle E_{mag} \rangle = -\langle \mu_z \rangle B = +\overset{\text{Landé}}{g}\,\mu_B B \frac{\langle J_z \rangle}{\hbar}$$

$$\boxed{\langle E_{mag} \rangle = g \mu_B B m_j}$$

Zgled Lymanovi prehodi $2P_{3/2} \to 1S_{1/2}$ in $2P_{1/2} \to 1S_{1/2}$ v prisotnosti zunanjega mag. polja B.

stanje $2P_{3/2}$: $g = 1 + \dfrac{15/4 - 2 + 3/4}{2 \cdot 15/4} = 1 + \dfrac{1}{3} = \dfrac{4}{3}$

$m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2} \Rightarrow \langle E_{mag} \rangle = \frac{4}{3} \mu_B B \left\{-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}$

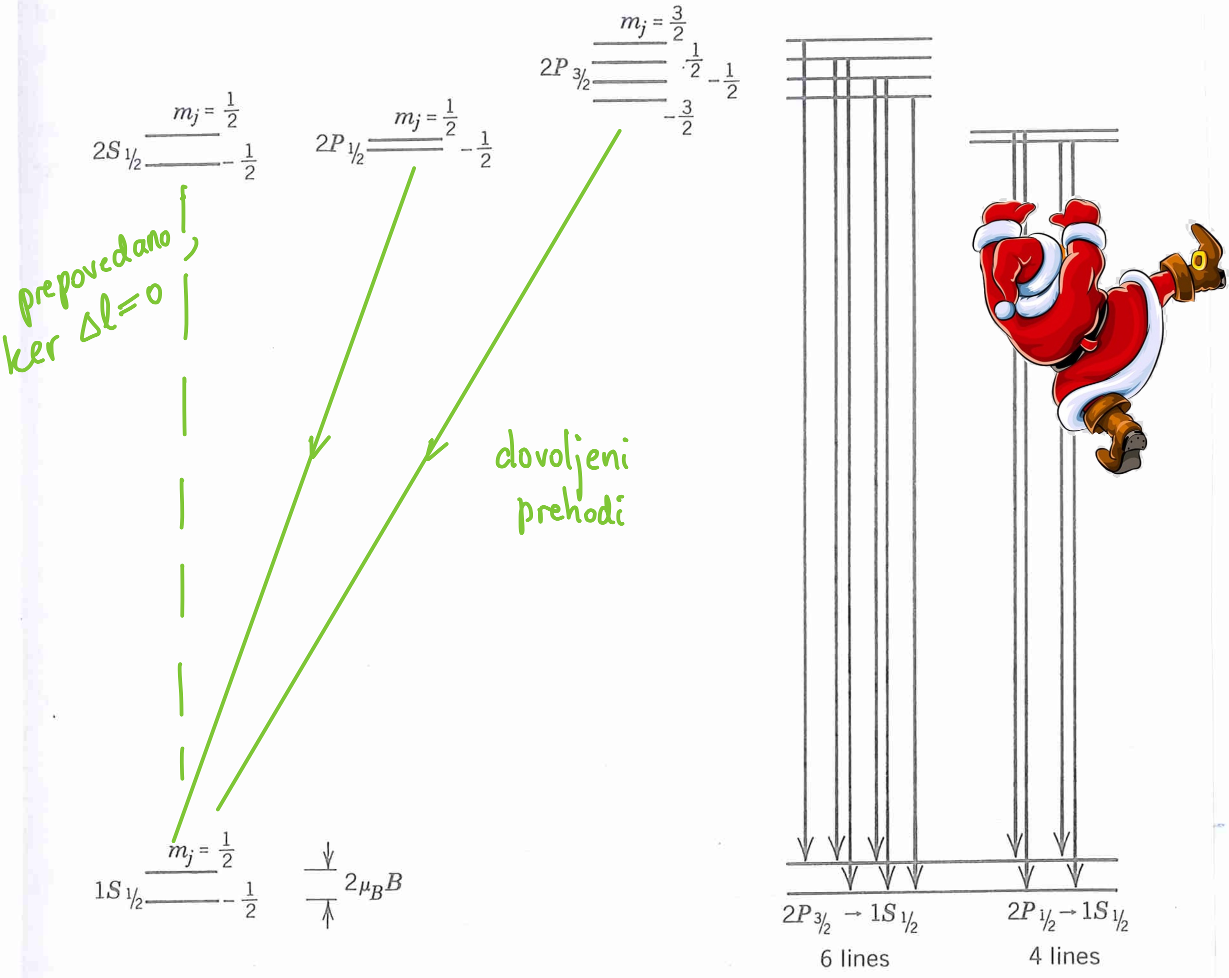
stanje $2P_{1/2}$: $g = 1 + \dfrac{3/4 - 2 + 3/4}{2 \cdot 3/4} = 1 - \dfrac{1}{3} = \dfrac{2}{3}$

$m_j = \pm\frac{1}{2} \Rightarrow \langle E_{mag} \rangle = \frac{2}{3} \mu_B B \left\{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\}$

stanje $1S_{1/2}$: $g = 1 + \dfrac{3/4 - 0 + 3/4}{2 \cdot 3/4} = 1 + 1 = 2$

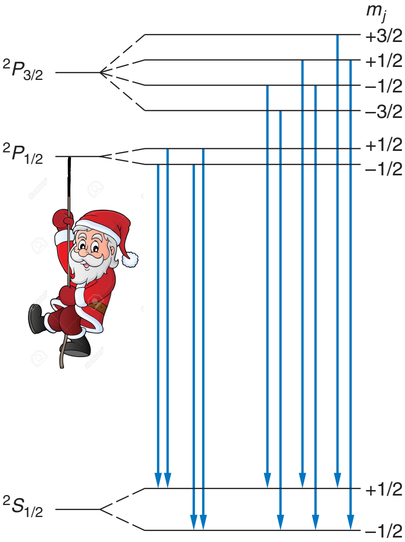
$m_j = \pm\frac{1}{2} \Rightarrow \langle E_{mag} \rangle = 2 \mu_B B \left\{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\}$

Figure 8-34
Zeeman splitting in the ground state and first excited states of hydrogen. An applied magnetic field splits the levels for the various values of m_j. The Lyman α fine structure transitions $2P_{3/2} \to 1S_{1/2}$ and $2P_{1/2} \to 1S_{1/2}$ result in six and four distinct spectral lines.



Natrij


No field
$\vec{B}_{vn}=0$
Weak field
λ


m_j
$+3/2$
$+1/2$
$-1/2$
$-3/2$
$^2P_{3/2}$
$^2P_{1/2}$
$+1/2$
$-1/2$
$^2S_{1/2}$
$+1/2$
$-1/2$

Sevanje atomov

Doslej smo obravnavali lastna stanja energije kot stanja stacionarna:

$$|\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x)|^2 = \text{neodvisno od } t$$

Načeloma atom v takšnem stanju vztraja ∞ dolgo. V resnici: 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 E)

2 = začetno stanje (višja E)

Ustrezni lastni VF sta

$$\Psi_1(\vec{r},t) = \psi_1(\vec{r})\, e^{-iE_1 t/\hbar}$$

$$\Psi_2(\vec{r},t) = \psi_2(\vec{r})\, e^{-iE_2 t/\hbar}$$

velja za kakršenkoli sistem (atom, ∞ jama, LHO, ...)

"Trenutna" VF Ψ_α naj ima obliko:

$$\Psi_\alpha = \begin{cases} \Psi_2 & t \leq 0 \\ \Psi_1 & t \gg \tau \end{cases}$$

do motnje, ki se zgodi ob $t=0$

τ = čas, značilen za ta razpad (ravno to nas najbolj zanima)

$$\Psi_\alpha = c_1(t)\Psi_1 + c_2(t)\Psi_2$$

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 samo lastna stanja,

$$\langle E_\alpha \rangle = c_1^2(t)E_1 + c_2^2(t)E_2 = E_1 + c_2^2(t)(E_2 - E_1)$$

Pred prehodom ② → ① : $c_2 = 1,\ c_1 = 0$

Po prehodu $(t \gg \tau)$: $c_2 = 0,\ c_1 = 1$

Omejimo se samo na električno dipolno sevanje.

Klasično: $\vec{p}_e = e(\vec{r}_+ - \vec{r}_-)$, $e > 0$

Pri H atomu: $\hat{\vec{p}}_e = -e_0 \vec{r}$ ... $\vec{r}$ od jedra do e^-

Pričakovana vrednost $\hat{\vec{p}}_e$ v stanju z VF Ψ_α:

$$\langle \vec{p}_e(\alpha) \rangle = \int \Psi_\alpha^* \hat{\vec{p}}_e \Psi_\alpha \, d^3\vec{r} = \int (c_1\Psi_1^* + c_2\Psi_2^*)\hat{\vec{p}}_e (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)\, d^3\vec{r}$$

$$= c_1^2(t)\int \Psi_1^* \hat{\vec{p}}_e \Psi_1 \, d^3\vec{r} + c_2^2(t) \int \Psi_2^* \hat{\vec{p}}_e \Psi_2 \, d^3\vec{r}$$

$$+ c_1(t)c_2(t)\left[\int \Psi_1^* \hat{\vec{p}}_e \Psi_2 \, d^3\vec{r} + \int \Psi_2^* \hat{\vec{p}}_e \Psi_1 \, d^3\vec{r}\right]$$

Diagonalna člena: sode funkcije $\Psi^*\Psi$, pomnožene z lihimi (x, y, z), in integrirane na simetričnih intervalih $((-\infty,\infty), (-a,a))$

$$\int |\Psi|^2 x \, d^3\vec{r},\ \int |\Psi|^2 y \, d^3\vec{r},\ \int |\Psi^2| z \, d^3\vec{r} = 0$$

$\Rightarrow$ pojasnimo, zakaj atom, ki ostaja v enem od svojih lastnih stanj, ne seva

$$\vec p_e^{(12)}(t) = \int \psi_1^* \hat{\vec p}_e \psi_2 \, d^3\vec r = e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} \underbrace{\int \psi_1^* \hat{\vec p}_e \psi_2 \, d^3\vec r}_{\vec p_e^{(12)}\ (\text{brez } t)}$$

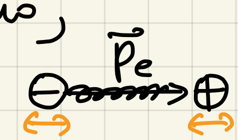
$$\vec p_e^{(21)}(t) = \dots = e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} \underbrace{\int \psi_2^* \hat{\vec p}_e \psi_1 \, d^3\vec r}_{\vec p_e^{(21)}}$$

Op. je realen $\Rightarrow$ $\vec p_e^{(12)}(t) = \vec p_e^{(21)}(t)$

rečemo tudi: $\vec p_e^{(12)} = \vec p_e^{(21)}$

$$\Rightarrow \quad \langle \vec p_e(\alpha) \rangle = c_1 c_2 \, \vec p_e^{(12)} \left[e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} + e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} \right]$$
$$= 2 c_1 c_2 \, \vec p_e^{(12)} \cos\left[(E_2-E_1)t/\hbar \right]$$

$\Rightarrow$ pričakovana vrednost el. dipol. momenta niha (Re) sinusno, kakor niha tudi klasični dipol: $\vec p_e = \vec p_{e0} \cdot \cos \omega t$



$\Rightarrow$ frekvenca izsevanega fotona

$$\omega_{12} = \frac{E_2-E_1}{\hbar} \quad \text{oz.} \quad \nu_{12} = \frac{\omega_{12}}{2\pi} = \frac{E_2-E_1}{h}$$

ob prehodu $2 \to 1$

Kaj pa izsevana moč?

Klasično dipol zvezno oddaja energijo, kvantno ne moremo navesti eksplicitne čas. odvisnosti, le verjetnost za prehod / čas. enoto.

Klasični izraz za energijski tok, ki ga seva dipol:
(Strnad II, str. 457)

$$P = \frac{\omega^4 \vec p_{e0}}{12\pi \varepsilon_0 c^3} = -\frac{dE}{dt}$$

Opazujemo toliko časa, da je večina atomov že v končnem stanju in le še malo v začetnem: $C_1 \approx 1$ in $C_2 = \sqrt{1-C_1^2} \ll 1$.

$$-\frac{d}{dt}\langle E_\alpha \rangle = -(E_2 - E_1)\frac{dC_2^2(t)}{dt} = -\hbar\omega_{12}\frac{dC_2^2(t)}{dt}$$

V enačbo za P damo ω_{12} namesto ω in $2C_1C_2\vec{p}_e^{(12)}$ namesto $\vec{p}_{e0}$ ter postavimo $C_1 = 1$.

Dobimo

$$P = \frac{4\,\omega_{12}^{\cancel{4}\,3}\,C_2^2(t)\left(\vec{p}_e^{(12)}\right)^2}{12\pi\varepsilon_0 c^3} = -\hbar\cancel{\omega_{12}}\frac{d}{dt}C_2^2(t)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{dC_2^2(t)}{C_2^2(t)} = -\frac{\omega_{12}^3\left(\vec{p}_e^{(12)}\right)^2}{3\pi\varepsilon_0 c^3\hbar}\,dt \qquad = 1/\tau$$

To ima rešitev $\quad C_2^2(t) = \underbrace{C_2^2(0)}_{=1}\,e^{-t/\tau}$

„zasedenost" zg. stanja eksp. pojema (vedno imamo zelo veliko atomov)

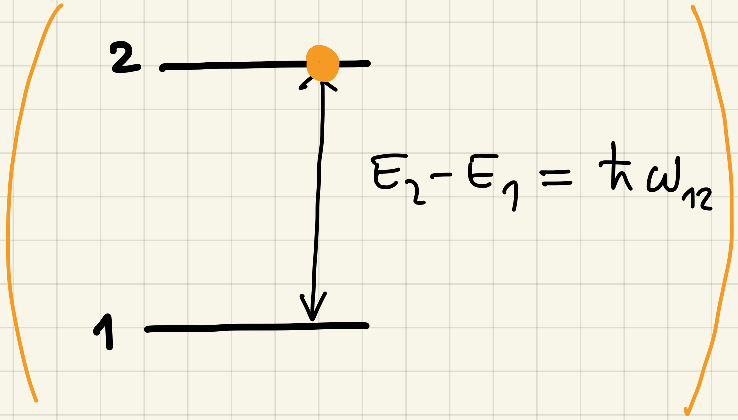
$$\boxed{\frac{1}{\tau} = \frac{\omega_{12}^3\left(\vec{p}_e^{(12)}\right)^2}{3\pi\varepsilon_0 c^3\hbar}}$$

karakterist. čas za prehod ② → ①

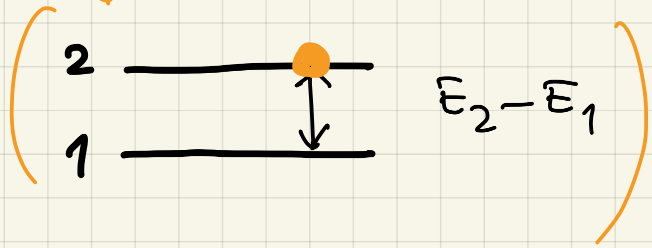
Verjetnost za (el. dipolni!) prehod 2 → 1 na čas. enoto

$\propto \omega_{12}^3$!

$\propto \vec{p}_{12}^{\,2}$!



bolj kratkoživo kot



MERRY XMAS !

Izbirna pravila (selection rules)

Zadnjič: za račun $1/\tau$ (= verjetnost za prehod / čas. enoto) je bil odločilen "matrični element" el. dipol. momenta; npr. med stanjema n in m:

$$\int \psi_m^*(-e_0\vec{r})\,\psi_n\, d^3\vec{r} = -e_0 \langle m|\vec{r}|n\rangle$$

Prehodi, za katere je to $\neq 0$, so dovoljeni (allowed)
$= 0$, prepovedani (forbidden)

∞ jama

$\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$

$$\langle x\rangle_{mn} = \langle m|x|n\rangle = \int_0^a \psi_m(x)\, x\, \psi_n(x)\, dx, \quad \langle p_{mn}\rangle = -e_0\langle x_{mn}\rangle$$

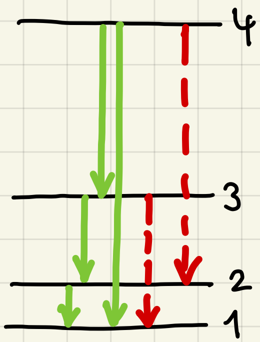
Za splošna m in n (Stroud III, str. 163):

$m=n=1$ $m=3, n=1$ $m=n=2$

m →, n ↓

$$[\langle x\rangle] = \frac{8a}{\pi^2}\begin{bmatrix} 0 & \frac{2}{9} & 0 & \frac{4}{225} & 0 & \cdots \\ \frac{2}{9} & 0 & \frac{6}{25} & 0 & \frac{10}{441} & \cdots \\ 0 & \frac{6}{25} & 0 & \frac{12}{49} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix}$$

kot matrika

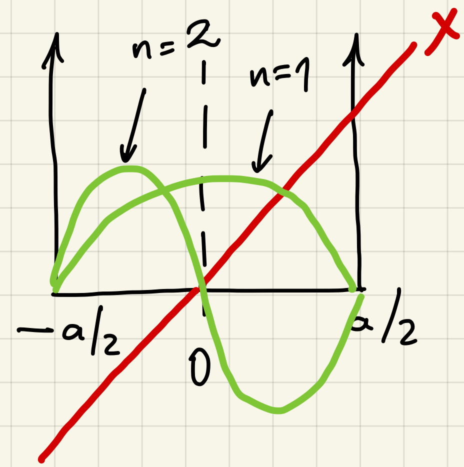


$\langle x_{mn}\rangle = 0$, če m in n oba soda ali oba liha ($\Rightarrow$ prepovedani)

$\Rightarrow$ dovoljeni: $\boxed{\Delta n = \text{liho}}$

Lepše bi bilo za jamo izbrati simetričen interval, npr. $[-a,a]$, $[-a/2,a/2]$:

$$p_e \propto \int_{-a}^{a} \underbrace{\begin{Bmatrix} \text{liha} \\ \text{soda} \end{Bmatrix}}_{\psi_m} \cdot x \cdot \underbrace{\begin{Bmatrix} \text{liha} \\ \text{soda} \end{Bmatrix}}_{\psi_n} dx$$



$\neq 0$ le ob sodem integrandu

H-atom

Začetna VF: $\psi_2(\vec{r}) = R_{n'l'}(r)\, Y_{l'm_l'}(\theta,\phi)\, \chi_{m_s'}$

Končna VF: $\psi_1(\vec{r}) = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\theta,\phi)\, \chi_{m_s}$

sferične koord: v $\hat{p}_{ex}^{(12)}$, $\hat{p}_{ey}^{(12)}$, $\hat{p}_{ez}^{(12)}$ nastopajo $x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$, $z = r\cos\theta$

in $d^3\vec{r} = r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$

V kotnih delih nastopajo faktorji $e^{im_l'\phi}$ in $e^{im_l\phi}$

Dobimo integrale tipa (npr. za x komponento):

$$\int_0^{2\pi} \underbrace{e^{-im_l\phi}}_{\text{od } \psi_1^*(\vec{r})} \underbrace{\cos\phi}_{\text{od } x} \underbrace{e^{im_l'\phi}}_{\text{od } \psi_2(\vec{r})} d\phi = \int_0^{2\pi} e^{-im_l\phi}\, \frac{e^{i\phi}+e^{-i\phi}}{2}\, e^{im_l'\phi}\, d\phi = \ldots$$

$$\ldots = \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} e^{i(m_\ell'-m_\ell+1)\phi}\,d\phi + \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} e^{i(m_\ell'-m_\ell-1)\phi}\,d\phi$$

in analogno za komponenti y in z :

$$y:\quad \int_0^{2\pi} e^{-im_\ell\phi}\sin\phi\, e^{im_\ell'\phi}\,d\phi = \ldots$$

$$z:\quad \int_0^{2\pi} e^{-im_\ell\phi}\cdot 1\cdot e^{im_\ell'\phi}\,d\phi = \int_0^{2\pi} e^{i(m_\ell'-m_\ell)\phi}\,d\phi$$

Vsaj eden od zgornjih treh integralov mora biti $\neq 0$, če naj bo el. dipolni prehod v vodiku dovoljen.

$\Rightarrow \quad m_\ell - m_\ell' = 0$ ali ± 1

oz. $\boxed{\Delta m_\ell = 0, \pm 1}$

Izbirno pravilo za kvantno število l izpeljemo na podlagi simetrijskih argumentov. Valovne funkcije imajo namreč določeno PARNOST (parity):

SODA PARNOST : $\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$

LIHA : $\psi(-\vec{r}) = -\psi(\vec{r})$

Atomske VF imajo določeno parnost, ker je $\hat{H}$ neobčutljiv na operacijo zrcaljenja prostora ($\vec{r} \to -\vec{r}$). $\Rightarrow$ spet moramo pogledati le, kdaj dobimo lih oz. sod integrand :

$$\vec{p}_e^{(12)} = -e_0 \int \psi_1^*(\vec{r})\, \vec{r}\, \psi_2(\vec{r})\, d^3\vec{r}$$

Če imata obe VF isto parnost $\Rightarrow$ matrični element $= 0$, ker upr. $\int \text{soda} \cdot \underset{\text{liha}}{\vec{r}} \cdot \text{soda}\; d^3\vec{r} = 0$

$\Rightarrow$ ψ_1 in ψ_2 različno parnost, če naj bo $\vec{p}_e^{(12)} \neq 0$

Krogelne funkcije (Y_{lm}) imajo sodo parnost za sode l (in liho za lihe)

$\Rightarrow$ $l - l' = \pm 1$ oz. $\boxed{\Delta l = \pm 1}$

(zakaj ne $\pm 3, \pm 5, \ldots$ malo razmisli)

Operator $\hat{\vec{p}}_e^{(12)}$ nima zveze s spinom $\Rightarrow$ $\boxed{\begin{matrix} m_s - m_s' = 0 \\ s - s' = 0 \end{matrix}}$

Izbirnega pravila za glavno KŠ n <u>ni</u>:

Ker

$$\int_0^\infty R_{nl}(r)\, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{od } \hat{\vec{p}}_e}}{r}\, R_{n'l'}(r)\, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{od vol. el.}}}{r^2\, dr} \neq 0 \qquad \forall\, n, n'$$

* pri absorpciji očitno velja vse ravno v obratnem smislu kot pri emisiji.

Rotator

$\boxed{\Delta l = \pm 1}$, drugega KŠ itak ni

LHO

$\boxed{\Delta n = \pm 1}$ $\longrightarrow$ el. dipolni prehodi dovoljeni samo med sosednjimi energ. nivoji!!

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)\, x\, \psi_m(x)\, dx = 0 \,, \quad \text{razen če } n = m \pm 1$$

Spin fotona

ta odnese VK, ki se spremeni ob prehodu e^- z višjega v nižje stanje

Očitno moramo fotonu pripisati vrtilno količino "ena".

Nima "tirne" VK (= je ne more imeti) $\Rightarrow$ ima le "lastno" VK, raje ji rečemo kar celotna ozn. spinska

$\rightsquigarrow$ Spin fotona je 1 $\;(S=1)$

$\rightsquigarrow$ torej $\exists$ tri podstanja: $m_s = 0, \pm 1$

$m_s = -1$: levo krožno polarizirani fotoni

$+1$: desno " "

(eliptično ali lin. polarizirano : superpozicija z gornjih dveh)

$m_s = 0$: longitudinalno polarizirani (t.i. virtualni fotoni)

Širina spektralnih črt

* energija stanj, ki smo jih imeli za stacionarna, ni popolnoma ostro določena: atomi spontano sevajo, in v povprečju v času τ preide iz vzbujenega stanja v nižje (ali osnovno). Po Heisenbergu:

$$\underbrace{E_{1/2}\,\tau \approx \hbar}$$

razpolovna širina stanja (ki razpada), merilo za nedoločenost energije

Klasično dipolno sevanje: jakost el. polja v dani točki v valovanju je:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0\, e^{-i\omega_0 t - \beta t} \qquad t \geq 0$$

krožna frekv., s katero niha dipol (ω_0); koef. dušenja (β)

Four. transformacija polja:

$$\tilde{\mathcal{E}}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \mathcal{E}_0\, e^{-i\omega_0 t - \beta t} \cdot e^{i\omega t}\, dt = \frac{\mathcal{E}_0}{\sqrt{2\pi}\,(\beta + i\omega_0 - i\omega)}$$

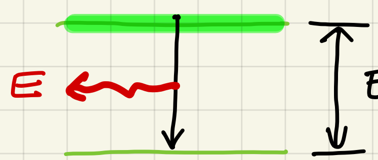
spektralna gostota moči:

$$\propto |\tilde{\mathcal{E}}(\omega)|^2 \propto \frac{\mathcal{E}_0^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \beta^2} = \text{Lorentz (oz. Cauchy)}$$

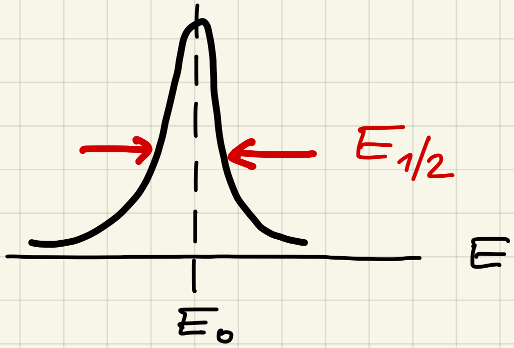
Kvantno:

$$\beta \longrightarrow 1/\tau$$
$$E \longrightarrow \hbar\omega$$
$$E_0 = \hbar\omega_{12} = E_2 - E_1$$

(energijska razlika med nivojema, kjer se zgodi prehod)



energija, ki jo **dejansko** odnese foton



$$P(E) = \frac{1}{\pi}\,\frac{\hbar/2\tau}{(E_0-E)^2+(\hbar/2\tau)^2}$$

Maks. vrednost doseže pri $E=E_0$ in ima polovico te vrednosti pri $\tau/\pi\hbar$, tedaj

$$E = E_0 \pm \hbar/2\tau$$

$$\text{Celotna širina} = E_{1/2} = 2\cdot\frac{\hbar}{2\tau} = \frac{\hbar}{\tau}$$

To nam določa <u>naravno širino spektralne črte</u>:

Zgled H atom, prehod iz $n=2$ v $n=1$ (osn. stanje)

DN

$$\hbar\omega_{12} = E_2 - E_1 = (-13.6\,\text{eV})\left(\tfrac{1}{4}-1\right)$$

po formuli : $1/\tau \approx 6.3\cdot 10^8/s$

Naravna širina: $E_{1/2} = \dfrac{\hbar}{\tau} = 4.1\cdot 10^{-7}\,\text{eV}$

$$\omega_{1/2} = \frac{1}{\tau} = 6.3\cdot 10^8/s$$

$$\gamma_{1/2} = \frac{1}{2\pi\tau} = 1.0\cdot 10^8/s$$

$$\lambda_{1/2} = \frac{\lambda^2}{c}\gamma_{1/2} = 4.9\cdot 10^{-6}\,\text{nm}$$

! naravne širine (ki jih v praksi težko težko vidimo zaradi motenj) so izredno majhne!

Relat. širine so enake ne glede na skalo, v kateri jih gledamo:

$$\frac{E_{1/2}}{E} = \frac{\omega_{1/2}}{\omega} = \frac{\gamma_{1/2}}{\gamma} = \frac{\lambda_{1/2}}{\lambda} = 4\cdot 10^{-8}$$

V zvezdi se spektralne črte razširijo dosti bolj, kot to kaže naravna širina:

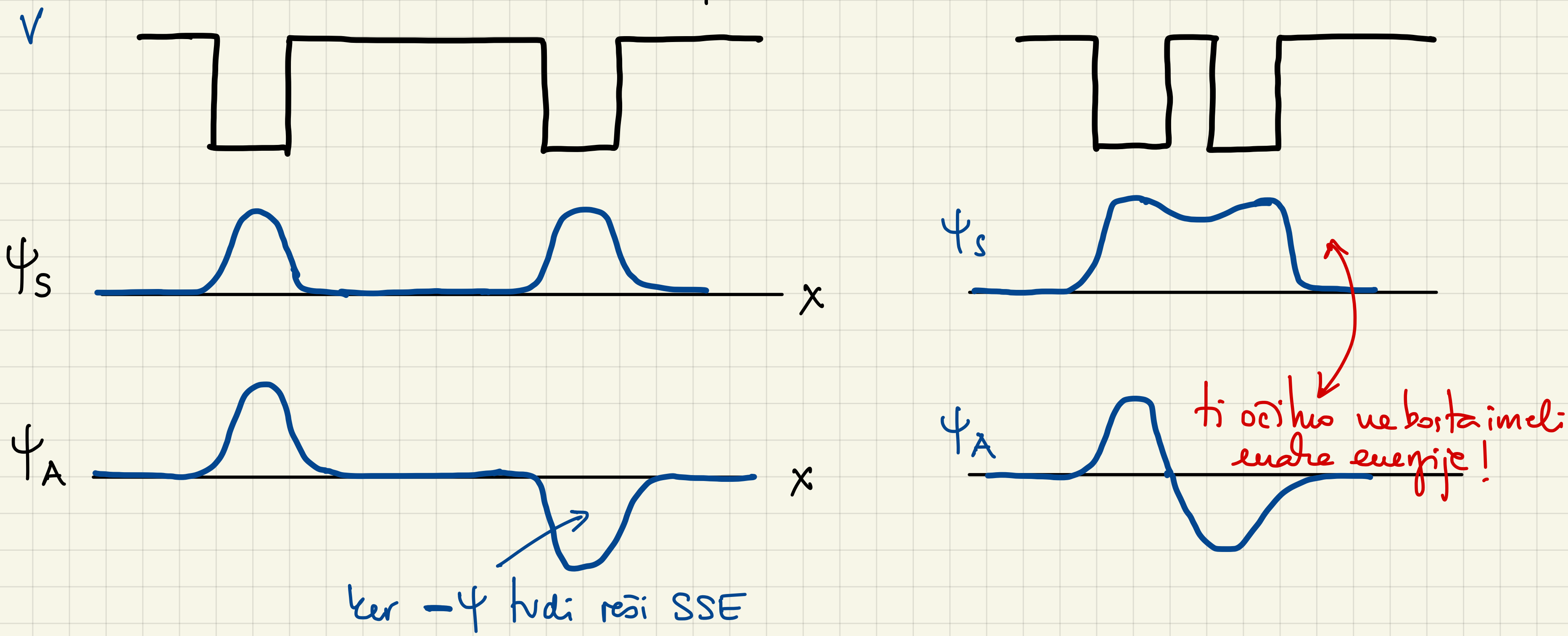
→ DOPPLERJEV POJAV
→ TRKI MED ATOMI

(... se nadaljuje)

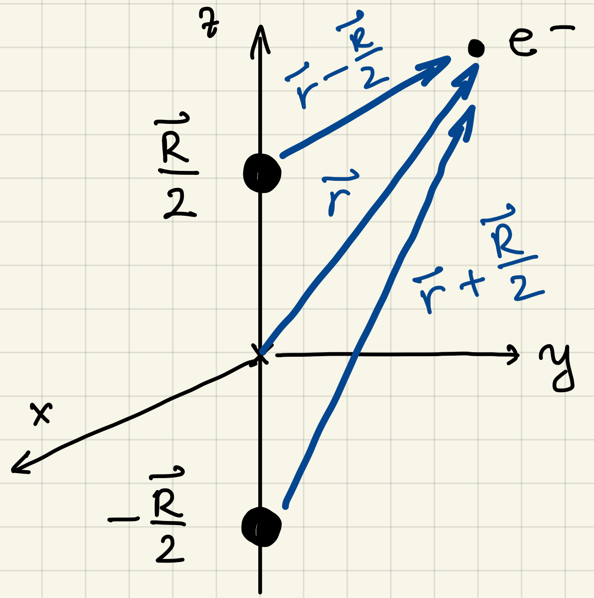
MOLEKULE

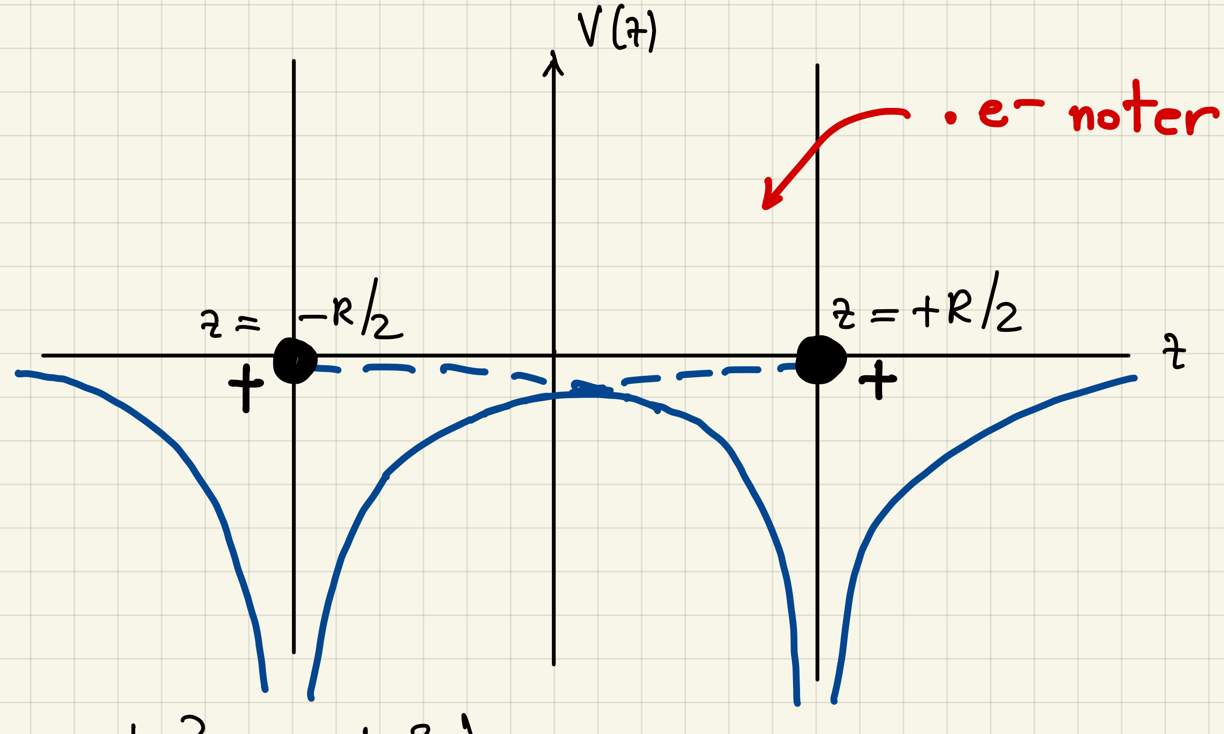
Vezava s kvantnim tuneliranjem: H_2^+ $(p + p + e^-)$

Predstava: dve končni potencialni jami



Born-Oppenheimer: razdaljo med jedroma fiksiramo (R), ker so e^- dosti lažji od p, zato se bistveno hitreje prilagodijo kakršni koli spremembi.





SSE:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_r^2-\frac{ke^2}{|\vec{r}+\frac{\vec{R}}{2}|}-\frac{ke^2}{|\vec{r}-\frac{\vec{R}}{2}|}+\underbrace{\frac{ke^2}{R}}_{\text{odboj med jedroma}}\right)\psi_e(\vec{r})=E_e\psi_e(\vec{r}) \qquad k=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$$

Iz simetrije vidimo: $P(\vec{r})=P(-\vec{r})$

$$\Rightarrow |\psi(-\vec{r})|^2=|\psi(\vec{r})|^2$$

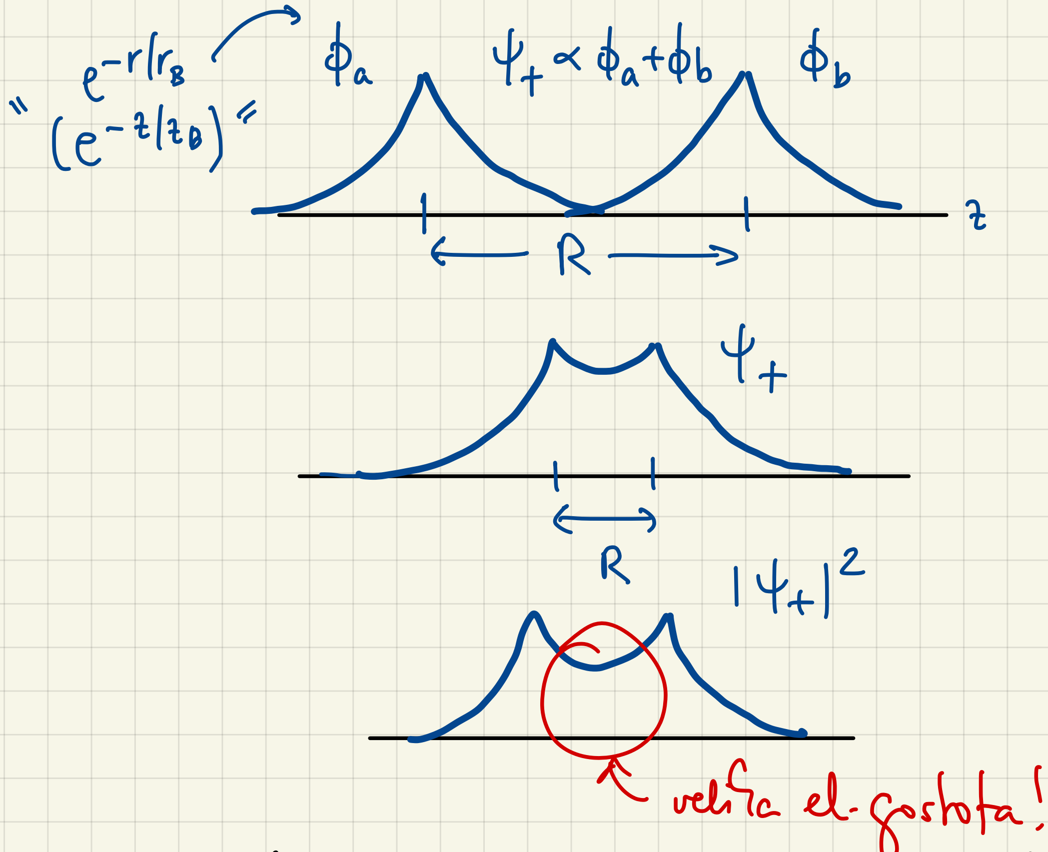
$$\Rightarrow \psi(-\vec{r})=\pm\psi(\vec{r})$$

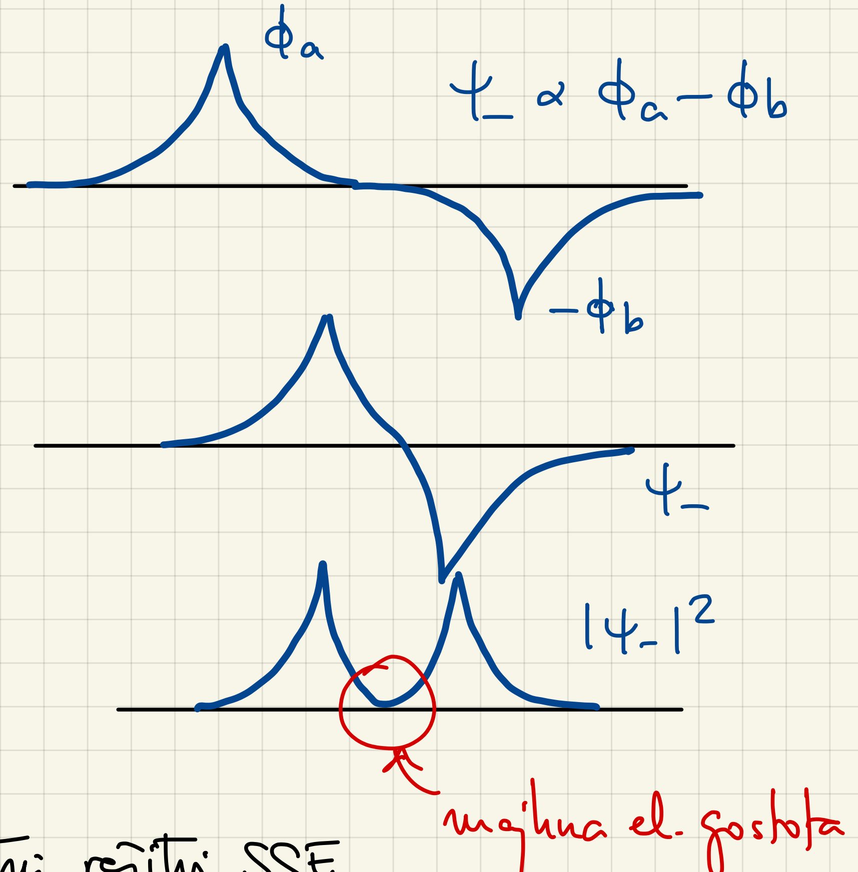
Lahki VF, ki zadoščata tej zahtevi:

nemotene vodikove VF $(n=1,\ l=0)$; dobro, dokler R ni premajhen

$$\psi_+=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{1s}\left(\vec{r}-\frac{\vec{R}}{2}\right)+\phi_{1s}\left(\vec{r}+\frac{\vec{R}}{2}\right)\right)\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_a+\phi_b)$$

$$\psi_-=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{1s}\left(\vec{r}-\frac{\vec{R}}{2}\right)-\phi_{1s}\left(\vec{r}+\frac{\vec{R}}{2}\right)\right)\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_a-\phi_b)$$





Tako zasnovani ψ_+ in ψ_- nista eksaktni rešitvi SSE (s tem potencialom). Takšni rešitvi obstajata, a tu nam gre za ilustracijo. (Preveč računa za premalo haska.)

$$E_\pm = \int \psi_\pm^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) \right] \psi_\pm(\vec{r})\, d^3\vec{r}$$

Oznake: $$T = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_r^2, \quad V_a = -\frac{ke^2}{|\vec{r}-\vec{R}/2|}, \quad V_b = -\frac{ke^2}{|\vec{r}+\vec{R}/2|}$$

$$V_R = \frac{ke^2}{R}, \quad V = V_a + V_b + V_R$$

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}\int (\phi_a \pm \phi_b)\left[T + V_a + V_b + V_k\right](\phi_a \pm \phi_b)\, d^3\vec{r}$$

ϕ so lastne VF za H-atom $\Rightarrow$

$$(T + V_a)\phi_a = E_{1s}\phi_a$$
$$(T + V_b)\phi_b = E_{1s}\phi_b$$

$$G = \int \phi_a^2 (V_b + V_k)\, d^3\vec{r} = \int \phi_b^2 (V_a + V_k)\, d^3\vec{r}$$

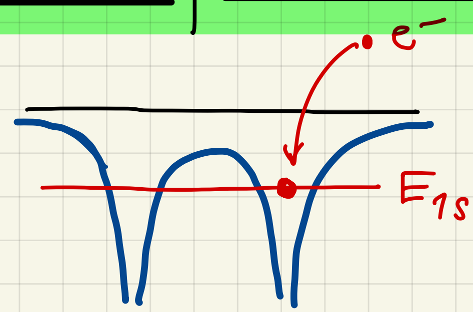
ustreza povprečni coulombski int. med e^- in jedrom na položaju a (pri $\vec{R}/2$) in jedrom na položaju b (pri $-\vec{R}/2$) (in obratno).

$$S = \int \phi_a (V_a + V_k)\phi_b\, d^3\vec{r} = \int \phi_b (V_b + V_k)\phi_a\, d^3\vec{r}$$

t.i. prekrivalni členi (integrali) ~ overlap terms (integrals) in so ključni za vezavo!

Skupaj:

$$\boxed{E_{\pm} = E_{1s} + G \pm S}$$



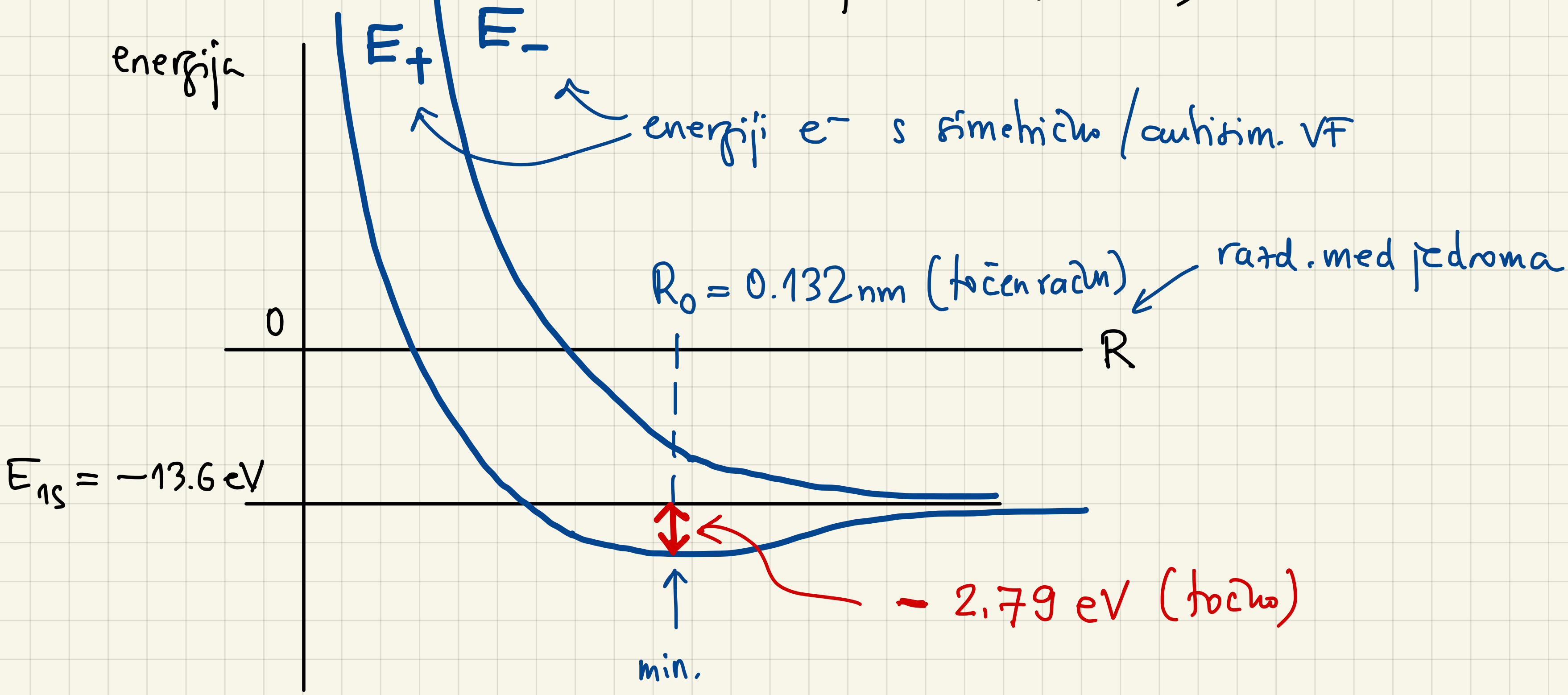
Račun pokaže: $R \to \infty \Rightarrow \left.\begin{array}{l} G \to 0 \\ S \to 0 \end{array}\right\} \Rightarrow E_{\pm} \to E_{1s}$, kot pričakujemo

Ko R zmanjšujemo, E_+ in E_- začneta razlikovati in sta razmaknjeni za $\underline{2S}$.

Z vodikovimi VF je $\underline{S < 0}$ (!) $\Rightarrow$ energija E_+, ki ustreza ψ_+ je nižja kot energija E_-, ki ustreza ψ_-

Čeprav je $G > 0$, je E_+ nižja od E_{1s}, kjer je E_{1s} energija disociirane molekule (= nevtralen H atom in preostali p v ∞ razdalji).

$\Rightarrow$ **molekulski ion H_2^+ z VF ψ_+ je vezan!** (stanje s ψ_- pa ne!)

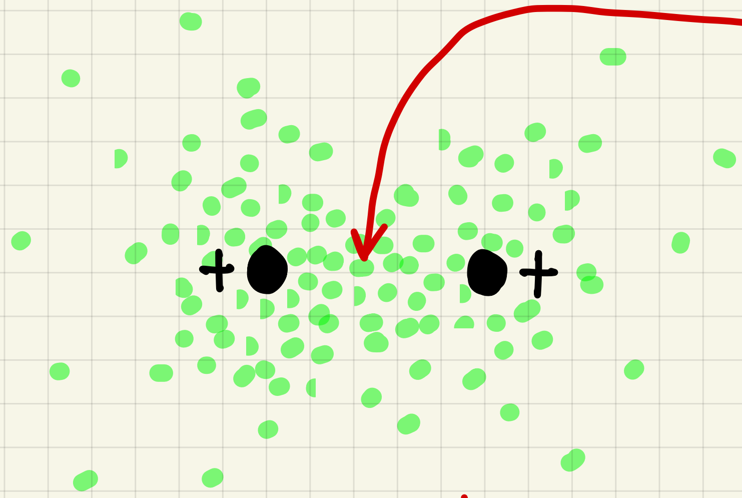


Naš račun (z običajnimi vodikovimi VF): $R_0 = 0.106$ nm, -1.77 eV (kar dober približek)

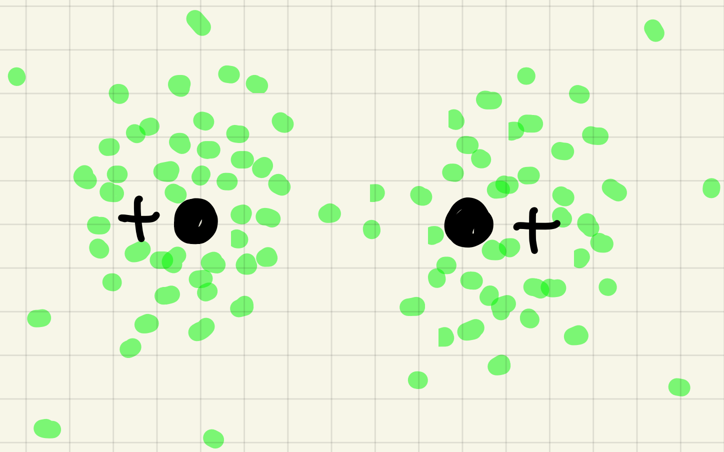
Pod črto:

$$|\psi_\pm|^2 = \frac{1}{2}\left[\phi_a^2 + \phi_b^2 \pm 2\phi_a\phi_b\right]$$

ta dodatna e^- gostota zagotovi vezano!



vezano!

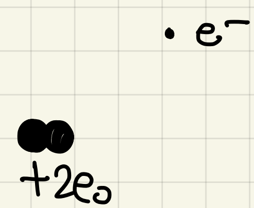


ni vezano

Lepotna napaka: $R \to 0 \Rightarrow \psi_+ \to \phi_{1s} + \phi_{1s} = 2\phi_{1s}$

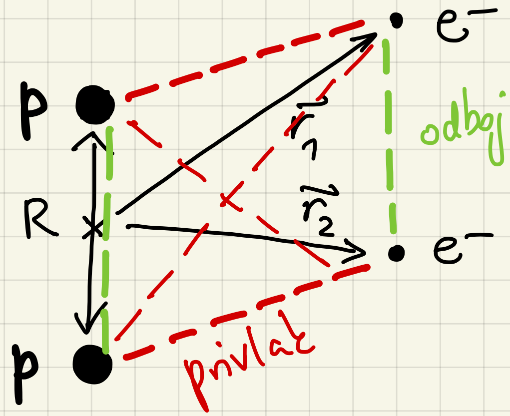
toda e^{-r/r_B},

radi bi pa $e^{-r/\underline{2}r_B}$



(He atom!)

Kovalentna vez: $H_2 = p + p + e^- + e^-$



* Pri približku: oba p pri $\vec{r} = 0$: dva protona in dva e^- kot v He atomu,

$$\underbrace{\psi(1,2)}_{\text{dva } e^-} = \phi_{1s}(\vec{r}_1)\,\phi_{1s}(\vec{r}_2)\,\chi^A(1,2)$$

$$\chi^A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\uparrow_1\downarrow_2 - \downarrow_1\uparrow_2\right)$$

$\parallel$ antisimetrična (singletna) spinska VF

$$\chi^A(2,1) = -\chi^A(1,2) \quad \checkmark \quad \text{Pauli}$$

* p razmaknemo na $\pm\vec{R}/2$

Ali bi bila dobra taka VF:

$$\psi(1,2) = \phi_{1s}(\vec{r}_1 - \vec{R}/2)\,\phi_{1s}(\vec{r}_2 + \vec{R}/2)\,\chi^A(1,2) \qquad ?$$

nima "features", ki jih že poznamo

ni antisim. na $1 \Leftrightarrow 2$

Popravimo jo takole:

$$\psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_{1s}\left(\vec{r}_1 - \frac{\vec{R}}{2}\right)\phi_{1s}\left(\vec{r}_2 + \frac{\vec{R}}{2}\right) + \phi_{1s}\left(\vec{r}_2 - \frac{\vec{R}}{2}\right)\phi_{1s}\left(\vec{r}_1 + \frac{\vec{R}}{2}\right)\right] \cdot \chi^A(1,2)$$

simetrično na $1 \Leftrightarrow 2$

antisim. na $1 \Leftrightarrow 2$

singletno spinsko stanje

antisim.

* druga varianta: simetrično (tripletno) spinsko stanje in antisimetrični prostorski del:

$$\chi^{S}_{m_s}(1,2) = \begin{cases} \uparrow_1 \uparrow_2 & m_s = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\uparrow_1\downarrow_2 + \downarrow_1\uparrow_2\right) & m_s = 0 \\ \downarrow_1\downarrow_2 & m_s = -1 \end{cases}$$

$$\psi_T(1,2) = \frac{1}{2}\left[\phi_{1s}(\ldots)\phi_{1s}(\ldots) - \phi_{1s}(\ldots)\phi_{1s}(\ldots)\right]\chi^{S}_{m_s}(1,2)$$

↑ tripletno spinsko stanje

Katera je dobra? (Katera naredi vezano stanje H_2: ψ_S ali ψ_T?)

$$\rho^{(1,2)}_{S,T} = |\psi_{S,T}(1,2)|^2$$

$$= \frac{1}{2}\left[\phi^2_{1s}\left(\vec{r}_1 - \frac{\vec{R}}{2}\right)\phi^2_{1s}\left(\vec{r}_2 + \frac{\vec{R}}{2}\right) + \phi^2_{1s}\left(\vec{r}_2 - \frac{\vec{R}}{2}\right)\phi^2_{1s}\left(\vec{r}_1 + \frac{\vec{R}}{2}\right)\right.$$

$$\left.\underbrace{\pm\, 2\left(\phi_{1s}\left(\vec{r}_1 - \frac{\vec{R}}{2}\right)\phi_{1s}\left(\vec{r}_1 + \frac{\vec{R}}{2}\right)\right)\left(\phi_{1s}\left(\vec{r}_2 - \frac{\vec{R}}{2}\right)\phi_{1s}\left(\vec{r}_2 + \frac{\vec{R}}{2}\right)\right)}_{\text{dodatna } e^- \text{ gostota med obema } p^+ \text{ (s +) ali zmanjšana gostota (z −)}}\right]$$

Spet izračunamo energijo e− v stanjih ψ_S in ψ_T. Dobimo

$$\boxed{E_{S,T} = 2E_{1s} + G' \pm S'}$$

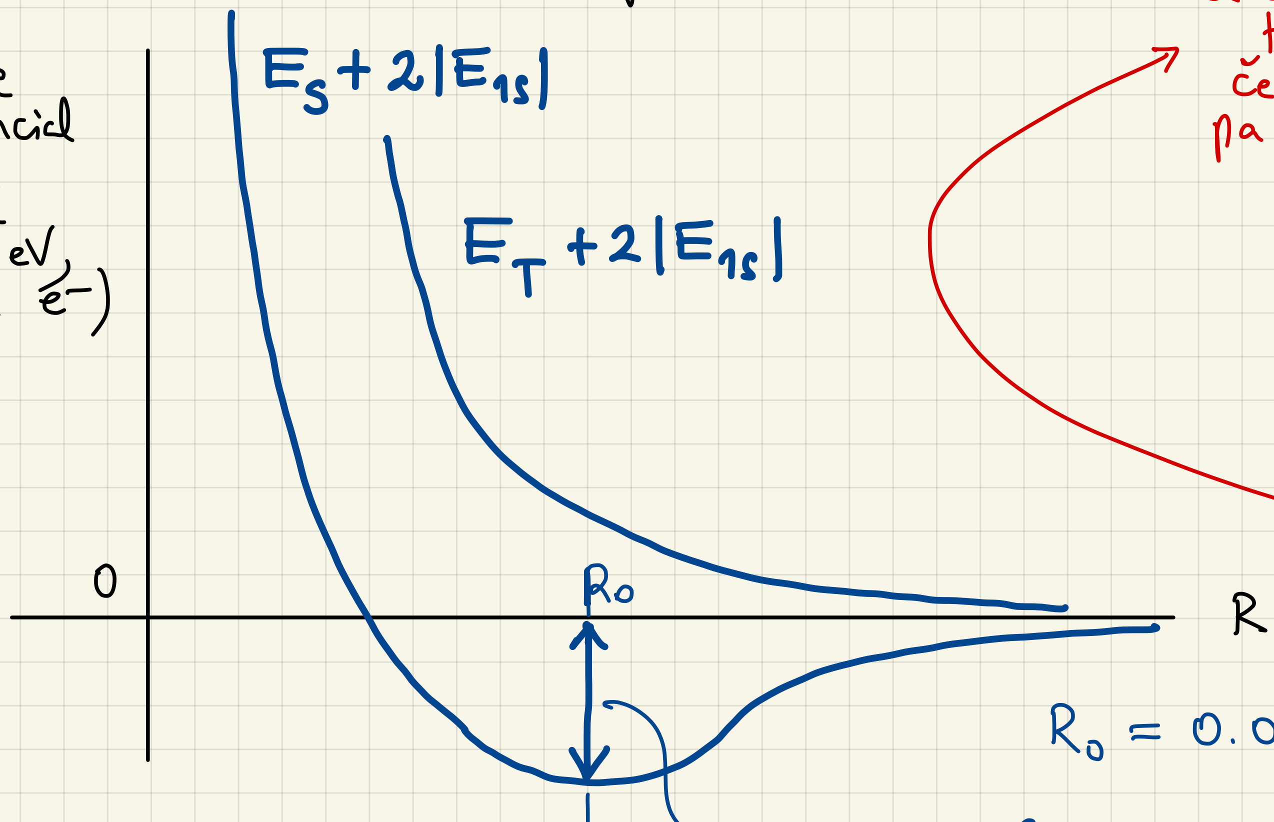
ključni prekrivalni členi

Izkaže se, da je $E_S < E_T$

ima minimum kot funkcija R (in R_0 definira medjedrni razmik)

nima minimuma (ni vezano)

energije (efekt. potencial v H_2, če odštejem $2 * 13.6$ eV, pa energija e−)



če dovedemo 4.5 eV, H_2 razbijemo na H+H, če pa še 2× 13.6 eV, pa H+H → p+p+e−+e− v ∞

$R_0 = 0.075$ nm (H_2)

4.5 eV (če se oba e− ne bi med seboj nič motila, bi bila disociacijska energija $2 * (2.79$ eV$) \approx 5.6$ eV)

Kaj pa, če damo oba e^- k "zgornjemu" jedru ali oba k "spodnjemu"?

$$\psi_S(1,2) \longrightarrow \psi_S(1,2) + \gamma \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_{1s}\left(\vec{r}_1 - \frac{\vec{R}}{2}\right)\phi_{1s}\left(\vec{r}_2 - \frac{\vec{R}}{2}\right) + \phi_{1s}\left(\vec{r}_1 + \frac{\vec{R}}{2}\right)\phi_{1s}\left(\vec{r}_2 + \frac{\vec{R}}{2}\right)\right] \chi^A(1,2)$$

$\Rightarrow$ dobimo "ionske strukture": (H^+, H^-) ali (H^-, H^+)

"ionska vez"

$\gamma \approx 0.2$

$\Rightarrow$ vez v H_2 pretežno kovalentna, le čisto malo "ionska".

Ionska vez

Vodik (H) in alkalni atomi (Li, Na, K, Rb, Cs) imajo en sam e^- na zadnji lupini, in eden od teh interagira s halogenim elementom (F, Cl, Br, I), ki jim manjka en e^- do zaključene lupine.

Pri "odda" e^- drugemu, ki ga "sprejme". $\Rightarrow$ $\text{ion}^+ \overset{e^-}{- - -} \text{ion}^-$

coul. privlak

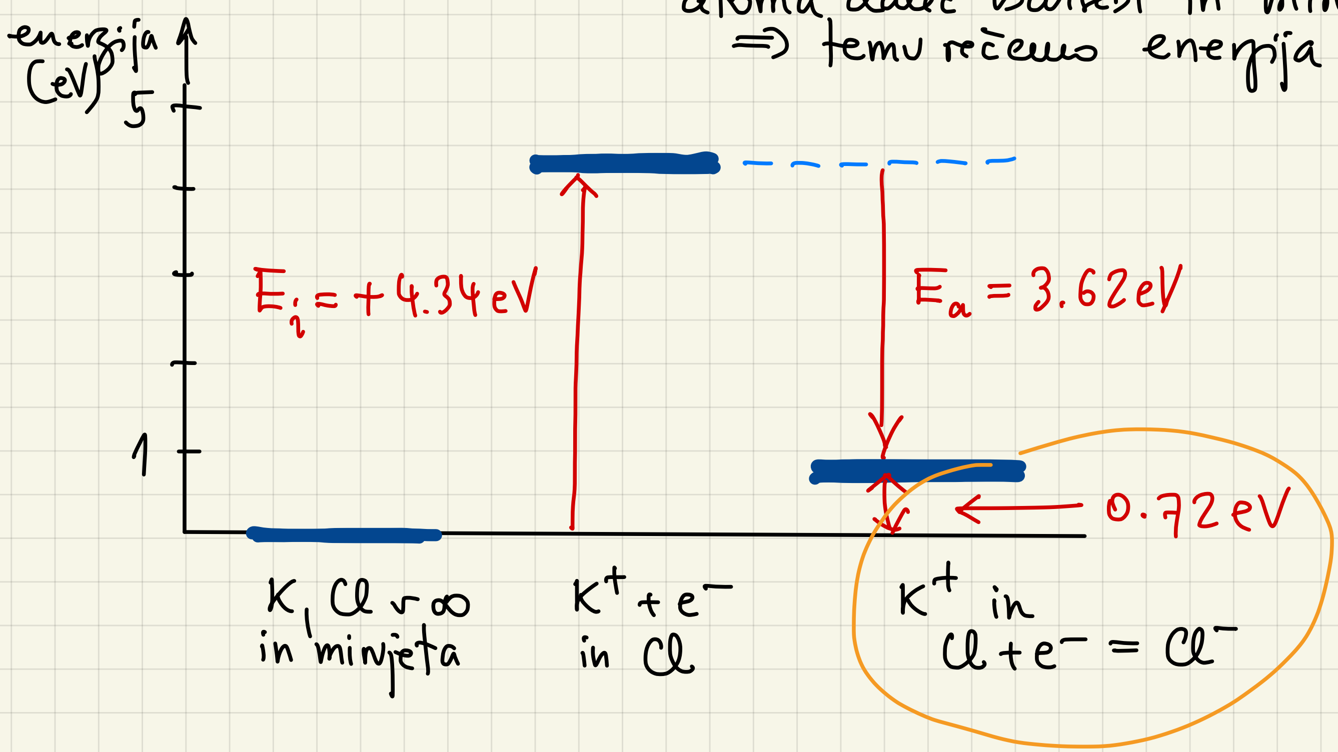
Zakaj se to sploh zgodi?

Primer: KCl : da bi pokazali, da to lahko obstaja in je stabilno, moramo pokazati, da je

$$E(KCl) < E(K) + E(Cl)$$

atoma daleč narazen in mirujeta

$\Rightarrow$ temu rečemo energija $\equiv 0$



To se očitno ne zgodi samo od sebe!

Če bi bila to vsa zgodba, KCl ne bi nastala sama od sebe!

Toda zdaj imamo elektrostat. privlak $K^+ - Cl^-$: $-ke_0^2/R$ $\quad k = 1/4\pi\varepsilon_0$

... in ko je $R \lesssim 2.8\,\text{nm}$, postane ta negativni prispevek po absolutni vrednosti večji od 0.72 eV.

Ko gre $R \to 0$, je sicer pot. energija vedno bolj negativna (in ugodna za vezavo), toda pride do
— elektrostat. odboja med e^- v oblakih
— zaradi "prijemati" Paulijeva prepoved

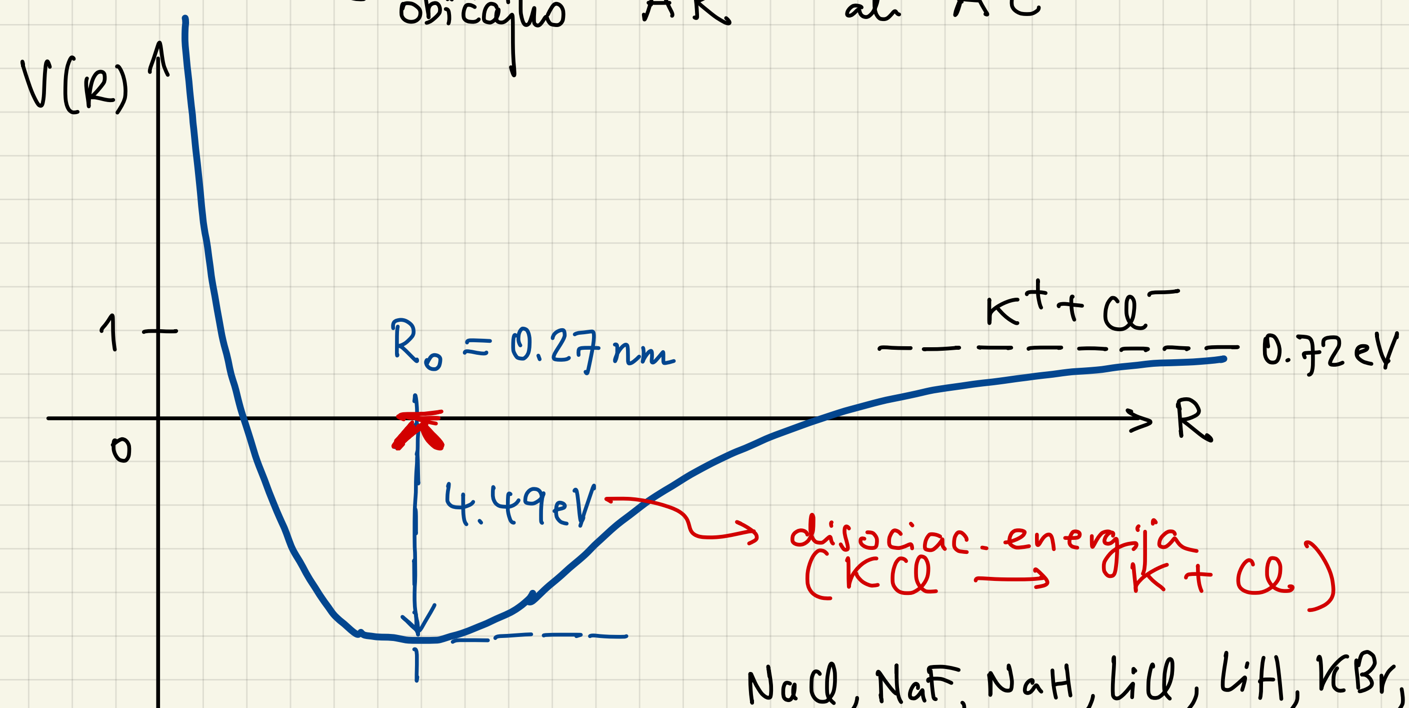
Vse te efekte pospravimo pod streho v efekt. potencialu:

$$\boxed{V(R) = -\frac{ke_0^2}{R} + V_{odbojni}(R) + E_{ion} - E_{afin}}$$

0.72 eV na KCl

običajno AR^{-n} ali $Ae^{-\alpha R}$

Tipični potek:



NaCl, NaF, NaH, LiCl, LiH, KBr, ...

... podobno za vse molekule tega tipa

Ali je ta slika res tako preprosta?

Primer: LiF $Li = (1s)^2(2s)^1$ $F = (1s)^2(2s)^2(2p)^5$

$W_i(Li) = 5.4\,eV$, $W_a(F) = 3.4\,eV$ $\Rightarrow$ en. strošek je 2eV, kompenzira ga elektrostat. privlak

Če "bivši" litijev e^- res ves čas tiči na fluoru, bi morala imeti molekula LiF (Li^+F^-) el. dipol. moment:

$$p_e = -e_0(-R_0/2) + e_0 R_0/2 = e_0 R_0$$

Medatomska razdalja: $R_0 = 0.156\,nm$ $\rightarrow$ $p_e = 2.5\cdot 10^{-29}\,As\cdot m$

toda exp.: $p_e = \underline{\underline{2.11}}\cdot 10^{-29}\,As\cdot m$

$\Rightarrow$ to nakazuje, da je vez v LiF samo delno ionska, (85% pričakovanega) in da se $(2s)^1$ elektron iz litija "spari" s fluorovimi iz $(2p)$ orbitale in tvori kovalentno vez.

$$\psi(1,2) = \Big\{ \underbrace{A\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_{2s}(\vec{r}_1 - \tfrac{\vec{R}}{2})\phi_{2p}(\vec{r}_2 + \tfrac{\vec{R}}{2}) + \phi_{2s}(\vec{r}_2 - \tfrac{\vec{R}}{2})\phi_{2p}(\vec{r}_1 + \tfrac{\vec{R}}{2})\right]}_{\text{kovalentna struktura (kot zadnjič)}}$$

$$+ B\,\phi_{2s}(\vec{r}_1 - \tfrac{\vec{R}}{2})\phi_{2s}(\vec{r}_2 - \tfrac{\vec{R}}{2})$$

$$\underbrace{+\,C\,\phi_{2p}(\vec{r}_1 + \tfrac{\vec{R}}{2})\phi_{2p}(\vec{r}_2 + \tfrac{\vec{R}}{2})}_{\text{ionski strukturi}} \Big\}\,\chi^A(1,2)$$

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 e^- na Li, je zelo neverjetno ... Li^-F^+).

Poračuno lahko: $p_e = e_0 R_0 (C^2 - B^2)$

za H_2 bi imeli: $B = C$ in $p_e = 0$, kar je OK $\begin{matrix} H^+ - H^- \\ H^- - H^+ \end{matrix}$

$\Rightarrow$ za LiF ostane le $p_e = e_0 R_0 C^2$

če "nafitamo" $e_0 R_0 C^2 = p_e(\mathrm{exp}) \Rightarrow C^2 \approx \underline{\underline{0.85}}$

$\Rightarrow C \approx 0.922$

$A^2 = 1 - C^2 = \underline{\underline{0.15}} \Rightarrow A \approx 0.387$

$\Rightarrow$ Vez v LiF je $\approx 85\%$ ionska in $\approx 15\%$ kovalentna

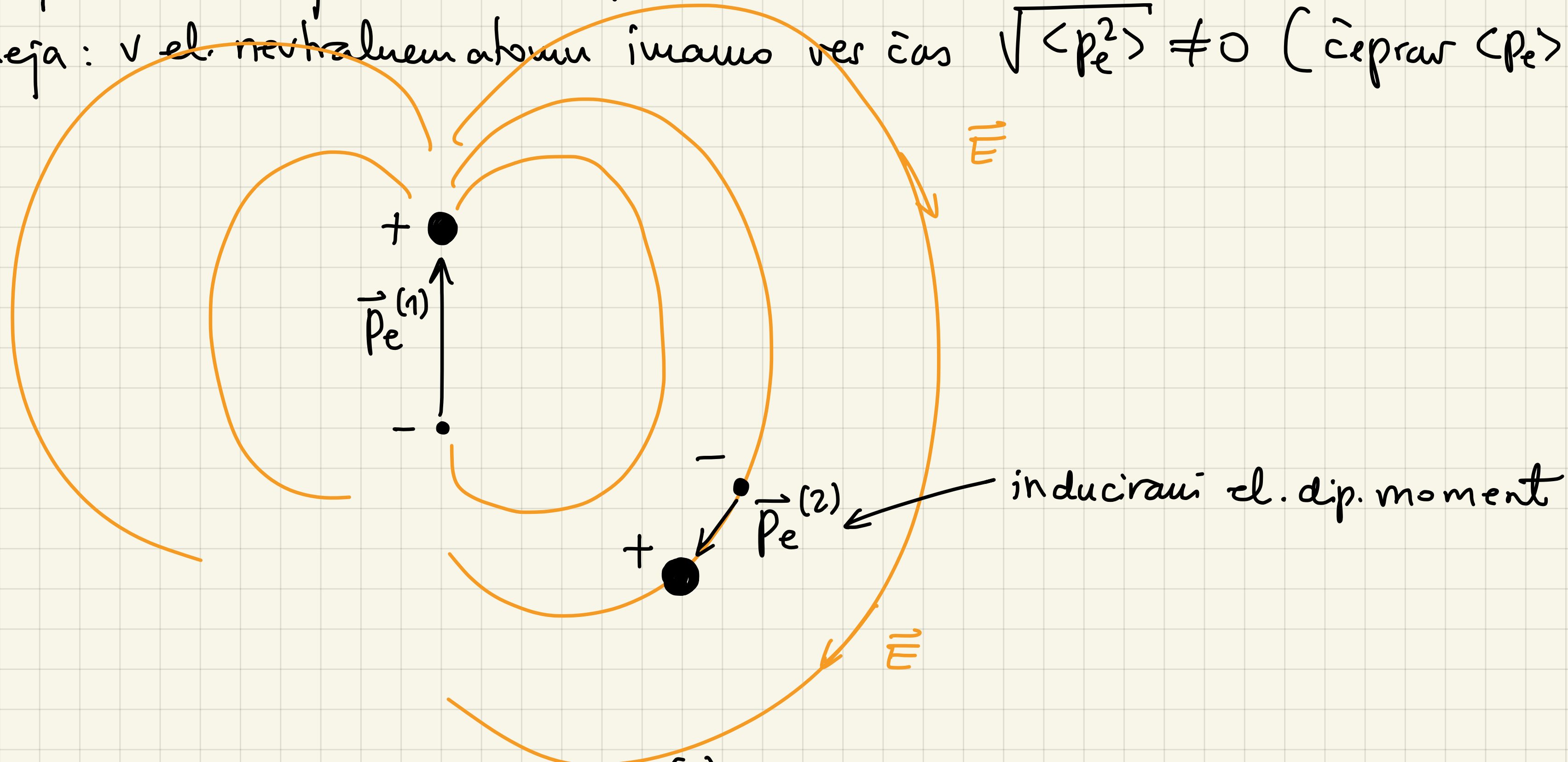
(podobno izračun bi se lahko šli za druge dvoatomne molekule)

Van der Waalsova interakcija

Po zaslugi te interakcije imamo Ne_2, Ar_2, Kr_2, Xe_2 (in sorodne reči)

Temelji na interakciji dveh el. dipolov.

Ideja: v el. nevtralnem atomu imamo ves čas $\sqrt{\langle p_e^2 \rangle} \neq 0$ (čeprav $\langle p_e \rangle = 0$).



Dipolno polje: $$E_d = \frac{p_e^{(1)}}{4\pi\varepsilon_0 R^3}$$

$$\vec{p}_e^{(2)} = \alpha \vec{E}_d$$

to ni konst. fine strukture, ampak polarizabilnost

Energija drugega dipola v polju prvega:

$$V = -\vec{p}_e^{\,(2)} \cdot \vec{E}_d$$

samo velikosti: $$V = -p_e^{(2)} E_d = -\alpha E_d^2 = -\alpha \frac{\left(p_e^{(1)}\right)^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{1}{R^6} = -\frac{\alpha e^2 a^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{1}{R^6}$$

$$\boxed{V \propto -\frac{1}{R^6}} \quad \Rightarrow \quad F = -\frac{dV}{dR} \propto \frac{1}{R^7}$$

VdW interakcija je sicer šibka, vendar ima daljši doseg kot eksponentno padajoča kovalentna vez!

* Pri žlahtnih atomih je to edina interakcija!

* obratno pa: VdW ∃ tudi v molekulah, ki se vežejo kovalentno ali ionsko, a tam je efekt zanemarljiv...

Priljubljen potencial:

običajno 12

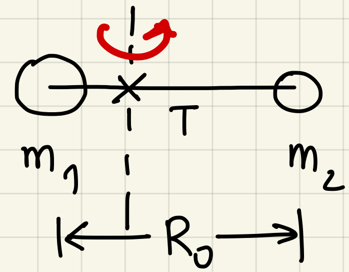
$$\boxed{V(R) = 4\varepsilon\left[\underbrace{\left(\frac{\sigma}{R}\right)^n}_{\text{odbojni člen pri majhnih } R} - \underbrace{\left(\frac{\sigma}{R}\right)^6}_{\text{VdW privlak}}\right]}$$

Lennard-Jones

fitamo na eksp. podatke za posamezno molekulo

Vzbujena stanja in spektri molekul

Rotacija → rotator!



$\Downarrow$

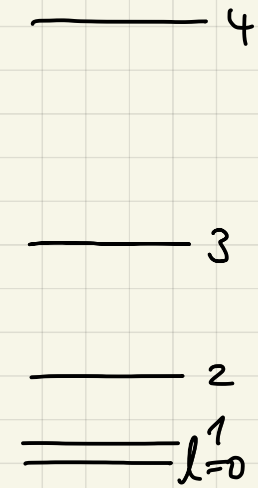
$Y_{lm}(\theta,\phi)$

pazi! To zdaj nima zveze z elektronsko VK!

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$$

Rotacijska energija dvoatomne molekule:

$$\boxed{E_{rot} = \frac{\overbrace{\hbar^2 l(l+1)}^{=\Gamma^2}}{2\underbrace{\mu R_0^2}_{=J}}} \qquad l=0,1,2,\ldots$$



v prvem približku je tole konst. (pri velikih l ne velja več)
$\Rightarrow$ tedaj bolje vzeti $1/R_0^2 \to 1/\langle R^2\rangle$

Ocena (red velikosti):

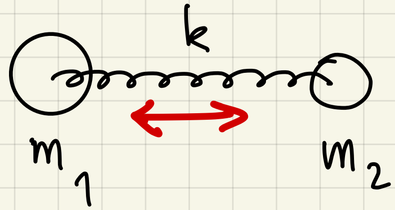
molekula H_2: $\mu = m_H/2 \approx 469\ \mathrm{MeV}/c^2$
$R_0 \approx 0.07$ nm)

$$\frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} \approx 7\cdot 10^{-3}\,\mathrm{eV} \quad (\text{še pomnožimo z } l(l+1))$$

Tipično $$\boxed{\frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} = \mathcal{O}\left(10^{-4}\text{–}10^{-3}\,\mathrm{eV}\right)}$$

ROTACIJE
(daljni IR ali mikrovalovi)

Vibracija



→ Molekulske vibracije = 1d LHO!

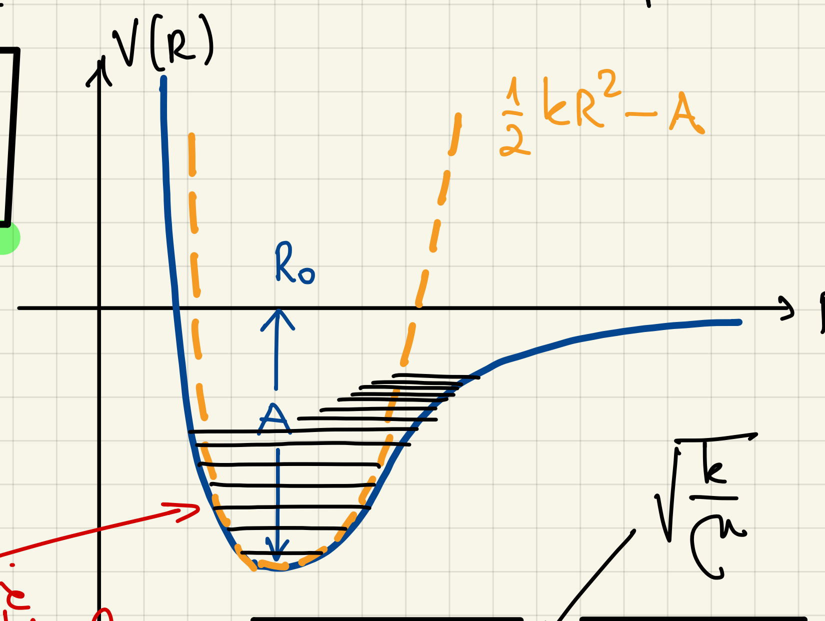
SSE: po analogiji s H atomom pišemo $U(R) = R\,F(R)$ in dobimo

$$-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2U(R)}{dR^2}}_{\text{kinet. del}} + \underbrace{V(R)\,U(R)}_{\text{potencial. del}} = E_{vib}\,U(R)$$

Odličen opis dobimo, če si namesto $V(R) = \frac{1}{2}kR^2$ izberemo nekaj bolj realističnega: najbolj priljubljena oblika je

Morse

$$\boxed{V(R) = A\left[e^{-2a(R-R_0)} - 2e^{-a(R-R_0)}\right]}$$



$$\boxed{E_{vib} = O\left(10^{-1}\,eV\right)}$$

pri nižjih vibrac. ekscitacijah je harmonski približek čisto v redu $\Rightarrow$

$$\boxed{E_{vib} = \hbar\omega_0\left(n + 1/2\right)}$$

$\sqrt{\frac{k}{\mu}}$

vibracijsko KŠ

Spektri molekul (dvoatomnih)

I = čisti rotacijski prehodi ($\Delta l = \pm 1$), brez spremembe vibracijskega ali elektronskega stanja

značilne $\Delta E \approx 10^{-3}\,\mathrm{eV}$

II = rotacijsko-vibracijski prehodi z $\Delta n = \pm 1$ in $\Delta l = \pm 1$

značilni $\Delta E \approx 10^{-1}\,\mathrm{eV}$

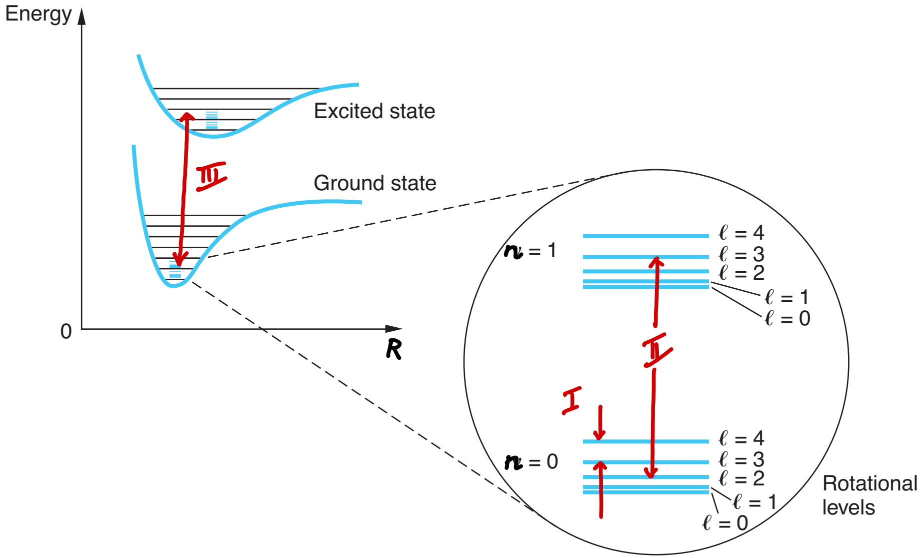
III = elektronski prehodi (z možnim dodatkom I in II)

značilni $\Delta E \approx 10\,\mathrm{eV}$

opomba: potenciala $V(R)$ sta drugačne oblike pri osnovnem in vzbujenih stanjih

... drug R_0

... druga konst. vzmeti K, itd.


Energy
Excited state
III
Ground state
0
R
n = 1
ℓ = 4
ℓ = 3
ℓ = 2
ℓ = 1
ℓ = 0
II
I
n = 0
ℓ = 4
ℓ = 3
ℓ = 2
ℓ = 1
ℓ = 0
Rotational levels

Energija splošnega molekulskega nivoja:

$$E = \underbrace{E_{el}}_{\text{(elektronski prispevek)}} + \underbrace{\hbar\omega_0}_{\text{značilna vibrac. en.}}\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2}}_{= B \text{ (= značilna rotac. en.)}} l(l+1)$$

Prehodi I

Ti zahtevajo, da ima molekula neničeln $\vec{p}_e$! H_2 ne gre! LiF je OK!

Izbirno pravilo: $\Delta l = \pm 1$

Absorpcija: $l \to l+1$ ⇒ energije prehodov so

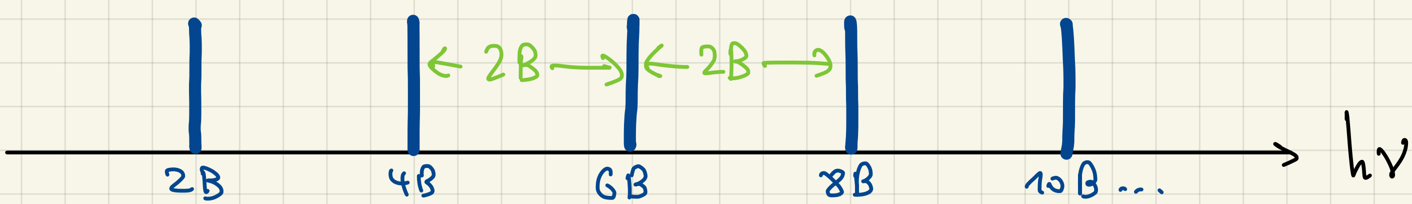
$$h\nu = B\left[(l+1)(l+2) - l(l+1)\right] = 2B(l+1)$$

Emisija: $l \to l-1$ ⇒ energija prehoda je

$$h\nu = B\left[l(l+1) - (l-1)l\right] = 2Bl$$

→ V obeh primerih se energije prehodov spreminjajo linearno z l

⇒ spektralne črte ekvidistantne, s frekv. razmikom $\Delta\nu = 2B/h$

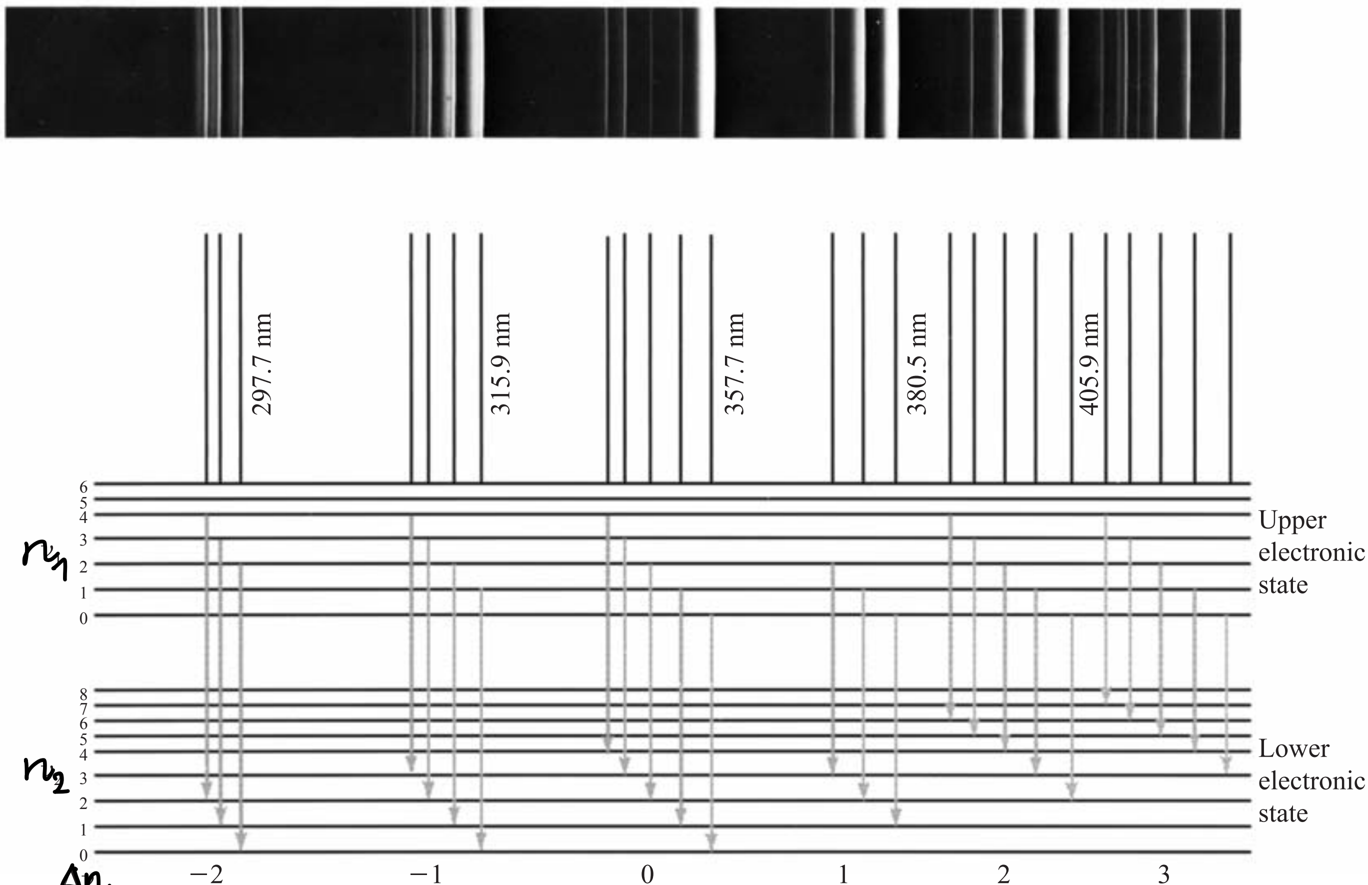


npr. $l \to l+1$: $0 \to 1$ $1 \to 2$ $2 \to 3$ $3 \to 4$ ...

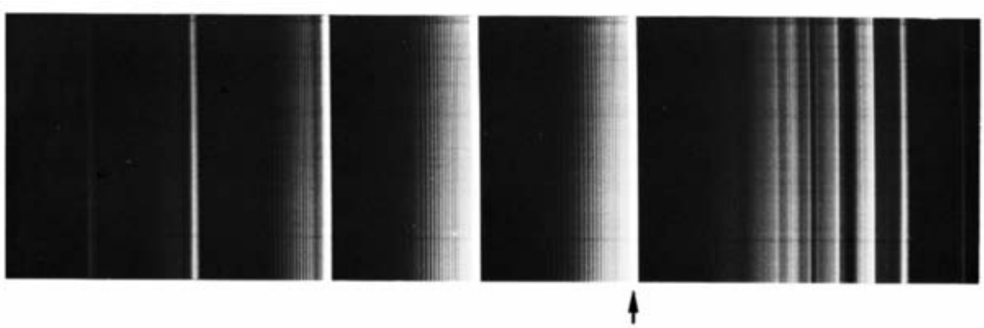
⇒ od tod lahko določimo R_0! Ker je $B = \hbar^2/2\mu R_0^2 \to R_0$

merimo (= odčitamo iz spektra)

Del emisijskega spektra N_2
(a) Prehodi med vibracijskimi nivoji dveh elektronskih stanj
(b) povečava dela slike (a): fina struktura zaradi rotacijskih stanj



(*a*)



(*b*)

Prehodi II

Vibrac. prehodi v homonukleami dvoatomni molekuli (npr. H_2) ne morejo poteči brez sočasne spremembe el. stanja, lahko pa se zgodijo v molekuli s $\vec{p}_e \neq 0$ (npr. LiF) in v tem primeru sta izbirni pravili $\Delta n = 0$, $\Delta l = \pm 1$.

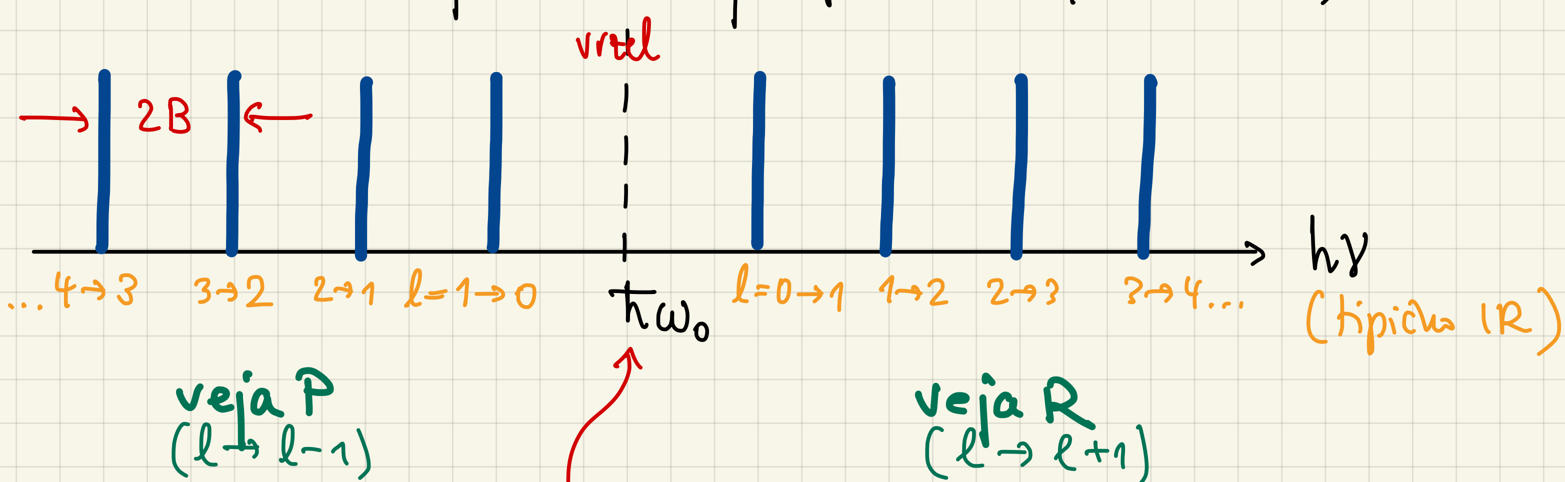
Absorpcija: $n \to n+1$ in $l \to l+1$ (npr. $n=0 \to n=1$)

$$\text{Energ. razlika} = h\nu_R = \hbar\omega_0 (1+\cancel{\tfrac{1}{2}}) + B(l+1)(l+2) - \hbar\omega_0 \cancel{\tfrac{1}{2}} - Bl(l+1)$$
$$= \hbar\omega_0 + 2B(l+1) \qquad l = 0, 1, 2, \ldots$$

ali: $n \to n+1$ in $l \to l-1$

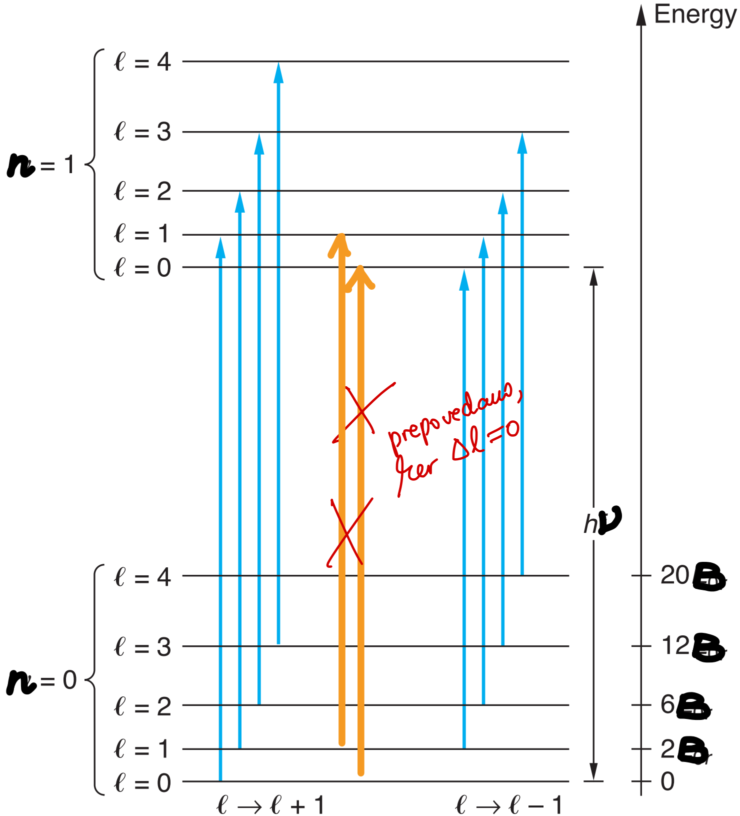
$$h\nu_P = \hbar\omega_0 (1+\cancel{\tfrac{1}{2}}) + B(l-1)l - \hbar\omega_0 \cancel{\tfrac{1}{2}} - Bl(l+1)$$
$$= \hbar\omega_0 - 2Bl \qquad l = 1, 2, 3, \ldots$$

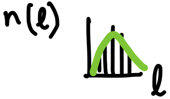
Indeksa P in R označujeta dve veji spektra (P, R branch):



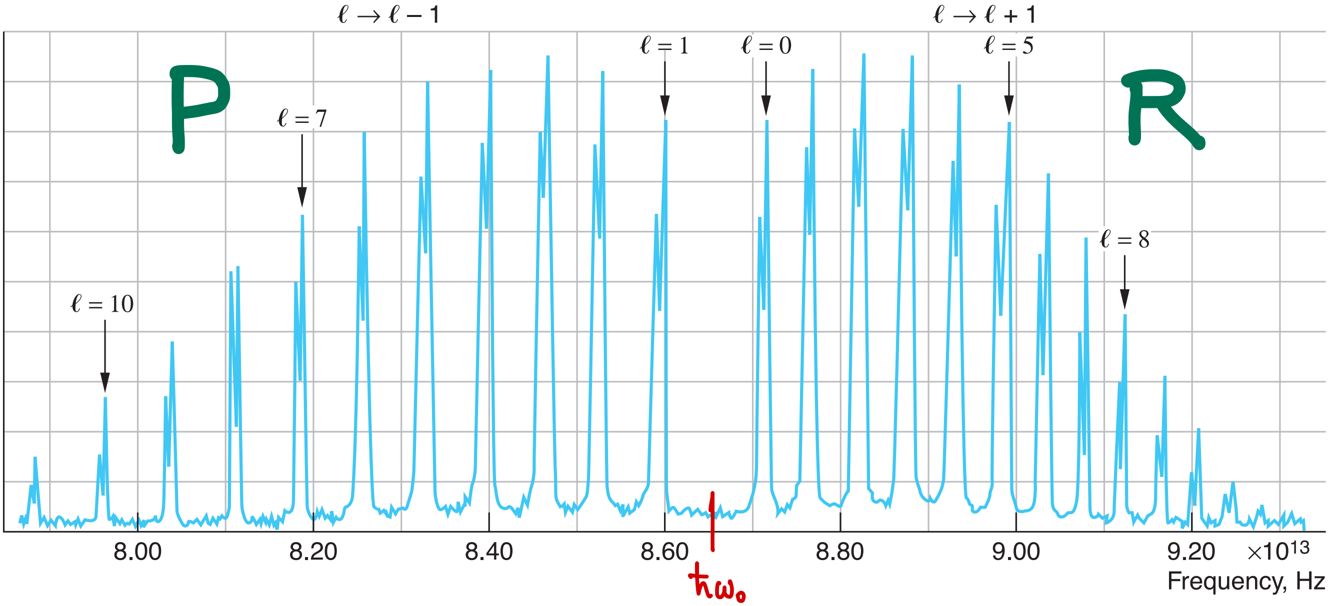
ta je dobra za določiter konst. vzmeti, kajti iz spektra → $\omega_0 = \sqrt{k/\mu}$ ← poznamo

Absorpcijski prehodi med najnižjimi vibracijsko-rotacijskimi stanji v dvoatomni molekuli





Vibracijsko-rotacijski absorpcijski spekter HCl



Nekaj opomb o spektru HCl:

* **Dvojni vrhovi:** zaradi dveh izotopov klora v naravi: ^{35}Cl in ^{37}Cl: imata rahlo različna vztrajnostna momenta (zaradi različnih μ), zato tudi različna $B = \hbar^2/2\mu R_0^2$

* **vrhovi niso enako visoki:** zaradi različnih zasedenosti nivojev pri določeni temperaturi $\rightarrow$ gl. eno od stanj nalog na izpitu 07, zbirka vaj

$$n(E_\ell) = g(\ell)\, e^{-E_\ell/k_BT}$$

E_ℓ: rotac. en. pri danem ℓ

$g(\ell)$: degeneracija $(= 2\ell+1)$

$$n(E_\ell) = (2\ell+1)\exp\left\{-\left[\underbrace{\tfrac{1}{2}\hbar\omega_0}_{\text{osn. stanje LHO }(n=0)} + \underbrace{B\ell(\ell+1)}_{\text{rotac. en. pri danem }\ell}\right]/k_BT\right\}$$

Pri sobni T stanje z $\ell=0$ ni najbolj gosto populirano!

če bi ta spekter pojmoval zvezno $(n=n(\ell))$

$dn/d\ell = 0 \rightarrow$ mi bo povedalo ℓ_{max} (kjer porazdelitev doseže vrh)

$$\rightarrow \ell_{max} = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{4k_BT}{\hbar^2/\mu R}} - 1\right)$$

za HCl pri sobni T $(k_BT \approx 1/40\ \text{eV})$ dobimo $\ell_{max} \approx 3$.

Prehodi: III

Poljuben nivo ima energijo $E = E_{el} + \hbar\omega_0(n+1/2) + B\,l(l+1)$

Toda ω_0 in B nista enaka v začetnem in končnem stanju!

$$h\nu_{ev} = E_{el}(\alpha') - E_{el}(\alpha) + \hbar\omega_0'(n'+\tfrac{1}{2}) - \hbar\omega_0(n+\tfrac{1}{2})$$

↳ večino energ. razlike pri prehodu določita el. in vibrac. stanje

KŠ, ki karakterizirajo (lahko jih je več) elektronska stanja

ω_0, ω_0' = vibrac. frekvenci za "zg./sp." stanje
α, n = KŠ za "spodnje"
α', n' = KŠ za "zgornje" stanje

Še rotacija $(\Delta l = \pm 1)$:

$$h\nu_R = h\nu_{ev} + B'(l+1)(l+2) - B\,l(l+1) \qquad l = 0,1,2,\ldots \quad (l \to l+1)$$

$$h\nu_P = h\nu_{ev} + B'\,l(l-1) - B\,l(l+1) \qquad l = 1,2,3,\ldots \quad (l \to l-1)$$

Toda ker zdaj $B \neq B'$ se kvadratični členi (l^2) ne krajšajo
$\Rightarrow$ spekter ni več sestavljen iz ekvidistančnih črt.

$$h\nu_R = h\nu_{ev} + (B'-B)\,l^2 + (3B'-B)\,l + 2B' \qquad (a)$$

$$h\nu_P = h\nu_{ev} + (B'-B)\,l^2 - (B'+B)\,l \qquad (b)$$

Samo za občutek, da vidimo, kaj se godi: enačbi (a) in (b) prepišem v delo

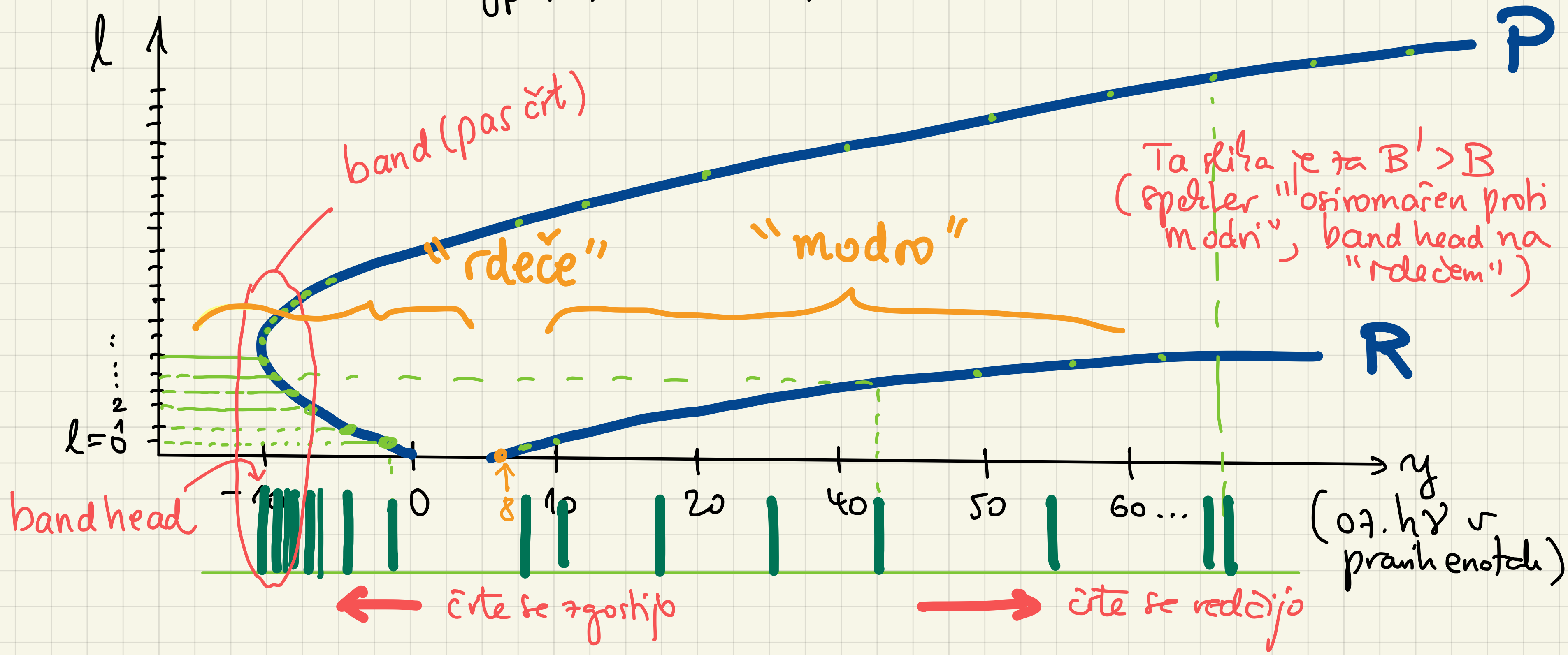
(a) $$y_R(l) = 100\left(\frac{\nu_R}{\nu_{ev}} - 1\right) = (b'-b)\,l^2 + (3b'-b)\,l + 2b'$$

(b) $$y_P(l) = 100\left(\frac{\nu_P}{\nu_{ev}} - 1\right) = (b'-b)\,l^2 - (b'+b)\,l$$

kjer je $b = 100B/h\nu_{ev}$ $\quad b' = 100B'/h\nu_{ev}$

Vzemimo tipični vrednosti $b=3$, $b'=4$, tako da je

$$y_R(l) = l^2 + 9l + \underline{8}$$
$$y_P(l) = l^2 - 7l$$



To je to!

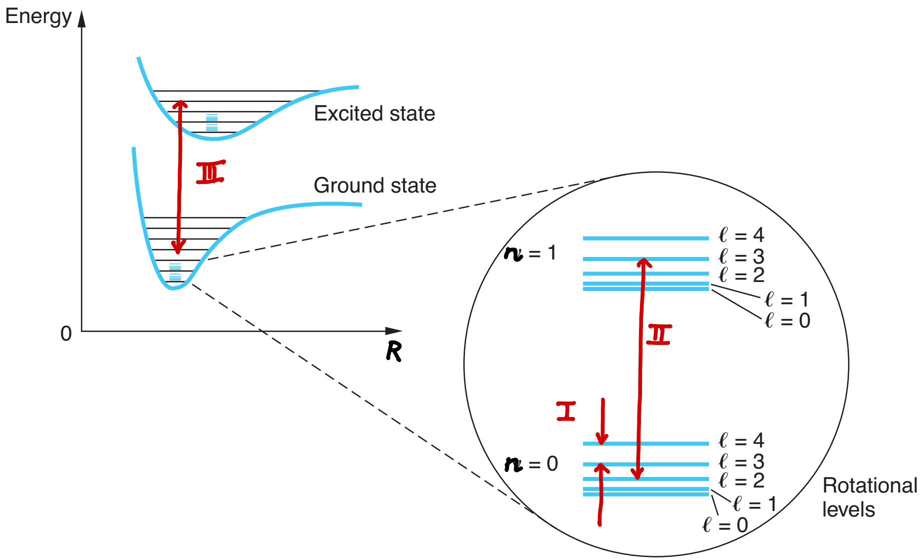
Spektri molekul (dvoatomnih) ... gl. sliko na naslednji strani

I = čisti rotacijski ($\Delta l = \pm 1$), brez spremembe vibracijskega ali el. stanja
značilno $\Delta E \approx 10^{-3}$ eV

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 možnim dodatnim rotacijskim ali vibracijskim)
značilni $\Delta E \approx 10$ eV

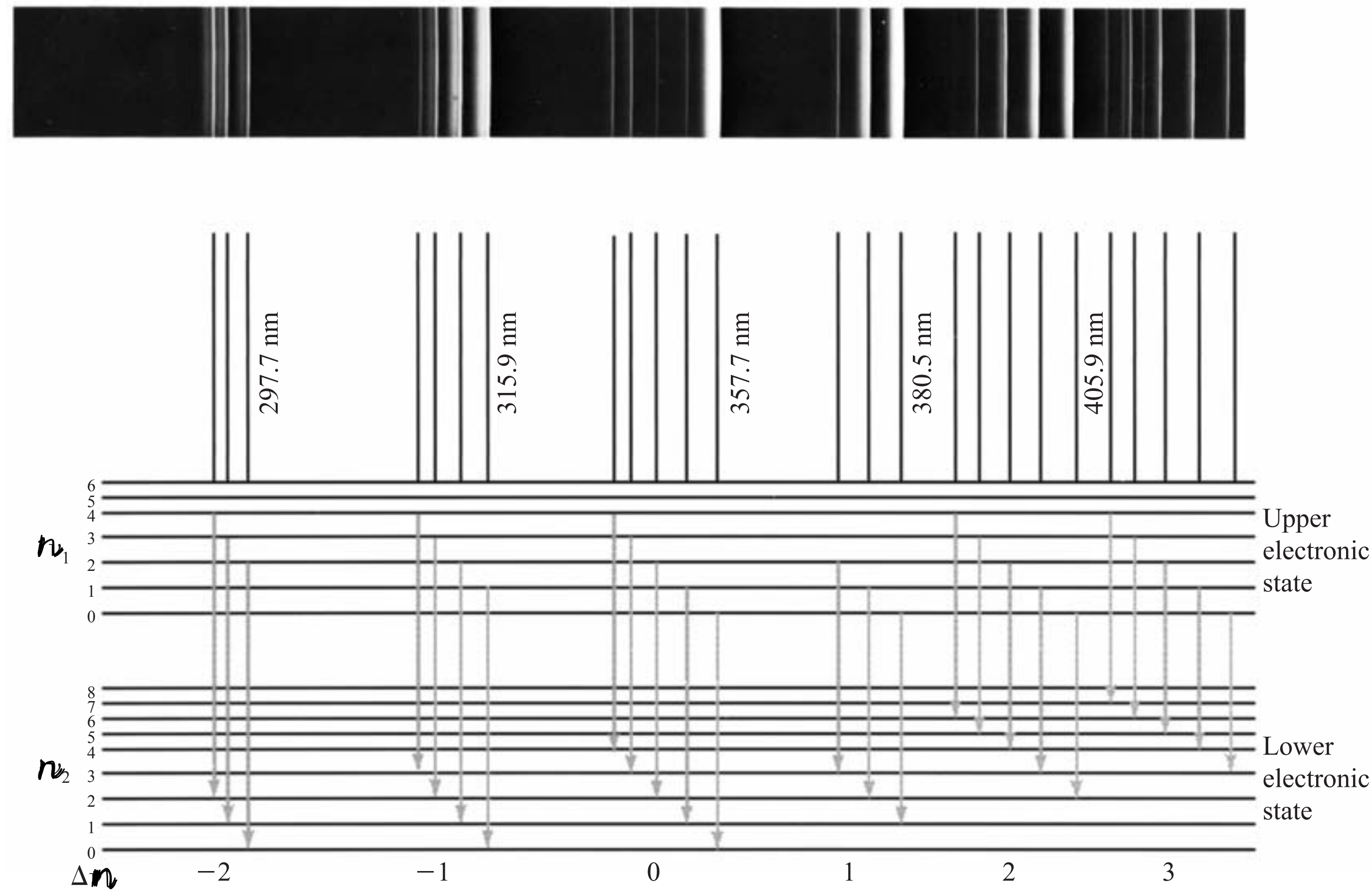
opomba: potencialna funkcija za vzbujena stanja ($V(R)$) je v splošnem drugačna od tiste za osnovno stanje
... drug R_0
... druga konst. vzmeti


Energy
Excited state
Ground state
0
R
III
n = 1
n = 0
ℓ = 4
ℓ = 3
ℓ = 2
ℓ = 1
ℓ = 0
ℓ = 4
ℓ = 3
ℓ = 2
ℓ = 1
ℓ = 0
II
I
Rotational levels

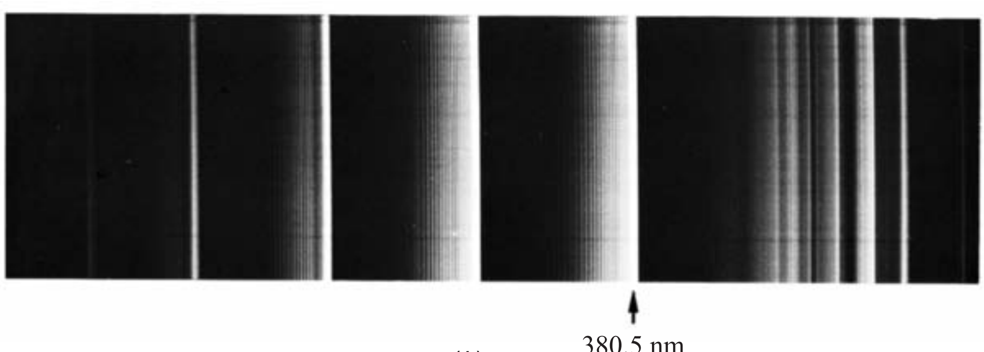
Del emisijskega spektra N_2

(a) Prehodi med vibracijskimi nivoji dveh elektronskih stanj

(b) povečava dela slike (a): fina struktura zaradi rotacijskih stanj



(a)



(b)

Energija splošnega molekulskega nivoja:

$$E = E_{el} + \underbrace{\hbar\omega_0}_{\text{karakt. vibrac. energija}}\left(n+\frac{1}{2}\right) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2}}_{B\ (=\text{karakteristična rot. energija})} l(l+1)$$

Prehodi I

Ti zahtevajo, da ima molekula neničelni $\vec{p}_e$! H_2 ne gre! LiF je OK!

Izbirno pravilo: $\Delta l = \pm 1$

Absorpcija: $l \to l+1$ $\Rightarrow$ energije prehodov:

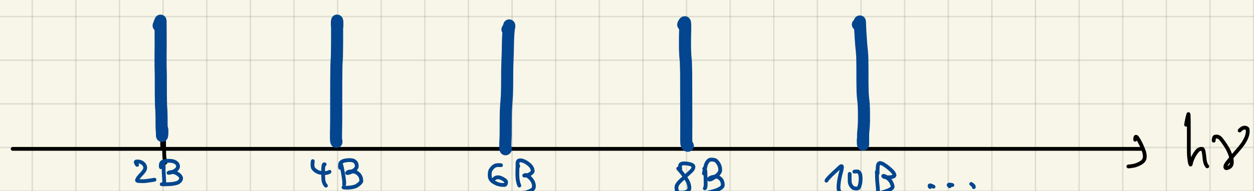
$$h\nu = B\left[(l+1)(l+2) - l(l+1)\right] = 2B(l+1)$$

Emisija: $l \to l-1$ $\Rightarrow$ energije prehodov:

$$h\nu = B\left[l(l+1) - (l-1)l\right] = 2Bl$$

V obeh primerih se frekvence spreminjajo linearno z l!

$\Rightarrow$ spektralne črte ekvidistantne, s frekvenčnim razmikom $\Delta\nu = \frac{2B}{h}$



$l \to l+1$ ➡ $0\to1$ $1\to2$ $2\to3$ $3\to4$ $4\to5$ ... itd.

To je dobro za določiti R_0, kajti $B = \hbar^2/2\mu \underline{\underline{R_0^2}}$.

Prehodi II

Vibrac. prehodi ne morejo poteči v homonuklearni (dvoat.) molekuli, npr. H_2, če ni sočasno še spremembe el. stanja. Lahko pa se zgodijo v molekulah s permanentnim $\vec{p}_e$, npr. LiF, in v tem primeru sta izbirni pravili

$$\Delta n = \pm 1 \quad \text{in} \quad \Delta l = \pm 1$$

Absorpcija: $\Delta n = +1$ in $l \to l+1$

Energ. razlika (osnovno: $n=0$):

$$h\nu_R = \hbar\omega_0\left(1+\cancel{\tfrac{1}{2}}\right) + B(l+1)(l+2) - \hbar\omega_0\cancel{\tfrac{1}{2}} - Bl(l+1)$$

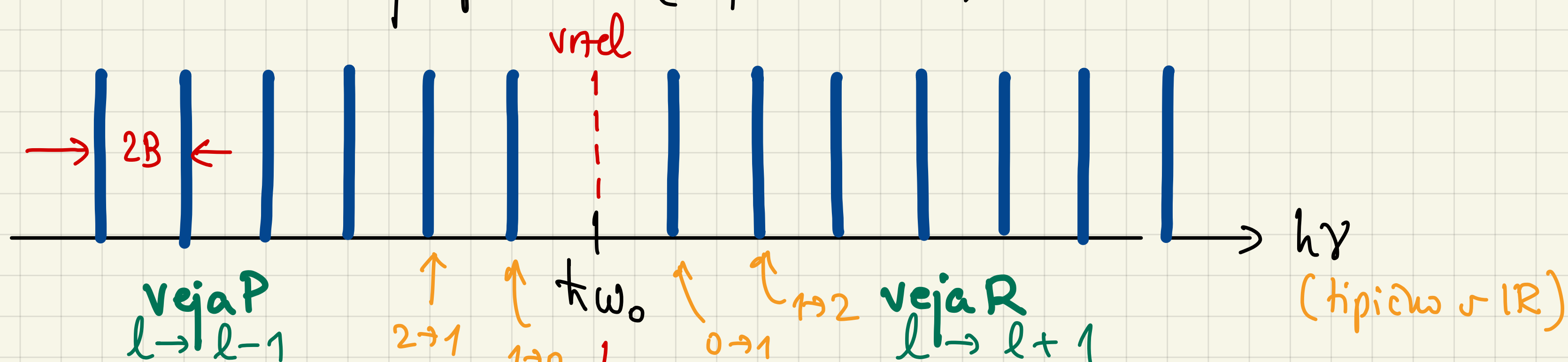
$$= \hbar\omega_0 - 2B(l+1) \qquad l = 0, 1, 2, \ldots$$

ali $\Delta n = +1$ in $l \to l-1$

$$h\nu_P = \hbar\omega_0\left(1+\cancel{\tfrac{1}{2}}\right) + B(l-1)l - \hbar\omega_0\cancel{\tfrac{1}{2}} - Bl(l+1)$$

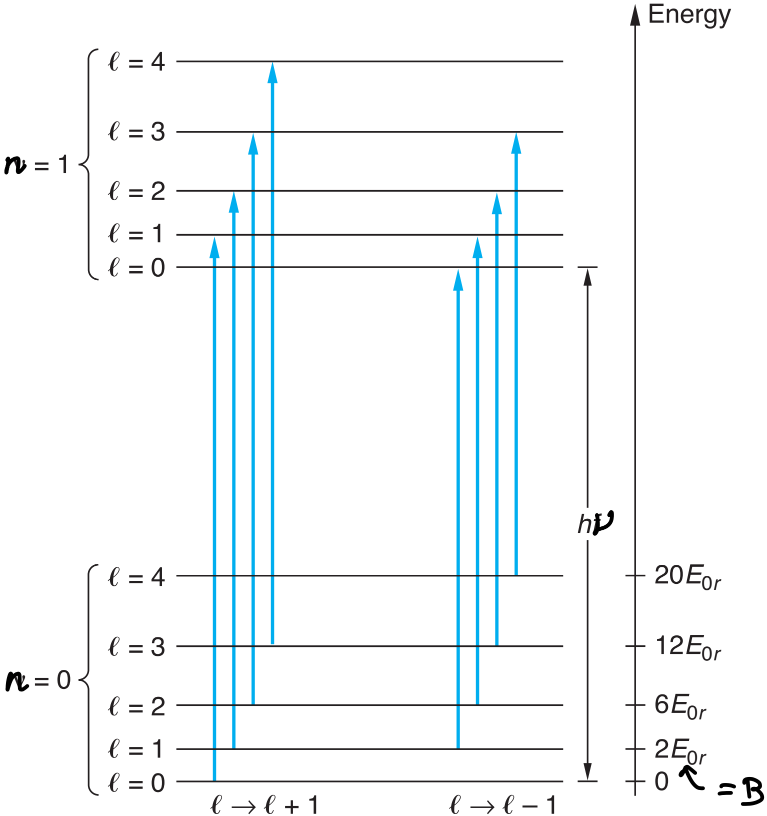
$$= \hbar\omega_0 - 2Bl \qquad l = 1, 2, 3, \ldots$$

Izmerimo P in R: dve veji spektra (P, R branch):



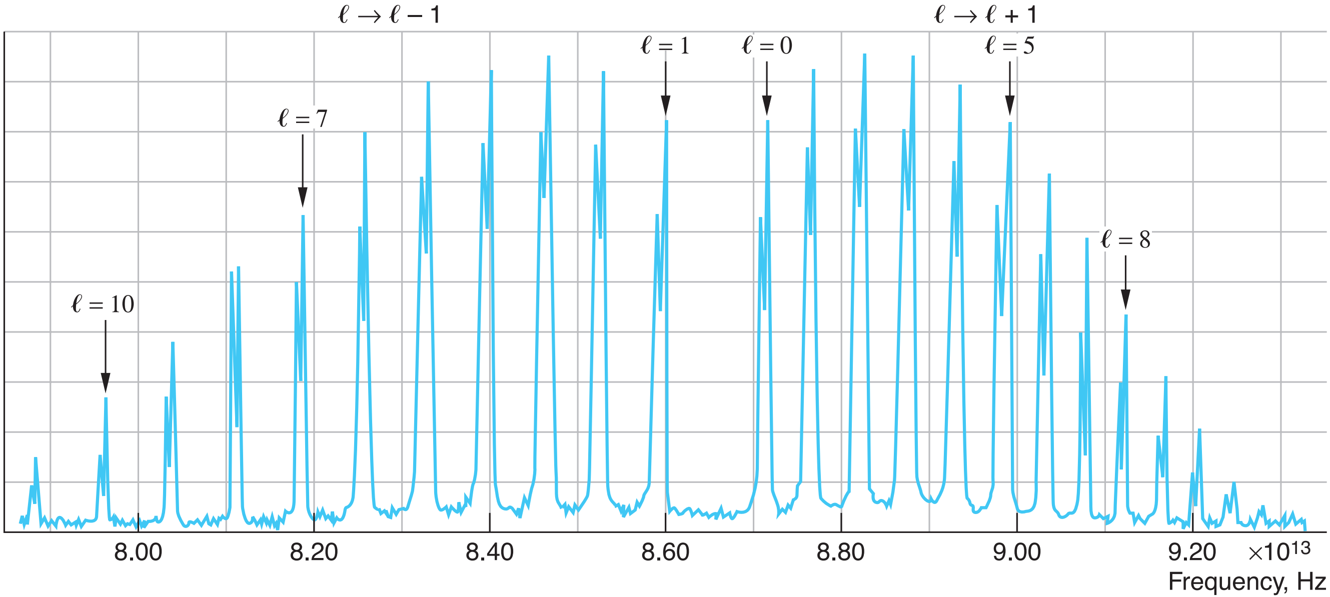
To je dobro za določiti konst. "vzmeti", kajti $\omega_0 = \sqrt{k/\mu}$ ← to vemo

Absorpcijski prehodi med najnižjimi vibracijsko-rotacijskimi stanji v dvoatomni molekuli



→ gl. vaje in stare izpite

Vibracijsko-rotacijski absorpcijski spekter HCl



Prehodi III

$$h\nu_R = E'_{el} - E_{el} + \hbar\omega_0'\left(n'+\tfrac{1}{2}\right) - \hbar\omega_0\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + B'(l+1)(l+2) - Bl(l+1)$$

$$l = 0, 1, 2, \ldots$$

$$h\nu_P = \text{———''———} + B'l(l-1) - Bl(l+1)$$

$$l = 1, 2, 3, \ldots$$

Ker je $B \neq B'$, se kvadratični členi v l ne pokrajšajo

$\Rightarrow$ spektri niso več ekvidistantni ...

$\blacksquare$