204002375

Rok Žitko

KVANTNE IN RAČUNALNIŠKE TEHNOLOGIJE

DMFA – založništvo
Ljubljana 2017

53 ŽITKO, R.
Kvantne...

N 2040002375/25.3.19

CIP – Kataložni zapis o publikaciji
Narodna in univerzitetna knjižnica, Ljubljana

530.145(075.8)

ŽITKO, Rok, 1978–
Kvantne in računalniške tehnologije / Rok Žitko. – Ljubljana: DMFA – založništvo, 2017. – (Zbirka izbranih poglavij iz fizike, ISSN 1408-0451; 51)

ISBN 978-961-212-278-2

288461312

Predgovor

Namen učbenika je dodiplomskim študentom naravoslovnih in tehničnih ved z osnovnim znanjem matematike in fizike predstaviti osnove kvantne mehanike in fizike trdnih snovi, ter tako omogočiti razumevanje delovanja in izdelave sodobnih in prihajajočih računalniških in komunikacijskih naprav, senzorjev in bodočih kvantnih tehnologij. Nivo obravnave osnovnih pojavov in zakonitosti je dokaj podroben, vendar brez strogih dokazov in dolgih izpeljav. Kljub potrebi po vpeljavi številnih novih matematičnih pojmov, predvsem pri obravnavi kvantne teorije, je poudarek na fizikalnih pojavih in njihovi interpretaciji, manj pa na matematičnem formalizmu. Pomembni pojmi so zapisani v *nagnjeni pisavi*, ko se pojavijo prvič.

Kazalo

1 Nihanje in valovanje **11**

1.1 Sistem, stanje, enačbe gibanja 11
1.2 Nihanje 12
1.3 Kristalni oscilatorji 14
1.4 Linearnost 14
1.5 Eulerjeva enačba in polarni zapis 16
1.6 O merjenju in merilnikih 17
1.7 Sklopljeni nihali in problem lastnih vrednosti 18
1.8 Valovanje 19
1.9 Valovna funkcija 20
1.10 Izpeljava valovne enačbe 21
1.11 Ravni val 23
1.12 Struna 24
1.13 Načelo superpozicije 26
1.14 Interferenca 26
1.15 Youngov poskus 28
1.16 Utripanje in valovni paket 29

2 Snov in sevanje **31**

2.1 Zgodovinski pregled do začetka 20. stoletja 31
2.2 Začetek moderne fizike 33
2.3 Kvantna polja 34
2.4 Dualnost delec-valovanje 35
2.5 Standardni model in osnovni delci 36
2.6 Fermioni 37
2.7 Bozoni 38
2.8 Temna snov in temna energija 38
2.9 Ohranitev naboja in umeritvene simetrije 38
2.10 Svetloba 39
2.11 Toplotno sevanje 40
2.12 Foton 42
2.13 Fotoefekt 43
2.14 Sevalni tlak 44

2.15 Comptonovo sipanje . . . 44

3 Kvantna mehanika **47**
3.1 Vektorski prostor . . . 47
3.2 Skalarni produkt . . . 48
3.3 Bra-ket (Diracov) zapis . . . 50
3.4 Hilbertov prostor . . . 50
3.5 Dvonivojski sistem . . . 50
3.6 Spin . . . 51
3.7 Sternov in Gerlachov eksperiment . . . 52
3.8 Verjetnostna interpretacija . . . 53
3.9 Meritve v klasični in v kvantni mehaniki . . . 54
3.10 Opazljivke in operatorji . . . 55
3.11 Hermitska konjugacija . . . 56
3.12 Operatorji za spin . . . 57
3.13 Lastna stanja, lastne vrednosti . . . 57
3.14 Bornovo pravilo . . . 58
3.15 Faze verjetnostnih amplitud . . . 60
3.16 Kubit . . . 61
3.17 Kolaps valovne funkcije . . . 62
3.18 Preizkuševalec bomb . . . 63
3.19 Izrek o prepovedi kloniranja . . . 64
3.20 Schrödingerjeva enačba in stacionarna stanja . . . 64
3.21 Dinamika dvonivojskega sistema . . . 65

4 Kvantno računanje in komuniciranje **69**
4.1 Klasični računalniki . . . 69
4.2 Kvantni računalniki . . . 69
4.3 Sestavljeni sistemi in tenzorski produkt . . . 70
4.4 Sistem več kubitov . . . 72
4.5 Meritve v večkubitnih sistemih . . . 73
4.6 Bellova stanja in kvantna prepletenost . . . 74
4.7 Unitarnost in časovni potek . . . 75
4.8 Kvantna vezja . . . 76
4.9 Enokubitna kvantna vrata . . . 77
4.10 Večkubitna kvantna vrata . . . 78
4.11 Holevov izrek . . . 80
4.12 Supergosto kodiranje . . . 81
4.13 Kvantna teleportacija . . . 82
4.14 Kvantni paralelizem . . . 83
4.15 Shorov algoritem . . . 84
4.16 Groverjev algoritem . . . 84

5 Kvantni delci **85**
5.1 De Brogliejeva zveza . . . 85
5.2 Valovna funkcija . . . 87
5.3 Schrödingerjeva enačba za valovno funkcijo . . . 87
5.4 Operatorji za valovne funkcije . . . 88
5.5 Prosti delec in ravni val . . . 89
5.6 Operator gibalne količine in tok delcev . . . 90
5.7 Delec v potencialu . . . 91
5.8 Vezana stanja . . . 92
5.9 Potencialne jame . . . 92
5.9.1 Neskončno globoka kvadratna potencialna jama . . . 93
5.9.2 Končno globoka kvadratna potencialna jama . . . 95
5.9.3 Parabolična potencialna jama (kvantno harmonično nihalo) . . . 97
5.10 Gibanje elektronov skozi prepreke . . . 98
5.10.1 Potencialni skok . . . 98
5.10.2 Potencialna plast . . . 101
5.10.3 Tunelski pojav . . . 103

6 Kvantna nedoločenost **105**
6.1 Merske napake . . . 105
6.2 Interferenca in uklon . . . 106
6.3 Verjetnostna gostota . . . 107
6.4 Heisenbergova neenačba . . . 109
6.5 Nedoločenost za vezana stanja . . . 110
6.6 Združljivost in komplementarnost . . . 111
6.7 Kvantna radirka . . . 112
6.8 Bellova neenačba in njena kršitev v kvantni mehaniki . . . 113

7 Kvantni računalniki **117**
7.1 Dekoherenca . . . 117
7.2 Kvantno odpravljanje napak . . . 119
7.3 Ioni v elektromagnetni pasti . . . 120
7.4 Magnetna resonanca . . . 123
7.5 SQUID . . . 124
7.5.1 Superprevodnost . . . 124
7.5.2 Josephsonov pojav . . . 125
7.5.3 SQUID in kubit na osnovi fluksa . . . 126
7.6 Kvantne pike . . . 127
7.7 Drugi predlogi . . . 127

8 Elektronska mikroskopija **129**
8.1 Vrstični elektronski mikroskop (SEM) . . . 129
8.2 Transmisijski elektronski mikroskop (TEM) . . . 131
8.3 Vrstični tunelski mikroskop (STM) . . . 131

9 Elektroni v snovi 133
9.1 Bohrov model atoma . . . 133
9.2 Atomske orbitale . . . 135
9.3 Periodni sistem . . . 137
9.4 Kemijske vezi . . . 139
9.4.1 Ionska vez . . . 139
9.4.2 Kovalentna vez . . . 140
9.5 Kristali . . . 142
9.6 Računska kemija . . . 143
9.7 Določanje kristalne strukture . . . 144
9.8 Struktura elektronskih pasov . . . 145

10 Kovine 147
10.1 Model prostih elektronov . . . 147
10.2 Gostota stanj . . . 149
10.3 Fermi-Diracova porazdelitev . . . 149
10.4 Gibanje elektrona v zunanjem polju . . . 150
10.5 Transportni pojavi, susceptibilnost . . . 151
10.6 Ohmov zakon . . . 152
10.7 Difuzijsko prevajanje . . . 153
10.8 Kvantno koherentno prevajanje . . . 155

11 Polprevodniki in izolatorji 157
11.1 Intrinzični polprevodniki, vrzeli . . . 158
11.2 Temperaturna odvisnost gostote nosilcev naboja . . . 159
11.3 Gibljivost in prevodnost . . . 160
11.4 Dopirani polprevodniki . . . 161
11.4.1 Polprevodnik n . . . 161
11.4.2 Polprevodnik p . . . 162
11.5 Magnetni polprevodniki . . . 163
11.6 Izolatorji . . . 163
11.7 Topološki izolatorji . . . 165

12 Polprevodniške naprave 167
12.1 Hallova sonda . . . 167
12.2 Fotoprevodnik . . . 168
12.3 Dioda . . . 169
12.4 Fotodioda . . . 172
12.5 Svetleča dioda . . . 173
12.6 Tranzistor na učinek polja . . . 174
12.7 Tehnologija CMOS . . . 175
12.8 Laser . . . 176
12.8.1 Stimulirano sevanje . . . 176
12.8.2 Polprevodniški laser . . . 178
12.8.3 Koherenca . . . 179

13 Heterostrukture 181
13.1 Izdelava heterostruktur . . . 181
13.2 Heterospoj p-n . . . 183
13.3 Nizkodimenzionalne strukture . . . 184
13.3.1 Dvodimenzionalni sistemi . . . 184
13.3.2 Enodimenzionalni sistemi . . . 185
13.4 Kvantna jama . . . 186
13.5 Kvantna žica . . . 186
13.6 Kvantna pika . . . 187
13.7 Kvantni Hallov pojav . . . 187
13.8 Laserji iz heterostruktur . . . 188

14 Nanotehnologija 191
14.1 Prevodnost nanoskopskih naprav . . . 191
14.2 Kvantni točkovni stik . . . 193
14.3 Enoelektronski tranzistor . . . 194
14.4 Sklopljene kvantne pike . . . 196
14.5 Grafen . . . 197
14.6 Ogljikove nanocevke . . . 198
14.7 Molekularna elektronika . . . 199

15 Magnetizem 201
15.1 Magnetno polje . . . 201
15.2 Feromagnetizem . . . 202
15.3 Feromagnetni materiali . . . 204
15.4 Magnetna anizotropija . . . 204
15.5 Spintronika . . . 205
15.6 Magnetoupornost . . . 206
15.7 Spinski ventil . . . 207
15.8 Spinski tranzistor . . . 207

16 Hranjenje podatkov 209
16.1 Magnetni pomnilniki: trdi diski in magnetni trakovi . . . 209
16.1.1 Superparamagnetna meja . . . 209
16.1.2 Magnetne plošče . . . 210
16.1.3 Bralno pisalna glava . . . 211
16.1.4 Trajnost zapisa na magnetnih nosilcih . . . 212
16.2 Polprevodniški trajni pomnilniki . . . 212
16.3 Optični pomnilniki . . . 214
16.4 Spintronski pomnilniki: MRAM . . . 215
16.5 Prihajajoče tehnologije . . . 216

1

Nihanje in valovanje

1.1 Sistem, stanje, enačbe gibanja

Fizikalni *sistem* imenujemo obravnavani objekt (telo, množico teles, stroj, elektronsko komponento, snov, ki zapolnjuje del prostora, ipd.), ki ga razmejimo od njegove *okolice*. *Izoliran* sistem s svojo okolico ni na noben način povezan, *zaprt* sistem lahko z okolico izmenjuje toploto, *odprt* sistem pa toploto in snov. Sistem opišemo tako, da podamo njegovo *stanje*. To so, denimo, položaji in hitrosti njegovih sestavnih delcev, električne napetosti in tokovi v vezju, pritisk plina, ipd. Stanje je popoln opis sistema, torej vsebuje zadosti podatkov, da lahko vsaj načeloma izračunamo obnašanje sistema v prihodnosti.

Število prostostnih stopenj je število koordinat, s katerimi opredelimo položaje teles v sistemu. Če imamo N teles, ki se lahko gibljejo brez kakršnih koli omejitev, je na primer potrebnih $3N$ koordinat. Ločimo zvezne prostostne stopnje (zaloga vrednosti so realna števila) od diskretnih (zaloga vrednosti so cela števila). Primer diskretnega sistema je klecno stikalo, ki ima dve stanji (0 = kontakt razklenjen, 1 = kontakt sklenjen).

Časovni potek opisujejo *enačbe gibanja*, ki so običajno diferencialne enačbe. Najbolj znan primer je Newtonov zakon gibanja,

$$F = ma, \tag{1.1}$$

kjer je F vsota zunanjih sil, ki delujejo na telo, m masa telesa, a pa posledični pospešek.

Primer: Gibanje vzmetnega nihala (masa na vijačni vzmeti) lahko opišemo z odmikom mase od ravnovesne lege, $x(t)$. Sistem ima eno samo prostostno stopnjo. Popoln opis trenutnega stanja ob začetnem času $t = 0$ je položaj $x(0)$ in hitrost $v(0)$, pri čemer je hitrost odvod položaja po času, $v = \mathrm{d}x/\mathrm{d}t$. S pomočjo Newtonovega zakona gibanja,

$$F = ma = m\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}, \tag{1.2}$$

lahko iz poznane sile F izračunamo časovni potek $x(t)$, saj je Newtonov zakon navadna diferencialna enačba drugega reda, za katero potrebujemo ravno dva začetna pogoja, začetni položaj $x(0)$ in začetno hitrost $v(0) = \mathrm{d}x/\mathrm{d}t(0)$. Silo F dobimo iz *Hookovega zakona*, po katerem je sila vzmeti sorazmerna z raztezkom vzmeti, ki je enak odmiku iz ravnovesja:

$$F = -kx, \tag{1.3}$$

kjer je k *konstanta vzmeti*. Dobimo torej enačbo

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} + kx = 0. \tag{1.4}$$

Rešimo jo lahko numerično z računalnikom. Čas diskretiziramo: zaporedni trenutki naj bodo zamaknjeni za kratek interval Δt, indeksiramo pa jih z indeksom j, tako da velja $t = j\Delta t$, $j = 0, 1, 2, \ldots$ Hitrost zapišemo z diferenco namesto z odvodom, saj velja $\mathrm{d}f/\mathrm{d}z \approx [f(z+\Delta z) - f(z)]/\Delta z$:

$$v(t = j\Delta t) = \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t}, \tag{1.5}$$

pospešek pa kot

$$a(t = j\Delta t) = \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t}. \tag{1.6}$$

Potem lahko računamo iterativno:

$$\begin{aligned} x_{j+1} &= x_j + v_j\Delta t, \\ v_{j+1} &= v_j + [-kx_j/m]\,\Delta t, \end{aligned} \tag{1.7}$$

pri čemer smo časovne argumente t nadomestili z ustreznimi diskretnimi trenutki j: $x_j = x(t = j\Delta t)$, $v_j = v(t = j\Delta t)$.

1.2 Nihanje

Ponavljajoče se (periodične) pojave imenujemo tudi *nihanje* ali *oscilacija*. Mehanska nihala so, denimo, matematično nihalo (točkasta masa na lahki vrvici), fizično nihalo (togo telo, prosto gibljivo okoli osi skozi telo) in vzmetno nihalo, glej sliko 1.1. Preprost nihajni krog v elektroniki je vezje LC, tokokrog iz tuljave in kondenzatorja.

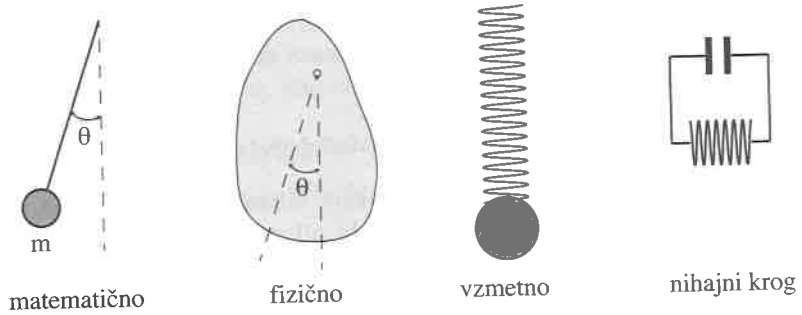
Nihanje si lahko predstavljamo kot pretakanje potencialne energije v kinetično in obratno. Celotna energija se pri tem ohranja.

Če je gibanje povsem periodično, velja za vsak t

$$x(t) = x(t+T), \tag{1.8}$$

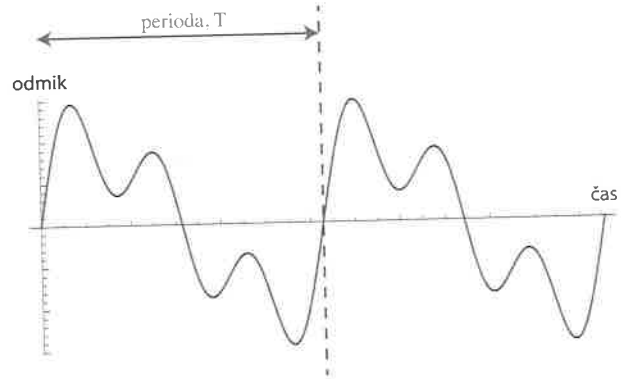
glej sliko 1.2, saj se po času T gibanje identično ponovi. Čas T imenujemo *perioda* ali *nihajni čas*, merimo ga v enotah s (sekunda). *Frekvenco* (število ponovitev na enoto časa)

$$\nu = \frac{1}{T} \tag{1.9}$$



Slika 1.1. Preprosta nihala.

merimo v enotah Hz (Hertz). Nihalo, ki je prepuščeno samo sebi (torej ga ne vzbujamo od zunaj), niha z *lastno nihajno frekvenco*. Če nihalo vzbujamo, niha s *frekvenco vzbujanja*. Če nihalo vzbujamo ravno z njegovo lastno frekvenco, zaniha z zelo veliko amplitudo. Ta pojav se imenuje *resonanca*.



Slika 1.2. Časovni potek periodičnega nihanja.

Zelo pomembna so *harmonična nihala*, ki nihajo kot

$$x(t) = x_0 \sin(2\pi\nu t + \phi_0). \tag{1.10}$$

x_0 je *amplituda* nihanja, izraz $\phi = 2\pi\nu t + \phi_0$, ki nastopa kot argument funkcije sinus, imenujemo *faza*, pri čemer je ϕ_0 *fazni zamik*. Bistvena lastnost harmoničnega nihanja je, da se amplituda in frekvenca s časom ne spreminjata. Nihanje lahko zapišemo tudi s funkcijo kosinus: spomnimo se, da velja $\cos(x - \pi/2) = \sin(x)$, torej gre le za drugačen dogovor o faznem zamiku ϕ_0.

V fiziki se bolj pogosto računa s *krožno frekvenco* $\omega = 2\pi\nu$, v tehniki pa z običajno frekvenco ν, zato je potrebno nekaj previdnosti. Ime »krožna frekvenca« izvira iz dejstva, da je argument trigonometrijskih funkcij kot, izražen v enotah radian; faktor 2π je ravno polni kot (360 kotnih stopinj), saj ena perioda ustreza enemu vrtljaju.

Pravo periodično gibanje, za katerega velja $x(t) = x(t+T)$, je zgolj matematična idealizacija dejanskega gibanja. Ob prisotnosti *dušenja* (zaradi trenja, zračnega upora, električnega upora, ipd.) pogosto velja

$$x(t) = x_0 \mathrm{e}^{-t/\tau} \sin(\omega t + \phi_0), \tag{1.11}$$

kjer je τ *relaksacijski čas*. Gre torej za sinusno nihanje z eksponentno upadajočo amplitudo nihanja: ko mine čas 5τ, amplituda nihanja pade pod procent začetne. Celotna energija eksponentno upada. Če želimo, da se nihanje ohrani v prisotnosti dušenja, je potrebno nihalu dovajati energijo, sicer se nihanje izniha.

1.3 Kristalni oscilatorji

V digitalni elektroniki se za pripravo ure (takta) uporablja kristalne oscilatorje, izdelane iz kremena (kvarca). Kristal kremena med dvema kovinskima elektrodama zaniha s svojo lastno frekvenco, ki je natančno določena z geometrijo kristala, za kar poskrbijo ob izdelavi. Ker je frekvenca rahlo odvisna tudi od temperature, se oscilatorje izdela tako, da ima odvisnost frekvence od temperature ekstrem blizu delovne temperature elektronske naprave. Velja recimo

$$\nu = \nu_0 \left[1 - 4 \times 10^{-8} \left(T[^\circ\mathrm{C}] - 25\,^\circ\mathrm{C}\right)^2\right]. \tag{1.12}$$

Če je temperatura blizu 25 °C, v prvem približku ni temperaturnih popravkov, če pa je temperatura za 10 °C previsoka, bo takšna ura imela v enem letu 2 minuti zamude. Če je natančnost pomembna, se kvarčni oscilator temperaturno stabilizira točno pri temperaturi, kjer je odvod $\mathrm{d}\nu/\mathrm{d}T$ enak nič; to so ure OCXO (angl. oven-controlled crystal oscillator). Še večjo natančnost se dobi z atomskimi urami, na primer tistimi, ki jih na krovu nosijo sateliti sistema GPS.

S kvarčnimi oscilatorji se lahko ustvari nihanja s frekvencami od nekaj kHz do nekaj 100 MHz. Še višje frekvence, kot jih potrebujemo v sodobnih računalnikih, pa dobimo s pomnoževanjem z uporabo fazno sklenjenih zank, vezij PLL (angl. phase-locked loop).

1.4 Linearnost

Obravnava *majhnih odmikov* od ravnovesja razkrije, zakaj so nihanja zelo pogosto harmonična. Ravnovesno točko definiramo kot položaj sistema, v katerem nanj ne deluje sila. Naj bo ravnovesje v izhodišču, $x = 0$. Tam ima potencialna energija sistema, $U(x)$, minimum. Naj velja $U(0) = 0$. Potencialno energijo določimo tako, da izračunamo delo, ki ga ob premiku od izhodiščne do končne točke opravi zunanja sila. Od tod sledi, da lahko silo, ki telo vrača nazaj proti ravnovesni legi, izračunamo tudi kot odvod potencialne energije $U(x)$ po položaju telesa, x. Velja torej

$$F(x) = -\frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}. \tag{1.13}$$

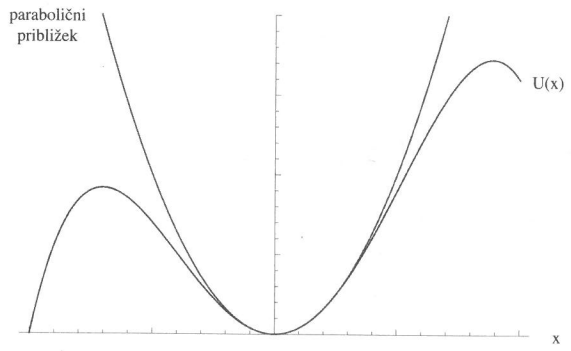
Predznak minus sledi iz tega, da sila deluje v smeri manjše potencialne energije. V bližini minimuma je potencialna energija $U(x)$ približno kvadratna funkcija, lahko pa ima popravke višjega reda v x, glej sliko 1.3. Naredimo Taylorjev razvoj funkcije v potenčno vrsto:

$$U(x) \approx (k/2)x^2 + (k_2/3)x^3 + (k_3/4)x^4 + \ldots \tag{1.14}$$

Tu smo upoštevali izbiro $U(0) = 0$ in dejstvo, da je v minimumu prvi odvod enak nič. Za silo F tedaj velja

$$F(x) \approx -kx - k_2x^2 - k_3x^3 + \ldots \tag{1.15}$$

Če je x zelo majhen, je pomemben le prvi člen in dobimo že omenjeni Hookov zakon $F(x) = -kx$. Naredili smo *linearizacijo*: pri majhnih odmikih so nelinearni popravki zanemarljivi (manjši je x, bolje to velja) in sile so linearno odvisne od odmikov. Rešitev gibalnih enačb je tedaj harmonično nihanje. Če moramo v izrazu za silo upoštevati tudi člene višjega reda, imamo opravka z *nelinearnimi pojavi* in nihanje ni harmonično.



Slika 1.3. Potencialna energija $U(x)$ z minimumom pri $x = 0$ in parabolični (kvadratični) približek, ki se dobro prilega potencialu v bližini minimuma.

Primer: Newtonova enačba za vzmetno nihalo se po linearizaciji zapiše:

$$m\ddot{x} = -kx, \tag{1.16}$$

kjer s piko nad simbolom označujemo odvod po času, $\dot{f} = \mathrm{d}f/\mathrm{d}t$, dvojna pika pa je drugi odvod, $\ddot{f} = \mathrm{d}^2f/\mathrm{d}t^2$. Enačbo nihala lahko zapišemo tudi kot

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0, \tag{1.17}$$

kjer je

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{1.18}$$

lastna (krožna) frekvenca nihala. Rešitev je harmonično nihanje:

$$x(t) = x_0 \sin(\omega_0 t + \phi_0), \tag{1.19}$$

kar zlahka preverimo, če izraz (1.19) vstavimo v enačbo (1.16).

Primer: Matematično nihalo ima enačbo gibanja

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l}\sin\theta = 0. \tag{1.20}$$

Tu je g pospešek težnosti, l dolžina vrvice, θ pa kot med vrvico in navpičnico (glej sliko 1.1). Funkcijo sinus dobimo, ker je potrebno silo težnosti projecirati na tangentno smer nihala. Taylorjev razvoj funkcije sinus je

$$\sin\theta \approx \theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \ldots, \tag{1.21}$$

torej je sila oblike $F(\theta) \approx -k\theta - k_3\theta^3$. Pri majhnih θ obdržimo le prvi člen in dobimo rešitev s krožno frekvenco

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l}}. \tag{1.22}$$

Za majhne amplitude približno velja izokronizem (frekvenca je neodvisna od amplitude) in nihanje je skoraj harmonično, pri večjih amplitudah pa opazimo, da se perioda nekoliko podaljša in da nihanje ni harmonično.

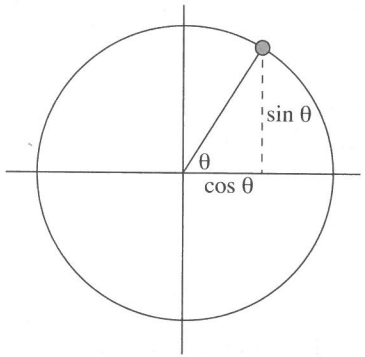
1.5 Eulerjeva enačba in polarni zapis

Linearne diferencialne enačbe lahko rešujemo z uporabo naslednjega trika. Eulerjeva enačba se glasi (glej tudi sliko 1.4)

$$\mathrm{e}^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta, \tag{1.23}$$

in obratno

$$\cos\theta = \frac{\mathrm{e}^{i\theta} + \mathrm{e}^{-i\theta}}{2}, \quad \sin\theta = \frac{\mathrm{e}^{i\theta} - \mathrm{e}^{-i\theta}}{2i}, \tag{1.24}$$



Slika 1.4. K izpeljavi Eulerjeve enačbe: koordinati točke $z = \mathrm{e}^{i\theta}$ v kompleksni ravnini sta $\mathrm{Re}\, z = \cos\theta$ in $\mathrm{Im}\, z = \sin\theta$.

torej lahko trigonometrijske funkcije zapišemo z eksponentno funkcijo, s katero je laže računati. Realno spremenljivko x zato izrazimo kot realni del kompleksne, $x = \mathrm{Re}\, z$, in enačbo harmoničnega nihala zapišemo kot

$$\ddot{z} + \omega_0^2 z = 0, \tag{1.25}$$

saj je realni del te enačbe enak začetni enačbi $\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0$. Rešujemo z nastavkom

$$z(t) = A\mathrm{e}^{ict}, \tag{1.26}$$

kjer je A poljubna kompleksna konstanta, c pa bomo določili v nadaljevanju. Odvajanje eksponentnih funkcij je zelo preprosto: $\dot{z} = icA\mathrm{e}^{ict}$ in $\ddot{z} = (ic)^2 A\mathrm{e}^{ict} = -c^2 A\mathrm{e}^{ict}$. Vstavimo v enačbo in določimo neznanko: $c = \omega_0$. A imenujemo *kompleksna amplituda*, ki se v *polarnem zapisu* glasi:

$$A = x_0 \mathrm{e}^{i\phi_0}. \tag{1.27}$$

x_0 je realna amplituda, ϕ_0 pa fazni zamik. Kompleksna amplituda A povsem opredeljuje gibanje harmoničnega nihala z dano frekvenco. Realna rešitev je tedaj

$$x(t) = \mathrm{Re}\, z(t) = \mathrm{Re}\left[x_0 \mathrm{e}^{i\phi_0}\mathrm{e}^{i\omega_0 t}\right] = x_0\cos(\omega_0 t + \phi_0). \tag{1.28}$$

1.6 O merjenju in merilnikih

Če je *odzivni čas* merilnika krajši, kot je tipični čas gibanja (perioda), potem lahko časovni potek neposredno opazujemo. V takšnem primeru lahko iz meritve takoj izluščimo amplitudo x_0. Pogosto pa imamo opravka z zelo hitrimi pojavi, ki jim merilnik ne more točno slediti. V takšnih primerih merimo raje *intenziteto* oziroma *jakost*, to je kvadrat amplitude, ${x_0}^2$.

Lep primer poznamo iz elektronike. Pri razmeroma nizkih frekvencah lahko obliko signala opazujemo na ekranu osciloskopa, kjer amplitudo nihanja takoj razberemo iz slike. Pri frekvencah, ki presegajo pasovno širino osciloskopa, pa moramo postopati drugače: signal priključimo na upornik in o amplitudi toka sklepamo posredno preko ohmskih izgub, ki so sorazmerne z RI^2, kjer je R upornost, I pa amplituda izmeničnega toka.

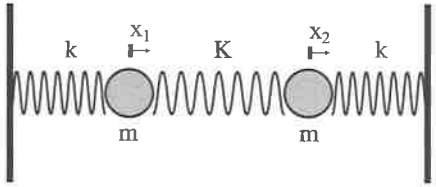
Kvadrat amplitude lahko zapišemo kot

$${x_0}^2 = A^* A = |A|^2, \tag{1.29}$$

pri čemer z zvezdico desno zgoraj ob simbolu označujemo kompleksno konjugiranje ($z^* = a - ib$, če $z = a + ib$), z navpičnimi črtami pa absolutno vrednost (rečemo tudi modul ali dolžina, $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$, če $z = a + ib$). Intenziteta je torej sorazmerna s kvadratom absolutne vrednosti kompleksne amplitude.

1.7 Sklopljeni nihali in problem lastnih vrednosti

Oglejmo si problem dveh sklopljenih nihal, shematsko prikazan na sliki 1.5. Pri tem se bomo seznanili z nekaj matematičnimi pojmi in prijemi iz linearne algebre, ki bodo zelo koristni v nadaljevanju. To je tudi podlaga za izpeljavo valovne enačbe v razdelku 1.10.



Slika 1.5. Vzmetni nihali, sklopljeni z dodatno vzmetjo.

Enačbi nihal sta

$$\begin{aligned} -kx_1 - K(x_1 - x_2) &= m\ddot{x}_1, \\ -kx_2 - K(x_2 - x_1) &= m\ddot{x}_2, \end{aligned} \tag{1.30}$$

saj na vsako maso m delujeta dve vzmeti s konstantama k in K. Enačbi lahko zapišemo tudi v matrični obliki kot

$$\begin{bmatrix} -k-K & K \\ K & -k-K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = m \begin{bmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{bmatrix}. \tag{1.31}$$

Zapišemo $x_1 = \operatorname{Re} z_1$, $x_2 = \operatorname{Re} z_2$, in po analogiji z rešitvijo za eno nihalo poskusimo nastavek

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 e^{i\omega t} \\ A_2 e^{i\omega t} \end{bmatrix}. \tag{1.32}$$

Sledi

$$\begin{bmatrix} -k-K & K \\ K & -k-K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = -m\omega^2 \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}. \tag{1.33}$$

Iščemo rešitev, kjer obe nihali nihata z isto frekvenco, ki pa jo moramo še določiti kot del rešitve. V matematiki takšni vrsti naloge rečemo *problem lastnih vrednosti*. Neznanke so frekvenca ω ter amplitudi A_1 in A_2. Uvedemo označbi $\omega_0^2 = k/m$ in $\Omega^2 = K/m$, upoštevamo zgornji nastavek ter preuredimo:

$$\begin{bmatrix} \omega^2 - \omega_0^2 - \Omega^2 & \Omega^2 \\ \Omega^2 & \omega^2 - \omega_0^2 - \Omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = 0. \tag{1.34}$$

Homogen sistem enačb $M\mathbf{x} = 0$ ima netrivialno rešitev[1], če je determinanta matrike koeficientov $|M| = \det M$ enaka nič. Determinanta 2×2 matrike je

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc.$$

[1] Trivialna rešitev je $x_1 = x_2 = 0$.

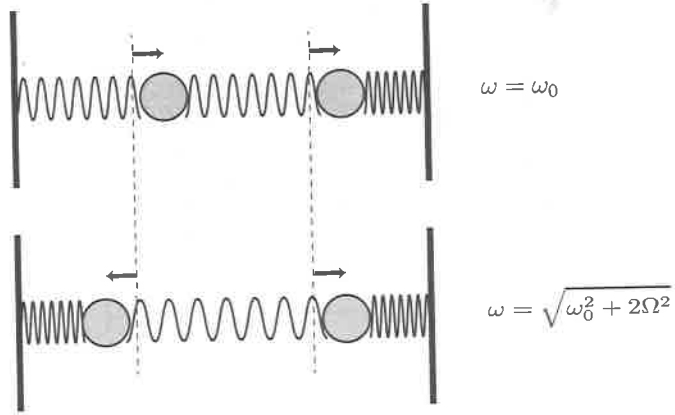
Zapišemo torej

$$(\omega^2 - \omega_0^2 - \Omega^2)^2 - \Omega^4 = 0. \tag{1.35}$$

Rešitvi sta

$$\omega = \omega_0 \quad \text{in} \quad \omega = \sqrt{\omega_0^2 + 2\Omega^2}. \tag{1.36}$$

Če rešitev vstavimo v matriko in določimo koeficiente, ugotovimo da prvi rešitvi ustreza vektor amplitud $A_1 = A_2$, torej masi se premikata v isto smer z isto amplitudo, drugi pa $A_1 = -A_2$, ko se masi premikata v nasprotnih si smereh. Pri prvem *lastnem nihajnem načinu* se vzmet, ki masi povezuje, ne razteguje, zato frekvenca ostane enaka kot pri nesklopljenih nihalih, ω_0, v drugem načinu pa raztegujemo tudi to dodatno vzmet in frekvenca je višja, glej sliko 1.6.



Slika 1.6. Lastna nihajna načina sklopljenih nihal.

S podobno vrsto naloge (a z veliko večjim številom spremenljivk, tudi v milijonih in milijardah) se pogosto srečamo v strojništvu in gradbeništvu, recimo pri določanju mehanskih napetosti, odpornosti na mehanske vibracije, ipd. Področje se imenuje *računska mehanika* in pogosto terja uporabo računalniških gruč in superračunalnikov.

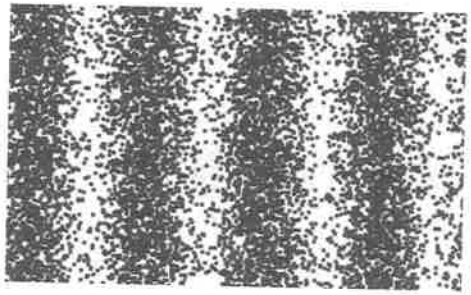
Omenimo še, da imajo dvojna nihala v primeru nelinearnosti *kaotične rešitve*, ki so zelo občutljive na začetne pogoje. Tovrstnimi pojavi so v domeni teorije *dinamičnih sistemov* in teorije *kaosa*.

1.8 Valovanje

Valovanje imenujemo nihajoče motnje, ki se širijo po prostoru. Mehanska valovanja opazimo na vodni gladini, v vrveh in strunah. Zvok je valovanje, ki se širi po zraku, v trdnih snoveh in v tleh (potresi). Med elektromagnetna valovanja prištevamo svetlobo in radijske valove. V nadaljevanju se bomo srečali s kvantnomehanskim valovanjem. Gravitacijski valovi, prvič zaznani leta 2015, so motnje v geometriji prostora-časa, ki se lahko širijo po vesolju, nastanejo pa ob kataklizmičnih kozmičnih dogodkih, kot je trk dveh črnih lukenj.

Tudi potovanje električnih signalov po žicah moramo pri visokih frekvencah (v območju več GHz) obravnavati kot valovni pojav. To je izjemno pomembno v sodobni hitri digitalni elektroniki, kjer so danes pomembne celo dolžine nogic čipov. To je poleg omejitev nadaljnje miniaturizacije zaradi tehničnih, ekonomskih in čedalje bolj tudi fizikalnih razlogov še dodatni vzrok, zakaj je prišlo do zasičenja najvišjih frekvenc delovanja mikroprocesorjev: širjenje signalov znotraj integriranih vezij je postal izjemno zapleten in težko rešljiv problem mikrovalovne tehnike.

Motnje nosijo energijo in gibalno količino. Prvo je še posebej zaznavno pri svetlobi (segrevanje), drugo pa pri potresih (sunek sile).

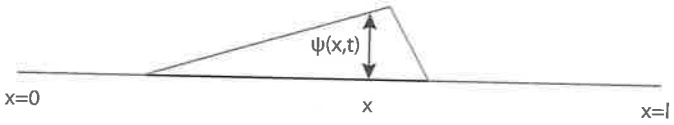


Slika 1.7. Shematski prikaz širjenja zvoka po zraku v obliki zgoščin in razredčin plina. Posamezne točke predstavljajo molekule.

Valovanja se pogosto širijo v *mediju*, torej v nekem sredstvu ali snovi (zvok, na primer, po zraku, glej sliko 1.7). Pri valovanju se medij celokupno ne premakne, saj se posamezni delčki medija po prehodu potujoče motnje vrnejo v ravnovesno lego. Lep primer je zvočno valovanje, kjer se gmota zraka celokupno ne premakne ob prehodu zgoščin. Zvočnik ni ventilator!

1.9 Valovna funkcija

Valovanje opišemo s funkcijo, ki opisuje odmik od ravnovesne lege v odvisnosti od kraja in časa. Označimo jo z $\psi(x,t)$, če se omejimo na eno prostorsko dimenzijo. Če opisujemo, denimo, struno, potem $\psi(x,t)$ pomeni odmik strune na mestu x ob času t, glej sliko 1.8. V tem se opis valovanja razlikuje od nihanja, kjer smo imeli opravka z eno samo spremenljivko, časom.



Slika 1.8. Struna, ki ima pred deformacijo dolžino l. Z $\psi(x,t)$ označimo prečni odmik strune od njene ravnovesne lege na mestu x ob času t. Odmik je narisan močno pretirano.

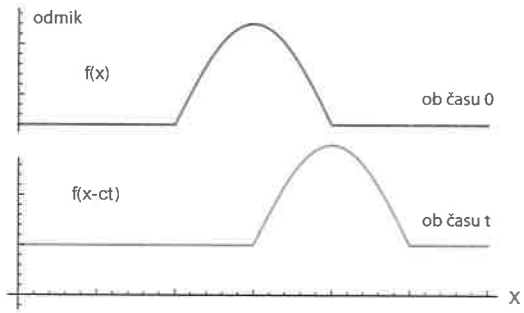
Če fiksiramo čas, $t = t_1$, je $\psi(x, t = t_1)$ funkcija zgolj spremenljivke x, grafu pa rečemo *trenutna slika*. To je slika, ki bi jo dobili, če bi posneli fotografijo sistema ob izbranem času t_1. Zapišemo lahko $\psi(x, t = t_1) = f(x)$, kjer funkcija f opisuje obliko motnje. Če motnja potuje s hitrostjo c, potem se v času $t_2 - t_1$ premakne za $c(t_2 - t_1)$, zato je trenutna slika ob kasnejšem času $t = t_2$ enaka $\psi(x, t = t_2) = f[x - c(t_2 - t_1)]$. V splošnem je torej

$$\psi(x,t) = f(x - ct) \tag{1.37}$$

za potovanje valovanja v desno (slika 1.9) in podobno

$$\psi(x,t) = f(x + ct) \tag{1.38}$$

za potovanje v levo.



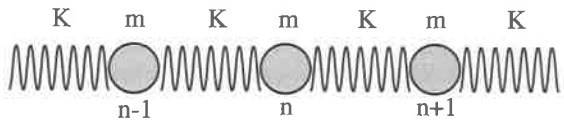
Slika 1.9. Dve trenutni sliki vala, ki potuje v desno: zgoraj ob času 0, spodaj ob kasnejšem času t.

1.10 Izpeljava valovne enačbe

V tem razdelku bomo izpeljali enačbo, ki opisuje širjenje valovanja po nekem mediju. Dobili bomo parcialno diferencialno enačbo, v kateri se pojavljajo odvodi tako po kraju kot po času.

Obravnavajmo dolgo verigo nihal, sklopljenih z enakimi vzmetmi, glej sliko 1.10. Mislimo si lahko, da so to atomi, ki tvorijo kos snovi. Odmik n-tega nihala iz ravnovesne lege opišemo s funkcijo $\psi_n(t)$. Za vsako nihalo velja enačba gibanja

$$-K(\psi_n - \psi_{n-1}) - K(\psi_n - \psi_{n+1}) = m\ddot{\psi}_n. \tag{1.39}$$



Slika 1.10. K izpeljavi valovne enačbe za dolgo verigo vzmetnih nihal.

Uvedemo $\omega_0^2 = K/m$ in zapišemo kot

$$\omega_0^2(\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}) = \ddot{\psi}_n. \tag{1.40}$$

V ravnovesju leži n-to nihalo na mestu $x = na$, zato lahko zapišemo tudi $\psi_n(t) = \psi(x = na, t)$. Obravnavajmo sedaj limito, ko je karakteristična razdalja motnje veliko večja od razdalj a med nihali. To pomeni, da se količina ψ na dveh sosednjih mestih le malo razlikuje. Odvod funkcije po spremenljivki x lahko zapišemo po definiciji kot

$$g'(x) = \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x} = \lim_{\delta\to 0} \frac{g(x+\delta/2) - g(x-\delta/2)}{\delta}, \tag{1.41}$$

drugi odvod pa kot

$$\begin{aligned} g''(x) = \frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}x^2} &= \lim_{\delta\to 0} \frac{[g(x+\delta) - g(x)]/\delta - [g(x) - g(x-\delta)]/\delta}{\delta} \\ &= \lim_{\delta\to 0} \frac{g(x+\delta) - 2g(x) + g(x-\delta)}{\delta^2}. \end{aligned} \tag{1.42}$$

Od tod sledi, da približno velja

$$\psi_{n+1}(t) - 2\psi_n(t) + \psi_{n-1}(t) \approx \psi''(x,t)a^2, \tag{1.43}$$

saj lahko a smatramo kot majhno količino. Uvedemo $c = \omega_0 a$, ki ima dimenzije hitrosti, in *valovno enačbo* zapišemo kot

$$c^2\psi''(x,t) = \ddot{\psi}(x,t). \tag{1.44}$$

S črtico desno zgoraj ob simbolu označujemo odvod po kraju, s piko nad simbolom pa odvod po času, kot prej, torej ta zapis pomeni

$$c^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}. \tag{1.45}$$

Z ∂ označujemo *parcialne odvode*. Denimo, $\partial\psi(x,t)/\partial x$ pomeni, da fiksiramo spremenljivko t in odvajamo funkcijo po spremenljivki x. Valovna enačba je linearna: če sta funkciji ψ_1 in ψ_2 rešitvi, potem je rešitev tudi funkcija $\psi_1 + \psi_2$.

Enačbo (1.45) lahko rešimo numerično z računalnikom. Pri tem postopamo pravzaprav obratno, kot pri njeni izpeljavi. Diskretiziramo prostor: sosednje točke so med seboj oddaljene za kratko razdaljo a, indeksiramo jih z n, tako da velja $x = na$. Tako za vsak n dobimo enačbo (1.40). Če dodatno diskretiziramo še čas, tako da velja $t = j\Delta t$, dobimo množico enačb, ki jih lahko rešujemo na enak način, kot opisano za nihalo v razdelku 1.1.

Splošna rešitev valovne enačbe je oblike

$$\psi = \psi_1(x - ct) + \psi_2(x + ct), \tag{1.46}$$

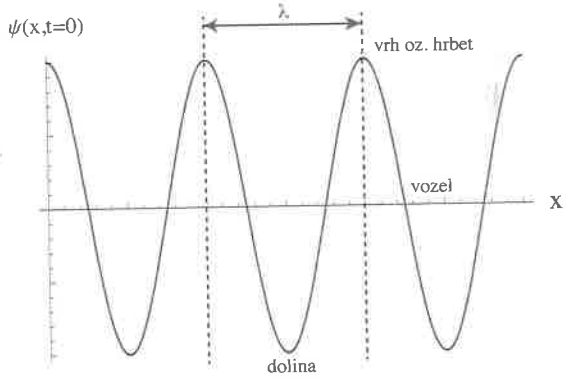
kjer sta ψ_1 in ψ_2 povsem poljubni funkciji ene spremenljivke, kar zlahka preverimo. Ugotovimo torej, da je količina $c = \omega_0 a$ v valovni enačbi hitrost valovanja.

Ker je rešitev oblike $\psi = f(x \pm ct)$, se valovi širijo brez sprememb oblike. Tudi to je posebnost linearnih sistemov. V splošnem nelinearni učinki povzročijo, da se valovi med širjenjem deformirajo. Običajno se med potjo zadušijo, včasih pa lahko s časom nastanejo tudi močne zgoščine (udarni valovi).

1.11 Ravni val

Obravnavajmo sedaj najbolj pomembno rešitev valovne enačbe, *ravni val*. To je neskončno dolg val, ki igra podobno temeljno vlogo kot harmonično gibanje pri nihalih.

Najprej poskusimo rešitev kar uganiti. To bo verjetno sinusna funkcija, saj gre za posplošitev harmoničnega nihanja. Odvisnost od kraja x in časa t mora biti v kombinaciji $x - ct$ ali $x + ct$. Pričakujemo torej izraz oblike $\psi(x,t) = A\cos[b(x - ct)]$, kjer je A amplituda, b pa neka konstanta. Poskusimo zdaj ta izraz izpeljati.



Slika 1.11. Trenutna slika ravnega vala.

Če iščemo rešitev, ki je periodična po času (kar pričakujemo za neskončno dolg val), uporabimo nastavek

$$\psi(x,t) = \phi(x)\mathrm{e}^{-i\omega t}, \tag{1.47}$$

kjer smo ponovno uporabili trik s kompleksnimi števili. Dobimo

$$c^2\phi''(x) = -\omega^2\phi(x). \tag{1.48}$$

Faktor $\mathrm{e}^{-i\omega t}$ na obeh straneh enačbe smo že krajšali. Ker je tudi enačba (1.48) za $\phi(x)$ linearna diferencialna enačba s konstantnimi koeficienti, lahko znova uporabimo eksponentni nastavek:

$$\phi(x) = A\mathrm{e}^{ikx} \tag{1.49}$$

in sledi $c^2k^2 = \omega^2$. Dobimo

$$\omega = ck. \tag{1.50}$$

Rezultat je torej $\psi = A\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$, kjer je A kompleksna faza $A = \mathcal{A}\mathrm{e}^{i\phi}$. Če obdržimo le realni del, dobimo

$$\psi(x,t) = \mathrm{Re}\left[A\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\right] = \mathcal{A}\cos(kx - \omega t + \phi). \tag{1.51}$$

Takšna rešitev se imenuje *ravni val*. Trenutna slika je funkcija kosinus, slika 1.11. Razdaljo med dvema *valovnima hrbtoma* v trenutni sliki imenujemo *valovna dolžina* λ. Ker je perioda funkcije kosinus 2π, mora veljati $k\lambda = 2\pi$. Količino

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{1.52}$$

imenujemo *valovno število*, ki ima enoto m^{-1}. To vstavimo v izraz (1.50) in dobimo pomembno zvezo med frekvenco, valovno dolžino in hitrostjo valovanja:

$$c = \lambda\nu. \tag{1.53}$$

Povsem ekvivalentno lahko zapišemo tudi kot $c = \lambda/T$. Hitrost valovanja je torej ena valovna dolžina na eno časovno periodo gibanja, kar tudi intuitivno pričakujemo.

Preverimo lahko še, da velja

$$\cos(kx - \omega t) = \cos\left[k\left(x - \frac{\omega}{k}t\right)\right] = \cos\left[k\left(x - ct\right)\right], \tag{1.54}$$

kar pomeni, da je ravni val res funkcija spremenljivke $x - ct$, kot mora veljati za poljubno rešitev, ki opisuje valovanje s hitrostjo c v desno.

Ravni val je idealizacija, saj neskončno dolgih valov v resnici ni. Je pa zelo dober približek, denimo, za *laserski žarek*.

1.12 Struna

Imejmo struno vpeto med dve nepremični točki. Za hitrost zvoka na struni velja

$$c = \sqrt{T/\mu}, \tag{1.55}$$

kjer je T mehanska napetost strune, μ pa njena linearna gostota mase, $\mu = m/l$; l je dolžina strune. Pri strunah na kitari lahko napetost T spreminjamo z vijaki na glavi instrumenta, μ pa je odvisna od debeline in vrste strune. Omenimo še, da za hitrost valovanja in zvoka na splošno velja naslednja forma

$$c = \sqrt{\frac{\text{vračanje k ravnovesju}}{\text{inercija}}}. \tag{1.56}$$

Inercija pomeni, koliko se nek objekt »upira« spremembam hitrosti, in je sorazmerna z maso.

Tudi za struno velja valovna enačba. Novost v primerjavi z zgornjo obravnavo ravnega vala je končna dolžina strune. Zato je pomembno upoštevati, kako se obravnavani sistem obnaša na svojih robovih. *Robna pogoja* na struni sta $\psi(x = 0, t) = 0$ in $\psi(x = l, t) = 0$, če je struna vpeta v točkah $x = 0$ in $x = l$ in se tam ne premika.

Iščemo časovno periodično rešitev z nastavkom $\psi(x, t) = \phi(x)\mathrm{e}^{-i\omega t}$. Dobimo enačbo

$$\phi''(x) + k^2\phi(x) = 0, \tag{1.57}$$

kjer smo upoštevali $\omega^2/c^2 = k^2$. Za krajevni del sedaj ne uporabimo eksponentnega nastavka, temveč sinusnega:

$$\phi(x) = \mathcal{A}\sin(kx). \tag{1.58}$$

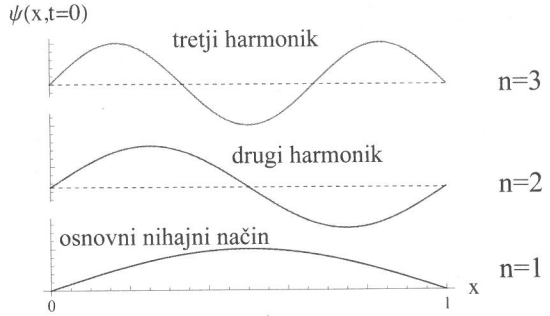
S tem je že samodejno upoštevan robni pogoj pri $x = 0$. Zaradi robnega pogoja na drugem krajišču pa mora veljati še $\sin(kl) = 0$ ali $kl = n\pi$, $n = 1, 2, \ldots$, torej

$$k = \frac{\pi}{l}n \quad \text{ali} \quad \lambda = \frac{2l}{n}. \tag{1.59}$$

Od tod sledi $\omega = ck = c\pi n/l$ ali $\nu = cn/2l$. Frekvenco

$$\nu_1 = \frac{c}{2l} \tag{1.60}$$

imenujemo *osnovna frekvenca*, tiste z $n > 1$ pa *višje harmonične frekvence*.



Slika 1.12. Stoječa valovanja na struni; trenutna slika ob času $t = 0$.

Ko vzamemo realni del, dobimo za končno rešitev

$$\psi(x, t) = \mathcal{A}\sin(kx)\cos(\omega t). \tag{1.61}$$

Dobljeni nabor rešitev imenujemo *stoječa valovanja*, slika 1.12. To so lastne rešitve enačbe, kar pomeni, da sistem, če ga ne vzbujamo od zunaj, niha kot kombinacija takšnih rešitev.

Razlika med ravnim valom in stoječim valovanjem je v robnih pogojih. Pri ravnem valu lahko rečemo, da imamo izvor v $-\infty$, ponor pa v $+\infty$. Pri stoječem valovanju pa imamo zapovedane robne pogoje v točkah, kjer je struna vpeta. Pri ravnem valu je dovoljeno poljubno valovno število k, pri stoječem valovanju pa samo nekatere točno določene vrednosti $k = \pi n/l$. S povsem analognim pojavom se bomo srečali pri kvantni mehaniki.

Nihanje strune lahko opazujemo s *stroboskopom*, pri čemer izkoristimo *vztrajnost vida*: ob vsakem blisku se slika v vizualni spomin »vtisne« in dobimo občutek gladkega gibanja navkljub dejanski diskretnosti zaporedja slik. Če je frekvenca bliskanja točno enaka frekvenci nihanja strune, izgleda, kot da je struna nepremična. Pri manjši razliki frekvenc pa izgleda, kot da se struna premika počasi v eno ali v drugo smer.

1.13 Načelo superpozicije

V linearnih sistemih velja *načelo superpozicije*. Če sta ψ_1 in ψ_2 rešitvi valovne enačbe, potem je možna rešitev tudi *linearna kombinacija* (*superpozicija*) s konstantnima koeficientoma a in b:

$$\psi(x,t) = a\psi_1(x,t) + b\psi_2(x,t). \tag{1.62}$$

To velja povsem splošno za vse linearne sisteme, ki jih opisujejo diferencialne enačbe, kjer ψ nastopa zgolj kot prva potenca, stopnje časovnih in krajevnih odvodov pa so lahko poljubne. Primeri: ψ, ψ', $\dot{\psi}$, ψ'', $\ddot{\psi}$, $\dot{\psi}'$, ipd., so dovoljeni, izrazi ψ^2 in $\psi'\psi$, $\psi'\dot{\psi}$ pa niso. Za nelinearne sisteme načelo superpozicije v splošnem ne velja in njihova obravnava je veliko bolj zapletena, ker lahko pride do novih kompleksnih pojavov. Vseeno pa načelo superpozicije vedno velja kot zelo dober približek za valovanja z majhno amplitudo, ko smemo diferencialne enačbe linearizirati.

Primer: Maxwellove enačbe v praznem prostoru so čisto linearne, pri elektromagnetnem valovanju v snovi pa so možni nelinearni efekti, ki jih lahko najlaže zaznamo z močnim laserskim žarkom: pride lahko do podvojevanja frekvenc in podobnih pojavov, ki jih matematično razumemo kot posledico enakosti $\sin\omega t \times \sin\omega t = (1-\cos 2\omega t)/2$.

1.14 Interferenca

Interferenca je pojav, tesno povezan z načelom superpozicije. Če seštejemo dve valovanji z isto frekvenco, dobimo novo valovanje z enako frekvenco, končna amplituda pa je lahko večja ali manjša od začetnih, glej sliko 1.13. Če sta valovanji v fazi (fazna razlika 0) in imata enako amplitudo, je

$$\psi = \sin(kx-\omega t) + \sin(kx-\omega t) = 2\sin(kx-\omega t). \tag{1.63}$$

To je *konstruktivna interferenca*. Če sta valovanji v nasprotni fazi (fazna razlika π), pa je

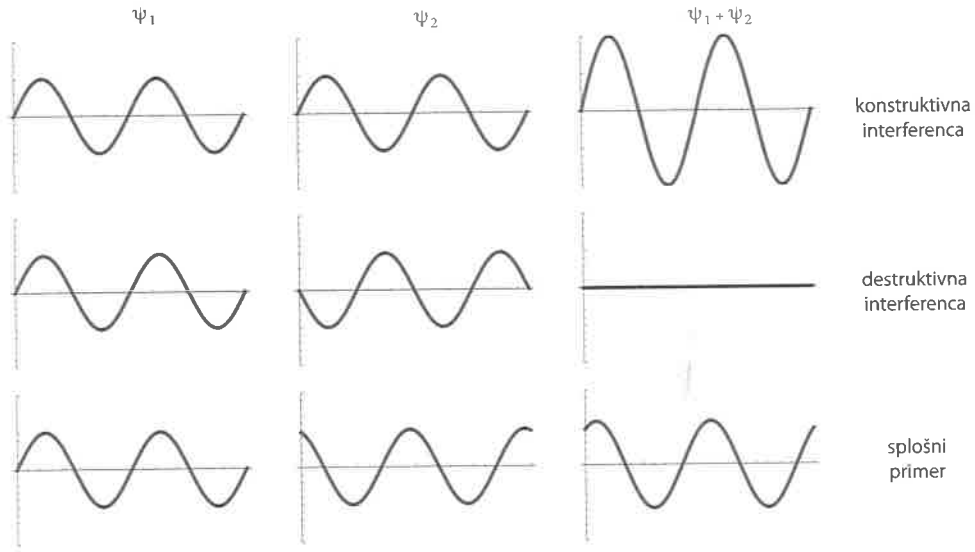
$$\psi = \sin(kx-\omega t) + \sin(kx-\omega t+\pi) = \sin(kx-\omega t) - \sin(kx-\omega t) = 0. \tag{1.64}$$

To je *destruktivna interferenca*. V splošnem za valovanji z enako amplitudo uporabimo adicijski izrek

$$\sin a + \sin b = 2\sin\frac{a+b}{2}\cos\frac{a-b}{2} \tag{1.65}$$

ali

$$\cos a + \cos b = 2\cos\frac{a+b}{2}\cos\frac{a-b}{2}. \tag{1.66}$$



Slika 1.13. Superpozicija ravnih valov lahko vodi h konstruktivni ali k destruktivni interferenci, v splošnem pa dobimo novo trigonometrijsko funkcijo z drugačno amplitudo in s premikom faze.

Primer:

$$\sin(kx-\omega t) + \sin(kx-\omega t+\phi_0) = 2\sin\left(kx-\omega t+\frac{\phi_0}{2}\right)\cos\frac{\phi_0}{2}. \tag{1.67}$$

Faktor $2\cos\frac{\phi_0}{2}$ ima vrednost med 0 in 2, odvisno od faznega zamika ϕ_0 med valovanjema. $\phi_0 = 0$ pomeni povsem konstruktivno, $\phi_0 = \pi$ pa povsem destruktivno interferenco, kar pa sta le dva skrajna primera.

Valovanje $\mathcal{A}\cos(kx-\omega t+\phi_0)$ ima kompleksno amplitudo $A = \mathcal{A}\exp(i\phi_0)$, ki ustreza neki točki v kompleksni ravnini. Valovanja lahko sestavljamo s *kazalčnimi diagrami*, pri čemer dobimo končno amplitudo kot vektorsko vsoto vseh kompleksnih amplitud. Ta geometrijski pristop je posebno pripraven za seštevanje valovanj z različnimi amplitudami, ko postane algebrajski pristop s trigonometrijskimi funkcijami preveč zapleten.

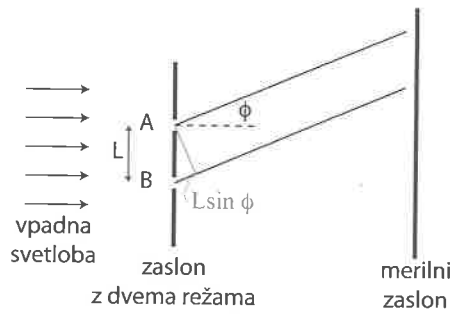
Oglejmo si linearno kombinacijo dveh potujočih valovanj, ki se širita v nasprotnih si smereh. Dobimo

$$\sin(kx-\omega t) + \sin(kx+\omega t) = 2\sin(kx)\cos(\omega t). \tag{1.68}$$

To pa je ravno rešitev za struno! Val potuje v eno smer, se odbije v točki vpetja, nato potuje v nasprotno smer, itd. Stoječe valovanje je torej interferenca dveh potujočih valovanj.

1.15 Youngov poskus

Obravnavajmo interferenco dveh ravnih valovanj. Takšen poskus je okoli leta 1800 s svetlobo opravil Young, kar je bil eden izmed prvih prepričljivih dokazov, da je svetloba valovni pojav, zato ima ta eksperiment zelo pomembno vlogo v zgodovini fizike.



Slika 1.14. Razlika poti med valovanjema skozi odprtini na zelo (neskončno) oddaljenem merilnem zaslonu je $l = L\sin\phi$, če je L razdalja med režama, kot ϕ pa je kot opazovanja.

Imejmo zaslon z dvema zelo ozkima režama, skozi kateri prodira valovanje. Rezultat opazujemo na zelo oddaljenem zaslonu. Naj bo l razlika poti od vsake izmed rež do točke merjenja na zaslonu (glej skico 1.14). Seštejmo dve valovanji $\psi_1 = \sin(kx - \omega t)$ in $\psi_2 = \sin[k(x + l) - \omega t]$. Če je

$$kl = 2\pi N \quad \text{oz.} \quad l = N\lambda, \tag{1.69}$$

dobimo konstruktivno interferenco (svetlo progo), če pa je

$$kl = (2N - 1)\pi \quad \text{oz.} \quad l = \left(N - \frac{1}{2}\right)\lambda, \tag{1.70}$$

pa dobimo destruktivno interferenco (temno progo).

Na tem principu deluje *uklonska mrežica*. To je steklena ploščica z izbrušenimi režami, ki se uporablja za natančno merjenje valovne dolžine. Razmiki med režama morajo biti istega velikostnega reda kot valovna dolžina. Če je ϕ kot med smerjo vpadnega valovanja in nekim mestom na zelo oddaljenem zaslonu, lahko pogoj za konstruktivno interferenco zapišemo tudi kot

$$l = L\sin\phi = N\lambda, \tag{1.71}$$

kjer je L razdalja med režami na mrežici.

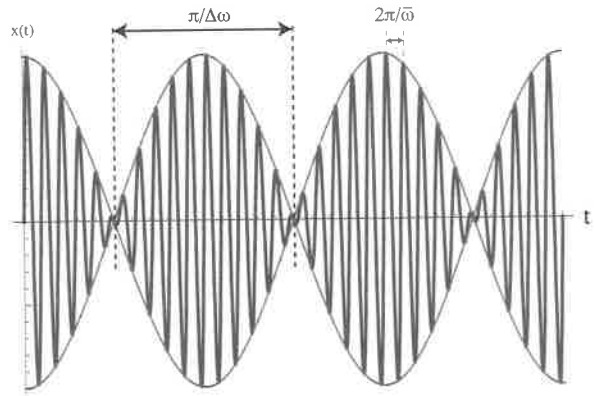
Youngov poskus je uspel tudi z elektroni (Jönsson, 1961) in celo z večjimi molekulami (Arndt in sod., 2002). To je zelo neposreden dokaz, da se lahko snov obnaša kot valovanje, kot sledi iz teorije kvantne mehanike. To bo tema naslednjih poglavij.

1.16 Utripanje in valovni paket

Imejmo dve nihali z rahlo različnima frekvencama ω_1 in ω_2. Velja

$$\sin(\omega_1 t) + \sin(\omega_2 t) = 2\sin(\bar{\omega} t)\cos(\Delta\omega t), \tag{1.72}$$

kjer je $\bar{\omega} = \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2)$ povprečna frekvenca in $\Delta\omega = \frac{1}{2}(\omega_1 - \omega_2)$ polovica razlike frekvenc. Če velja $\bar{\omega} \gg \Delta\omega$ dobimo nihanje, pri katerem je amplituda nihanja s povprečno frekvenco modulirana z razliko frekvenc. Takšno rešitev imenujemo *utripanje*; prikazano je na sliki 1.15. Opazimo ga v sistemu dveh šibko sklopljenih nihali. Prvo izmaknemo iz ravnovesja in spustimo. Najprej niha le prvo nihalo, počasi pa se vzbudi tudi nihanje v drugem. Amplituda prvega pada, amplituda drugega pa raste, tako da čez čas niha le drugo nihalo. To dogajanje se potem ponovi v drugo smer. Energija se tako pretaka iz enega nihala v drugo.



Slika 1.15. Utripanje nihala: časovni potek odmika je narisan z debelejšo črto, s tanjšo pa je označena ovojnica, ki prikazuje spreminjanje trenutne amplitude nihanja.

Zanimivo je tudi utripanje pri potujočih valovanjih. Imejmo dve valovanji z enako amplitudo, vendar različnima frekvencama (in torej valovnima dolžinama). Dobimo

$$\psi = \sin(k_1 x - \omega_1 t) + \sin(k_2 x - \omega_2 t) = 2\sin(\bar{k}x - \bar{\omega}t)\cos(\Delta k\, x - \Delta\omega\, t). \tag{1.73}$$

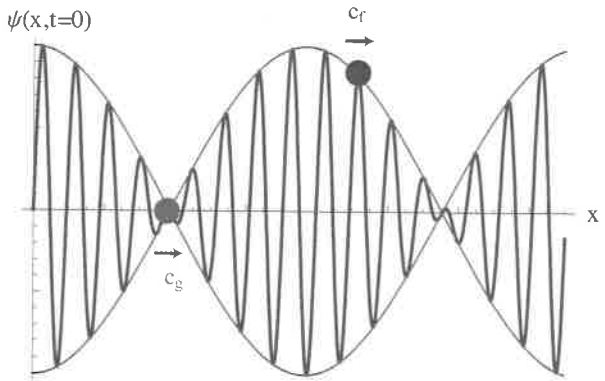
Dobimo valovanje, katerega trenutna slika je modulirano potujoče valovanje. Ovojnica se giblje s hitrostjo

$$c_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}, \tag{1.74}$$

ki se imenuje *grupna hitrost* in se lahko močno razlikuje od *fazne hitrosti*

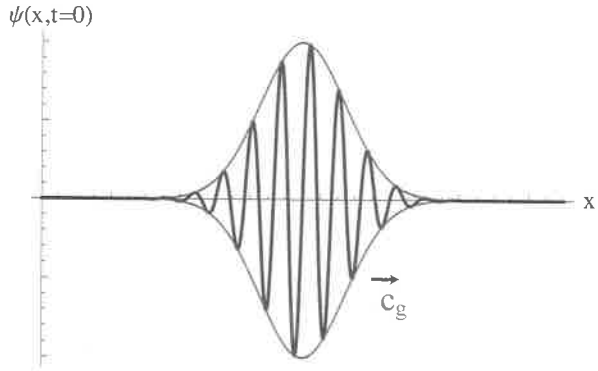
$$c_f = \frac{\bar{\omega}}{\bar{k}}, \tag{1.75}$$

s katero se gibljejo valovni vrhovi, glej sliko 1.16.



Slika 1.16. Potovanje linearne kombinacije dveh valovanj z rahlo različnima valovnima dolžinama. Ovojnica (svetla pika) se premika z grupno hitrostjo c_g, posamezni valovni vrhovi (temna pika) pa s fazno hitrostjo c_f.

Iz večjega števila valovanj z nekoliko različnimi valovnimi dolžinami lahko sestavimo *valovni paket*, v katerem je motnja dobro lokalizirana v prostoru in katerega ovojnica potuje z grupno hitrostjo podobno kot pri utripanju. Pokazati se da, da energija valovnega paketa in morebitna informacija, ki smo jo tako ali drugače zakodirali v valovni paket, prav tako potujeta z grupno hitrostjo. Grupna hitrost je vedno nižja ali enaka svetlobni hitrosti. V tem smislu je potrebno razumeti trditev, da nič ne more potovati hitreje od svetlobne hitrosti. Valovni paketi so izjemno pomembni pri kvantni mehaniki, saj opisujejo gibanje delcev (glej razdelek 2.4 o dualnosti med delci in valovanjem).



Slika 1.17. Valovni paket se giblje z grupno hitrostjo c_g.

2

Snov in sevanje

Oglejmo si, iz kakšnih gradnikov je sestavljeno naše vesolje in kako so ti med seboj povezani.

2.1 Zgodovinski pregled do začetka 20. stoletja

Običajno *snov* (materijo) definiramo kot nekaj, kar ima maso, zavzema prostornino, je otipljivo in tvarno. To je substanca fizikalnih opazljivih objektov, stvari. Razumevanje pojma snovi se spreminja s časom v skladu z novimi znanstvenimi dognanji. O snovi so razpravljali že stari Grki, ki so to obravnavali predvsem kot filozofsko oziroma ontološko vprašanje: katera oblika realnosti je prvotna in najpomembnejša. Empedokel (490–430 p.n.š.) je kot štiri večne *osnovne elemente* predlagal vodo, zrak, ogenj in zemljo. Grški atomisti (denimo Levkip, 490–420 p.n.š., in Demokrit, 460–370 p.n.š.) so prvi razmišljali o pojmu atoma kot o majhnem, nedeljivem, večnem delcu končne velikosti. Atomi naj bi bili različnih oblik in velikosti, med seboj povezani z nekakšnimi zankami. Vpeljali so pomemben pojem *praznine*: brez praznega prostora gibanje atomov ni mogoče. Aristotel (384–322 p.n.š.) je prvi sestavil logično konsistenten sistem snovnega sveta, ki je imel izjemen vpliv praktično do renesanse. Trdil je, da imajo elementi svoja naravna mesta in da je možno gibanje brez zunanjega vzroka. Starogrški filozofi so sicer predvsem abstraktno razglabljali, eksperiment ni igral osrednje vloge in svojih zamisli niso bili navajeni podvreči empiričnemu preverjanju. Kljub temu pa sodobna znanosti stoji na temeljih, postavljenih že v antiki.

V času renesanse se je *atomizem* obudil kot znanstvena teorija. Galileo (1564–1642) je ovrgel Aristotelovo fiziko z eksperimenti in raziskal kinematiko (opis gibanja teles). Ugotovil je, da telesa ohranijo svojo hitrost, če nanje ne deluje nobena sila, kot je, denimo, trenje: to danes poznamo kot prvi Newtonov zakon ali *zakon o vztrajnosti* (inerciji). Galileo velja za očeta sodobne znanosti. Descartes (1596–1650) je predlagal, da je vse, kar je fizičnega, sestavljeno iz majhnih drobcev, za katere je sicer verjel, da so poljubno deljivi, ter poudaril, da je snov razsežna (zavzema prostornino). Boyle (1627–1691), prvi sodobni kemik, je že ločil med *elementi*, *spojinami* in *zmesmi*; snov je razumel kot delce različnih velikosti in oblik.

Moderni atomizem se je začel z Newtonom (1643–1727), ki je govoril o končno velikih delcih z *maso*, za katere veljajo Newtonovi zakoni. Delci so trdni, nepredirni, premični, inertni in večni. Bošković (1711–1787) je izdelal prvo matematično teorijo atomov in trdnost trdnih snovi razložil z elastičnostjo vezi med osnovnimi gradniki. Dalton (1766–1844) je na atomski teoriji utemeljil *zakon o stalnih razmerjih*, ki pravi, da je razmerje mas elementov v spojini vedno enako. Njegov koncept atoma se sliši že zelo sodobno:

- elementi so sestavljeni iz atomov,
- vsi atomi danega elementa so enaki, a različni od atomov drugega elementa,
- elementi se sestavljajo v spojine,
- atomov ne moremo ustvariti, razstaviti ali uničiti, lahko jih le preuredimo.

Avogadro (1776–1856) je odkril zakon, da je pri istem tlaku in temperaturi v posodi plina vedno ista *količina snovi* (število molekul), neodvisno od mase in velikosti teh molekul:

$$V = kn, \tag{2.1}$$

kjer je V prostornina plina, n množina snovi merjena v enotah mol, 1 mol ustreza $6{,}022 \times 10^{23}$ molekulam, k pa je neka konstanta. S tem je razjasnil pojem *molekule* kot osnovnega gradnika spojin. Maxwell (1831–1879) je razvil *kinetično teorijo plinov*, po kateri je plin množica majhnih delcev, ki se naključno gibljejo ter trkajo med seboj in s stenami posode. Teorija pravilno opisuje številne osnovne pojave, kot sta toplotna prevodnost in difuzija, in omogoča določiti zvezo med prostornino, tlakom in temperaturo (plinski zakon). Einstein (1879–1955) je v »čudežnem letu« 1905 v enem izmed svojih znamenitih del obravnaval *Brownovo gibanje*, gibanje vidnih večjih delcev v tekočini zaradi naključnih trkov z nevidnimi osnovnimi gradniki (atomi, molekulami). Eksperimentalno je Einsteinove napovedi leta 1908 potrdil Perrin (1870–1942) in s tem dokončno potrdil atomsko teorijo in dejanski obstoj molekul, za kar je leta 1926 prejel Nobelovo nagrado za »delo na nezvezni strukturi snovi«.

Tudi koncept *svetlobe* (in sevanja) ima dolgo zgodovino. Empedokel je v svoji teoriji vida govoril o žarku, ki izhaja iz očesa. Lukrecij je predlagal, da je svetloba sestavljena iz delčkov, vendar je bila ta korpuskularna teorija kmalu pozabljena. Evklid (cca. 330 p.n.š.) je že razumel osnovne pojme *geometrijske optike*, kot so žarek in odboj. Descartes je svetlobo obravnaval kot valovanje v nekem mediju in s tem postavil osnove sodobne *fizikalne optike*. Obravnaval je *odboj* in *lom* svetlobe. Newtonu so bile bolj všeč korpuskularne teorije: svetlobo je razumel kot koščke snovi. Prvi je pokazal, da je bela svetloba sestavljena iz *spektra* enobarvnih komponent. Pred tem so mislili, da je sončna svetloba bela, barve pa nastanejo kot mešanje s temo zaradi interakcij s snovjo. Po drugi strani je valovno teorijo svetlobe nadalje razvil Huygens (1629–1695), Young (1773–1829) pa je opravil prve interferenčne eksperimente. Newtonova teorija delcev svetlobe je bila povsem zavržena sredi 19. stoletja: Foucault je leta 1850 eksperimentalno pokazal, da je hitrost svetlobe v snovi manjša kot v vakuumu, kar je navskriž z Newtonovo teorijo. Maxwell je leta 1862 ugotovil, da je svetloba pravzaprav oblika elektromagnetnega valovanja[1], leta 1873 pa zapisal *Maxwellove enačbe*, ki dobro razložijo elektromagnetne in optične pojave v večini primerov in so v veljavi še danes.

V začetku 20. stoletja je bila torej najbolj sprejeta in uveljavljena slika, da je snov sestavljena iz diskretnih gradnikov in da je svetloba valovanje. Njun opis je temeljil na Newtonovih enačbah gibanja, Maxwellovih enačbah za električne in magnetne pojave ter na zakonih termodinamike. *Klasična fizika* se dobro sklada tudi z večino naših vsakdanjih izkustev in s številnimi znanstvenimi meritvami. V tistem času pa so se že pojavile prve resne težave in neujemanja: kako s klasičnimi koncepti razložiti diskretne spektralne črte pri sevanju plinov, sevanje črnega telesa in fotoelektrični pojav?

2.2 Začetek moderne fizike

Začetki kvantne fizike segajo v leto 1900, ko je Planck ugotovil, da lahko pravilno opiše sevanje črnega telesa ob predpostavki, da so dogodki emisije (izsevanja) in absorpcije (vsrkavanja) svetlobe diskretni. Zgodovinskega poteka razvoja *kvantne mehanike* ne bomo podrobneje obravnavali. Po desetletjih burnega razvoja se je razvila kvantna teorija, kot je v veljavi še danes. V naslednjih poglavjih bomo spoznali njene osnove. Pri visokih hitrostih gibanja postanejo pomembni tudi relativistični pojavi (slika 2.1). Najbolj dovršen opis, ki konsistentno vključuje tako kvantno teorijo kot teorijo relativnosti, pa so *teorije kvantnega polja*.

Slika 2.1. Območja veljavnosti osnovnih fizikalnih teorij.

Kvantna mehanika igra pomembno vlogo v sodobni znanosti iz več razlogov:

- Je zelo uspešna teorija pojavov na velikostni skali atomov, kjer klasična mehanika povsem odpove. Pravilno opiše, kako se elektroni ujamejo v orbitale okoli jeder atomov, ter razloži periodni sistem elementov (glej poglavje 9). Kvantne teorije so izjemno natančne in se odlično ujemajo eksperimentalnimi testi.

[1] Elektromagnetna sevanja z valovno dolžino, drugačno od vidne svetlobe, so odkrili v začetku 19. stoletja: astronom Herschel je odkril infrardečo, Ritter pa ultravijolično svetlobo.

- Makroskopske lastnosti snovi so posledica kvantnih lastnosti osnovnih gradnikov; mehanske, električne, magnetne, optične in kemijske lastnosti so načeloma izračunljive iz mikroskopskih teorij, ki so kvantne. Pomembna je predvsem ustrezna obravnava gibanja elektronov v snovi: kvantna mehanika razloži, denimo, razliko med kovinami in izolatorji (glej poglavji 10 in 11).

- Kvantna mehanika je temelj ved, ki so postale samostojne panoge, kot so kvantna kemija (napovedovanje lastnosti snovi na osnovi računalniškega modeliranja), kvantna optika (laserji, kratki svetlobni pulzi, atomske ure) in kvantno računalništvo.

- *Korespondenčno načelo* pravi, da kvantna mehanika pri velikih sistemih preide v klasično mehaniko, torej da enake napovedi. Klasična mehanika je torej limita kvantne mehanike.

Brez razvoja kvantne teorije in na njej temelječih tehnologij bi ne bilo ne tranzistorja, ne sodobnih digitalnih računalnikov, niti laserjev in sodobnih optičnih komunikacij.

2.3 Kvantna polja

Pojem *polja* se je v fiziki pojavil v 19. stoletju kot matematično orodje za opis delovanja na daljavo med delci snovi, *interakcij*. Polje je količina, ki ji pripišemo vrednost v vsaki točki prostora. Zaloga vrednosti so lahko skalarji (polje temperatur), vektorji (polje hitrosti vetra), ali kaj bolj zapletenega. Oglejmo si dobro poznan primer iz osnov elektromagnetizma. Imejmo dva naboja q_1 in q_2, slika 2.2. Prvi miruje v izhodišču koordinatnega sistema, drugi pa je v točki $\mathbf{r}$. Rečemo, da je prvi naboj izvor električnega polja

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_1}{r^2}\hat{\mathbf{r}}. \tag{2.2}$$

S strehico nad $\mathbf{r}$ označimo enotski vektor v radialni smeri, torej $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$. ϵ_0 je dielektrična konstanta. Električno polje prvega delca deluje na drugi nabiti delec in vzpostavi se sila

$$\mathbf{F} = q_2\mathbf{E}(\mathbf{r}_2). \tag{2.3}$$

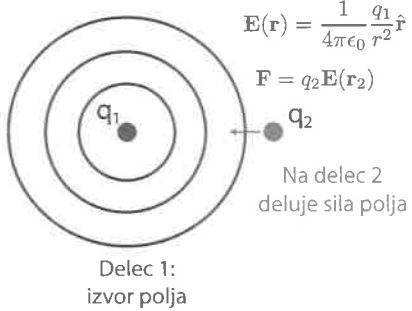
Od tod sledi *Coulombov zakon*

$$F = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \tag{2.4}$$

ki opisuje elektrostatsko privlačno ali odbojno silo med nabojema.

Koncept polja omogoča tudi obravnavo zakasnitve (retardacije), saj, kot danes vemo, spremembe v polju potujejo s končno hitrostjo. Ko prvi naboj malo premaknemo, se mora sprememba v polju razširiti (propagirati) do drugega naboja s svetlobno hitrostjo, preden drugi naboj zazna spremenjeni položaj prvega.

Nekaj časa je veljalo, da naj bi se elektromagnetno valovanje širilo v nekem mediju, *etru*. Michelson in Morley sta konec 19. stoletja v znamenitem eksperimentu poskusila določiti hitrost našega planeta glede na eter, vendar je nista zaznala. Negativen izid poizkusa je bil podlaga za razvoj Einsteinove posebne teorije relativnosti, katere



Slika 2.2. Koncept polja v klasični fiziki: prvi delec okoli sebe ustvari polje, ki deluje na drugi delec.

temeljna trditev je, da je hitrost svetlobe v vseh nepospešenih opazovalnih sistemih povsem enaka. Danes vemo, da se lahko valovanje širi skozi »prazen« prostor, kar opišemo s sodobnim konceptom *elektromagnetnega polja*; polje je osnovna entiteta, ki obstaja sama zase.

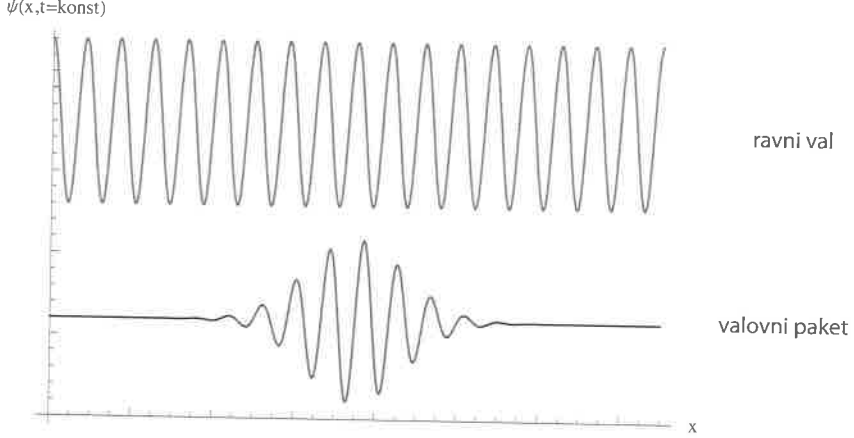
Z razvojem kvantne mehanike se je izkazalo, da ima tudi snov valovne lastnosti in da jo lahko opišemo kot nekakšno kvantno polje. Od tod sledi zaključek, da lahko vse obstoječe, tako snov kot sevanje, opišemo s *kvantnimi polji*. Za vsako vrsto delcev vpeljemo svoje polje, za vsako vrsto interakcije tudi. Delce je bolje razumeti kot *vzbuditve* teh polj, kot valovne pakete, kot *kvante*. Polje obstaja povsod v prostoru. Pravega »praznega« prostora torej ni: pojem *vakuum* (ali *vakuumsko stanje*) v kvantni teoriji ne pomeni praznega prostora, temveč konfiguracijo polj v najnižjem energijskem stanju. Kvanti pa so potemtakem osnovne vzbuditve polja, torej najenostavnejše konfiguracije z energijo, ki je višja od energije vakuuma.

2.4 Dualnost delec-valovanje

Z uvedbo pojma kvantnega polja postane razprava o tem, ali je nekaj v temelju delec ali valovanje, v veliki meri nepotrebna, saj je vprašanje samo nesmiselno. »Delec« in »valovanje« sta namreč le dve različni možni konfiguraciji polja. Kot primer si oglejmo elektron: poenostavljen shematski prikaz polja (valovne funkcije) za dva različna primera je na sliki 2.3.

Če imamo opravka z valovnim paketom, ki ima omejen prostorski obseg, lahko govorimo o delno določenem položaju. Valovni paket nosi gibalno količino in energijo. Rečemo, da je elektron *lokaliziran*. Govorimo lahko o *trkih* med tako opisanimi elektroni.

Če imamo opravka z ravnim valom, je elektron razprostrt v prostoru, njegov položaj ni določen, tudi gostota energije je razmazana v prostoru. Rečemo, da je elektron *delokaliziran*. Govorimo lahko o *interferenci* med tovrstnimi valovanji.



Slika 2.3. Ravni val (povsem delokaliziran delec) in valovni paket (delno lokaliziran delec).

V resnici pa sta to le mejna primera. Maksimalno lokalizirani elektroni so redki, neskončno dolgih ravnih valov pa sploh ni. Obnašanje elektrona (delec ali valovanje) torej ni inherentna (njemu lastna) lastnost elektrona, temveč je odvisna od zunanjih okoliščin, recimo od električnega polja, v katerem se elektron giblje. Tej dvojnosti rečemo *dualnost delec-valovanje*. Spomnimo se še, da lahko zaradi linearnosti in načela superpozicije valovni paket sestavimo kot linearno kombinacijo (superpozicijo) ravnih valov, kar dodatno potrjuje, da gre le za različne rešitve istih enačb.

Kaj imajo torej fiziki v mislih, ko obelodanijo odkritje novega delca? V resnici gre za *odkritje novega polja*, katerega vzbuditve (kvanti) so omenjeni delci, te pa zaznavamo z merilniki. To velja za osnovne (nesestavljene) delce. Obstajajo tudi sestavljeni delci, ki so kombinirane vzbuditve več polj: v tem primeru gre lahko za eksperimentalno odkritje nove tovrstne kombinacije.

2.5 Standardni model in osnovni delci

Standardni model je najsodobnejša kvantna teorija polja, ki opisuje snov in interakcije z vidika najmanjših gradnikov, osnovnih delcev. Teorija je bila razvita v drugi polovici 20. stoletja in velja za najboljši (»presenetljivo natančen«) opis sveta, kot ga poznamo.

Osnovni delci so nesestavljeni delci našteti v tabeli 2.1. Ločimo jih na dve vrsti: *fermione*, ki v grobem ustrezajo temu, kar pojmujemo kot snov, in *bozone*, ki jih lahko opredelimo kot nosilce interakcij, torej sil med delci. Nekateri delci imajo svoj *antidelec*: delec z enako maso, a nasprotnim nabojem. Antidelec elektrona je, denimo, pozitron. Delec in antidelec se lahko *izničita* (*anihilirata*), pri čemer nastane sevanje. Veliko odprto vprašanje je, zakaj je v vesolju več snovi kot antisnovi: praktično vsa vidna materija je iz snovi. Ob začetku vesolja, v velikem poku, naj bi snov in antisnov nastali v enaki množini, zato bi pričakovali popolno medsebojno izničenje, vendar očitno obstaja nekakšna asimetrija v tem, kako hitro razpadata, zato je preostala le snov.

FERMIONI ~ snov			
generacija	I.	II.	III.
kvarki	u (up)	c (charm)	t (top)
	d (down)	s (strange)	b (bottom)
leptoni	e (elektron)	μ (mion)	τ (tauon)
	ν_e (nevtrino)	ν_μ	ν_τ

BOZONI ~ interakcije	
γ (foton)	EM interakcija
g (gluon)	močna interakcija
Z_0, $W\pm$	šibka interakcija
H_0 (Higgsov bozon)	(da delcem maso)

Tabela 2.1. Osnovni delci v standardnem modelu.

Delci se obnašajo kot drobne vrtavke, ki se vrtijo okoli lastne osi: imajo *notranjo vrtilno količino* ali *spin*. Izkaže se, da je spin *kvantiziran*: ima lahko (pol)celoštevilsko vrednost: $S = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$, ker so samo te vrednosti dovoljene v teoriji relativnosti. *Izrek o spinu in statistiki* je trditev, da imajo fermioni polcelоštevilski spin $(1/2, 3/2, \ldots)$, bozoni pa celoštevilski spin $(0, 1, \ldots)$. Ker je spin zelo pomembna lastnost delcev, ga bomo podrobneje obravnavali v razdelku 3.6.

2.6 Fermioni

Za fermione velja *Paulijevo izključitveno načelo*: dva delca ne morata biti sočasno na istem mestu oziroma, bolj natančno, v istem kvantnem stanju. To načelo razloži, zakaj je snov razsežna in zaseda prostor. V razdelku 9.3 bomo spoznali, da razloži tudi zgradbo atomov in periodni sistem elementov.

Fermione delimo na tri *generacije* (ali družine). V vsaki sta po dva *kvarka* ter dva *leptona*. Kvarka sta težja od leptonov. Imata električni naboj $+(2/3)e_0$ oziroma $-(1/3)e_0$, kjer je e_0 osnovni naboj. Prvi lepton ima naboj ($q = -e_0$ za elektron), nevtrini pa so nevtralni. Delci v različnih generacijah se med seboj ločijo po masi. Večina snovi je iz delcev prve generacije, torej iz kvarkov u in d ter iz elektronov. Delce druge in tretje generacije lahko ustvarimo v *pospeševalnikih*. Vse kaže, da obstajajo natanko tri generacije; verjetnost, da bi kdaj odkrili četrto, je pičla.

Kvarki čutijo vse interakcije. Nosijo kvantno število barvnega naboja (rdeč, moder ali zelen) in občutijo *močno* ali *barvno interakcijo*. Nikoli niso izolirani, temveč se pojavljajo v takšnih kombinacijah, da je celota barvno nevtralna (skupaj »moder«, »rdeč« in »zelen« kvark; ali pa »zelen« kvark in »antizelen« antikvark). Seveda ne gre za prave barve, temveč le za prikladno poimenovanje neke količine, ki se pri kombiniranju obnaša podobno kot mešanje osnovnih barv.

Leptoni so fermioni, ki nimajo barvega naboja in ne čutijo močne interakcije. Najpomembnejši lepton je *elektron*, odkrit leta 1897 kot delec, ki tvori katodne žarke. *Nevtrini* so bolj izmuzljivi: imajo zelo majhno maso in zelo šibko interagirajo s snovjo. Njihove lastnosti še niso povsem raziskane.

Trojice kvarkov tvorijo *nukleone*: *proton* $p = uud$, *nevtron* $n = udd$. Velikost nukleona je 1 fm. *Jedro* atoma je sestavljeno iz kopice nukleonov. *Atom* je sestavljen iz jedra in elektronskih *lupin*, ki tvorijo oblak okoli jedra. Velikost atoma je nekaj desetink nanometra.

2.7 Bozoni

Bozoni so kvanti interakcije. Nekateri imajo maso, vendar ne štejejo kot snov. *Foton* je nosilec elektromagnetne interakcije, *gluoni* so nosilci močne, bozoni Z in W pa šibke interakcije. Odbojno silo med dvema elektronoma si lahko, denimo, predstavljamo kot izmenjevanje fotonov. Obstaja še *Higgsov bozon* H^0, ki igra pomembno vlogo v mehanizmu, ki da drugim delcem maso. Napovedan je bil že pred 50 leti, leta 2013 pa so javno oznanili potrditev njegovega obstoja na podlagi meritev z Velikim hadronskim trkalnikom (LHC) v CERNu v Ženevi.

Teorija elektromagnetne interakcije se imenuje *kvantna elektrodinamika* (QED), teorija močne interakcije pa *kvantna kromodinamika* (QCD). Pri visokih energijah lahko elektromagnetno in šibko interakcijo obravnavamo kot eno samo poenoteno interakcijo, ki jo imenujemo *elektrošibka interakcija*. Fiziki si prizadevajo, da bi našli *veliko teorijo poenotenja*, ki bi enakovredno opisala vse interakcije, vključno s težnostjo (*gravitacijo*), vendar se uspeh že dolgo izmika. *Teorije strun* so bile dolgo zelo popularne, zadnje čase pa je navdušenje rahlo splahnelo, saj teorija ni dala preverljivih napovedi.

2.8 Temna snov in temna energija

Kozmološke meritve nakazujejo na obstoj *temne snovi*, ki prispeva večji del mase vesolja, vendar je neposredno ne vidimo in niti še ne vemo, iz česa sploh je. Morda jo tvorijo kakšni še neodkriti osnovni delci. Imeti bi morali veliko maso, sicer pa šibko interakcijo s snovjo. Prav tako je vesolje prežeto s *temno energijo*, ki prispeva k pospešenemu širjenju vesolja. Oboje nakazuje, da pravzaprav ne znamo še povsem dobro definirati, kaj snov in sevanje sploh sta.

2.9 Ohranitev naboja in umeritvene simetrije

Ohranitev naboja je eden izmed temeljnih zakonov narave. V nobeni točki prostora naboj ne more nastajati niti ne more prenehati obstajati. Vsota vseh pozitivnih in negativnih nabojev v vesolju se ohranja in je bržkone enaka nič. Ohranitev naboja je posledica zelo pomembne simetrije, ki jo imenujemo *umeritvena invarianca* elektromagnetnega polja. Umeritvene simetrije so matematični temelj sodobnih teorij kvantnih polj.

2.10 Svetloba

Svetloba je elektromagnetno valovanje, ki ga izsevajo pospešeni nabiti delci. Skozi prazen prostor potuje s svetlobno hitrostjo

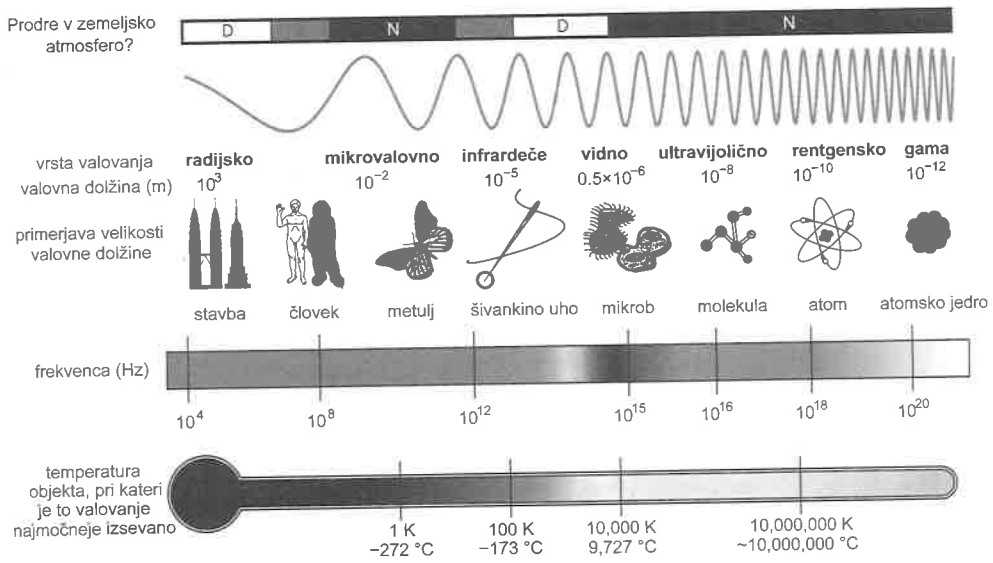
$$c = 2{,}997\,924\,58 \times 10^8\ \mathrm{m/s} \approx 3 \times 10^8\ \mathrm{m/s}. \tag{2.5}$$

Če rešimo Maxwellove enačbe z nastavkom za ravni val, ki potuje v smeri x, dobimo za električno in magnetno polje izraza

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \sin(kx - \omega t), \quad \mathbf{B} = \mathbf{B}_0 \sin(kx - \omega t), \tag{2.6}$$

kjer je zveza med k in ω podana z $\omega = ck$. Polji $\mathbf{E}$ in $\mathbf{B}$ sta pravokotni med seboj in na smer potovanja valovanja. Svetloba je lahko *polarizirana*. To pomeni, da ima pri svetlobi, ki potuje v smeri osi x, vektor $\mathbf{E}$ točno določeno smer, recimo da kaže vedno v smeri osi y. Temu rečemo *linearna polarizacija*. Obstajata natanko dve med seboj pravokotni linearni polarizaciji (polje $\mathbf{E}$ poravnano vzdolž osi y ali vzdolž osi z).

Spekter svetlobe (slika 2.4) obsega radijske valove, mikrovalove, infrardečo, vidno ter ultravijolično svetlobo, rentgenske žarke (žarke X) in sevanje gama. Sevanja s kratkimi valovnimi dolžinami, ultravijolična, rentgenska in gama, imajo zadosti energije, da iz snovi izbijajo elektrone. Imenujemo jih *ionizirajoča sevanja*. Povzročijo lahko genske mutacije in razvoj raka.



Slika 2.4. Spekter elektromagnetnega valovanja. Prirejeno po: Wikipedia, stran »Electromagnetic spectrum«.

Vsako telo seva elektromagnetno valovanje. Pri zadosti visoki temperaturi spekter izsevanih valovanj vključuje tudi vidno svetlobo, zato takšno telo žari (žarnica z volframovo nitko, plošče pri električnih štedilnikih in podobno). Tudi živa bitja sevajo, predvsem v infrardečem spektru. Šibko sevanje prihaja prav tako iz vseh smeri vesolja. To *kozmično mikrovalovno ozadje* velja za preostanek začetnega *velikega poka*, v katerem je nastalo vesolje. Zdaj potekajo raziskave, v kolikšni meri je to sevanje enako v vseh smereh in kaj to pove o zgodnjem obdobju vesolja, predvsem o *kozmični inflaciji*, v kateri se je vesolje nekaj trenutkov po velikem poku močno razpihnilo.

Sevanja segretih teles ni težko razumeti. Temperatura telesa opredeljuje, kako močno migetajo osnovni gradniki snovi. Ti nosijo električni naboj, pospešeni naboji (oziroma električni dipoli) pa sevajo elektromagnetno valovanje. Ker so energije nabojev v snovi zelo različne, je tudi spekter svetlobe zvezen in zelo širok.

2.11 Toplotno sevanje

Absorbcija svetlobe in termično sevanje sta povezana: bolj ko snov svetlobo vpija, bolj tudi toplotno seva. Uporabna idealizacija je *črno telo*, ki vpija vso svetlobo, ki pade nanj. Črno telo torej tudi najbolj seva izmed vseh možnih teles z različnimi kemijskimi sestavami in strukturami površine. Za črno telo velja univerzalni zakon, da je spekter izsevane svetlobe odvisen samo od temperature T, ne pa od snovnih lastnosti sevalca. Kirchhoffov zakon o termičnem sevanju za poljubno drugo telo pa se glasi

$$I(\lambda) = [1 - a(\lambda)]I_{\text{črno}}(\lambda), \tag{2.7}$$

kjer je $I(\lambda)$ gostota sevalnega toka pri valovni dolžini lambda, $a(\lambda)$ pa koeficienti *svetlobne odbojnosti* snovi (albedo), ki je lastnost površine materiala in ima vrednost med 0 (mejna vrednost, ki jo dosežemo v črnem telesu) in 1 (mejna vrednost, ki velja za idealno zrcalo oziroma belo telo). Kot primer, sneg ima odbojnost 0,9, trava okoli 0,25, asfalt pa 0,1. Ena najtemnejših snovi je oglje z $a \approx 0{,}04$.

Zelo dober približek za črno telo je majhna odprtina v škatli, katere notranje stene imajo stalno temperaturo. Snop svetlobe, ki prodre od zunaj skozi odprtino v notranjost, se ob zaporednih odbojih od sten votline postopoma povsem absorbira, namesto da bi ponovno zapustil votlino skozi odprtino: vpije so torej vsa vpadna svetloba. Sevanje, ki izhaja skozi odprtino, ima tedaj skoraj idealen spekter črnega telesa.

Jakost izsevane svetlobe črnega telesa opisuje *Stefan-Boltzmannov zakon*:

$$j = \sigma T^4, \tag{2.8}$$

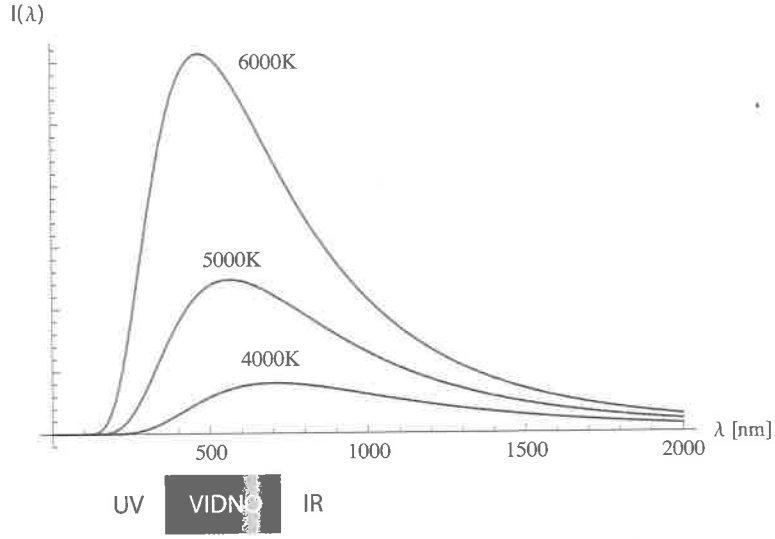
kjer je j gostota energijskega toka [2] in $\sigma = 5{,}67 \times 10^{-8}\,\mathrm{W/m^2K^4}$ Stefanova konstanta. Slovenski fizik Jožef Stefan je odvisnost j od četrte potence temperature odkril leta 1879 na podlagi eksperimentalnih meritev, njegov študent Boltzmann pa jo je potem izpeljal teoretično. Točno vrednost konstante σ in njeno izražavo z osnovnimi konstantami je bilo možno določiti šele kasneje v okviru kvantne mehanike. Stefan-Boltzmannov zakon ni za nas pomemben zgolj zato, ker je edini fizikalni zakon, imenovan po slovenskem fiziku, temveč ima tudi velik znanstveni in praktični pomen. V astronomiji je osnova za merjenje temperature površine Sonca in drugih zvezd. V podobne namene se uporablja v tehniki: *optični pirometer* je naprava za brezkontaktno merjenje temperatur.

[2] Gostota energijskega toka j pomeni, da površina s ploščino S seva energijski tok (moč) jS. S Sonca na Zemljo pada svetlobni tok $j = 1360\,\mathrm{W/m^2}$.

Wienov zakon opisuje maksimum v spektru izsevane svetlobe:

$$\lambda_{\max} T = 2{,}9 \times 10^{-3}\,\mathrm{mK}. \tag{2.9}$$

Pri $T = 5800\,\mathrm{K}$, kar ustreza temperaturi Sončevega površja, dobimo $\lambda_{\max} = 500\,\mathrm{nm}$, kar je modra vidna svetloba, pri $T = 2{,}7\,\mathrm{K}$, kar ustreza temperaturi kozmičnega mikrovalovnega ozadja, pa je $\lambda_{\max} = 0{,}11\,\mathrm{cm}$, kar je res mikrovalovanje.



Slika 2.5. Spekter sevanja črnega telesa, kot ga opisuje Planckov zakon.

Planckov zakon o spektru sevanja črnega telesa (slika 2.5) se glasi

$$I(\lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}. \tag{2.10}$$

V izrazu je

$$k_B = 1{,}38 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K} \tag{2.11}$$

Boltzmannova konstanta,

$$h = 6{,}63 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js} \tag{2.12}$$

pa *Planckova konstanta*. Pogosto uporabljamo tudi *reducirano Planckovo konstantno*

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}. \tag{2.13}$$

Funkcija $I(\lambda)$ ima tri ključne lastnosti:

- Spekter ima en maksimum in je asimetrične zvonaste oblike.
- Če temperatura naraste, $I(\lambda)$ naraste pri vseh valovnih dolžinah.
- Če temperatura naraste, se maksimum preseli h krajšim valovnim dolžinam (višjim frekvencam).

Planckov zakon je osnovni zakon o sevanju: Stefanov in Wienov zakon se da izpeljati iz Planckovega. Planck je to formulo najprej uganil, kasneje pa izpeljal ob privzetkih, katerih pomen tedaj še ni bil jasen. Predpostavil je votlino v telesu in obstoj nekih nihal, za katere je zapisal, da »ni nujno, da zares obstajajo v naravi«, da pa so morda povezana z atomi. Vsako nihalo ima porazdelitev energij, ki so sorazmerne z lastno frekvenco nihala ν:

$$E = nh\nu, \tag{2.14}$$

kjer je n celo število, h pa nek sorazmernosti koeficient, ki ga danes imenujemo Planckova konstanta. Takšna diskretna porazdelitev je zelo nenavadna, saj imajo nihala v klasični mehaniki lahko poljubno energijo. Planck ni predlagal, da je kvantizirana svetloba, govoril je le o kvantiziranih dogodkih absorpcije in emisije svetlobe. Zakon se je odlično ujemal z eksperimentalnimi meritvami. Planck se je šele čez 20 let sprijaznil z vsemi implikacijami in sodobno interpretacijo svoje lastne formule.

2.12 Foton

Foton je osnovni delec oziroma *kvant* elektromagnetnega valovanja, torej bozon. Je nosilec električne in magnetne sile. Nima električnega naboja in je sam sebi antidelec. Označimo ga s črko γ. Sodobni koncept fotona se je pojavil v Einsteinovem članku o naravi svetlobe in fotoefektu iz leta 1905. Predlagal je, da so fotoni kvanti energije, ki zares obstajajo, in ki nastanejo in se absorbirajo kot posamične entitete. Energija posameznega fotona je določena s *Planckovo zvezo*

$$E = h\nu = \hbar\omega. \tag{2.15}$$

Pred razvojem kvantne teorije polja se je fotone obravnavalo kot točkaste delce, danes pa raje kot vzbuditve kvantnega elektromagnetnega polja. Sam izraz foton je nastal šele kasneje, Einstein je govoril o kvantih svetlobe.

Foton nastane pri sevalnih prehodih nabitih delcev med različnimi stanji: elektron preide iz kvantnega stanja z visoko energijo v stanje z nižjo, razliko energij pa odnese izsevani foton. To bomo laže razumeli kasneje, ko se bomo podrobneje seznanili s kvantno teorijo. Fotoni nastanejo tudi pri izničenju (anihilaciji) snovi in antisnovi, ter pri jedrskih reakcijah. Omenimo še sinhrotronsko sevanje, ki nastane pri pospeševanju elektronov v pospeševalnikih.

2.13 Fotoefekt

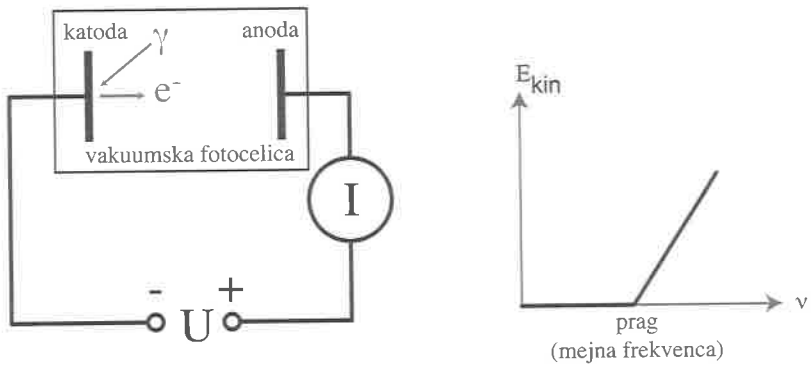
Fotoefekt je pojav, da svetloba izbija elektrone iz snovi (slika 2.6, levo). Iz snovi elektroni odletijo s končno hitrostjo, torej imajo nekaj kinetične energije. Če povečamo intenziteto vpadne svetlobe, nastane več elektronov, kinetična energija vsakega izbitega elektrona pa ostane enaka. Če povečamo frekvenco, se število izhodnih elektronov ne spremeni, poveča pa se njihova kinetična energija. Velja zveza

$$h\nu = \Phi + E_{\text{kin}}, \tag{2.16}$$

kjer je ν frekvenca vpadne svetlobe, Φ *izstopno delo*, ki meri, kako močno so vezani elektroni v kovini, E_{kin} pa je kinetična energija izstopnih elektronov. Izstopno delo večine kovin je med 4 eV in 5 eV. *Elektronvolt* je zelo pripravna enota za merjenje energij v svetu atomov,

$$1\,\text{eV} = 1{,}6 \times 10^{-19}\,\text{J}. \tag{2.17}$$

Če je $\hbar\omega < \Phi$, svetloba elektronov ne izbija: obstaja torej *prag* (mejna frekvenca). To je v navzkrižju s Planckovim pogledom, kjer je kvantizirana absorpcija, ne pa svetloba sama. Po Plancku bi po zadosti dolgem obsevanju z nizkoenergijsko svetlobo prišlo do absorpcije, po Einsteinu pa je nujno, da energija posameznih fotonov preseže prag. Eksperiment je pokazal, da je imel prav Einstein (slika 2.6, desno). Pionirske meritve je opravil R. A. Millikan, za kar je leta 1923 prejel Nobelovo nagrado, Einstein pa je za teoretično razlago fotoefekta prejel Nobelovo nagrado leta 1921. Celo nekaj kasneje pa še niso vsi sprejeli te razlage. V 50. letih je bila razvita teorija *kvantne elektrodinamike* (QED), katere temelj je opis kvantnega polja fotonov, in ki se odlično ujema z vsemi meritvami. Danes sta QED in koncept fotona univerzalno sprejeta.



Slika 2.6. Merjenje fotoefekta s fotocelico (levo) in odvisnost kinetične energije izhodnih elektronov od frekvence vpadnega valovanja (desno).

2.14 Sevalni tlak

Fotoni nimajo mase, $m = 0$. Iz relativistične zveze med energijo, maso in gibalno količino $E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2$ tedaj sledi

$$p = \frac{E}{c}. \tag{2.18}$$

Upoštevamo, da je $E = \hbar\omega = h\nu$, zvezo $c = \lambda\nu$, ter $k = 2\pi/\lambda$, pa dobimo še ekvivalentno zvezo

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k. \tag{2.19}$$

Fotoni nosijo gibalno količino, kar pomeni, da curek fotonov ustvarja tlak. Svetlobni tlak P je

$$\begin{aligned} P &= \text{sila na enoto površine} \\ &= \text{prejeta gibalna količina na sekundo na enoto površine} \\ &= \frac{1}{c} \times \text{prejeta energija na sekundo na enoto površine} \\ &= \frac{j}{c}. \end{aligned} \tag{2.20}$$

Tu smo upoštevali definicijo gostote energijskega toka j. Tlak sončne svetlobe je šibek, na Zemlji znaša pod $10\,\mu$Pa (za primerjavo: zračni tlak na morski gladini je $1\,\text{bar} = 10^5\,\text{Pa}$). Kljub temu je zadosti velik za uspešen pogon vesoljskih plovil s sončnimi jadri (IKAROS). Svetlobni tlak je možno uporabiti tudi za *lasersko hlajenje atomov* (Nobelova nagrada 1997, Cohen-Tannoudji in Phillips), kar je pomembno za številne aplikacije: meritve osnovnih konstant in težnostnega polja, nove vrste atomskih ur in nekatere izvedbe kvantnih računalnikov.

V resnici sta pojem svetlobnega tlaka in enačba (2.18) bila znana že v klasičnem elektromagnetizmu iz 19. stoletja. Novo je spoznanje, da sta tako energija kot gibalna količina diskretni in ju lahko pripišemo posameznim fotonom. To velja še za vrtilno količino, saj imajo fotoni tudi spin, in sicer $S = 1$. Za brezmasne delce s spinom $S = 1$ se izkaže, da imajo dve polarizacijski stanji. To je povezano s predhodno omenjenima dvema neodvisnima izbirama za polarizacijo v klasični teoriji elektromagnetnega valovanja.

2.15 Comptonovo sipanje

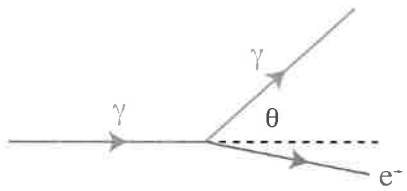
V fiziki *sipanje* pomeni spremembo smeri delca glede na premočrtno trajektorijo zaradi interakcije s kakšnim drugim delcem. *Comptonovo sipanje* je sipanje fotona na elektronu. To pomeni, da foton prileti do elektrona, vanj »trči« in odleti proč pod kotom glede na svojo prvotno smer. Pri tem foton preda del svoje energije elektronu in se mu spremeni valovna dolžina, saj velja $E = h\nu = hc/\lambda$. Pri sipanju za kot θ (slika 2.7) velja

$$\Delta\lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta), \tag{2.21}$$

kjer je

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 0{,}0024\,\text{nm} = 2{,}4\,\text{pm} \tag{2.22}$$

Comptonova valovna dolžina. Tu je m_e masa elektrona, $m_e = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg. Pojav lahko opazimo pri sipanju rentgenskih žarkov ali sevanja gama.



Slika 2.7. Comptonovo sipanje fotona na elektronu.

V klasični sliki imamo opravka s *Thomsonovim sipanjem.* Dipol zaniha v elektromagnetnem polju, nato pa oddaja svetlobo kot dipol s kotnim profilom $1 + \cos^2\theta$. Izsevana svetloba ima enako frekvenco kot vpadna, torej isto valovno dolžino. Comptonov pojav (sprememba valovne dolžine) velja za enega pomembnejših dokazov za kvantno (korpuskularno) naravo svetlobe. Pojav je prvi opisal Compton leta 1922, za kar je prejel Nobelovo nagrado leta 1927.

3

Kvantna mehanika

V klasični fiziki stanje sistema opišemo z njegovimi merljivimi lastnostmi, denimo z lego telesa $\mathbf{r}(t)$, v kvantni mehaniki pa z valovno funkcijo $\psi(\mathbf{r}, t)$, ki ni neposredno merljiva. Rečemo tudi, da je kvantno stanje določeno z *vektorjem v Hilbertovem prostoru*. Cilj tega poglavja je razjasniti, kaj to pravzaprav pomeni. V ta namen bomo spoznali nekaj pojmov iz linearne algebre in matematični *formalizem* kvantne mehanike. Ugotovili bomo, da kvantna teorija temelji na pojmih *informacije* in *verjetnosti*.

3.1 Vektorski prostor

Skalar je neko število, $x \in \mathbb{R}$ ali $z \in \mathbb{Z}$. *Vektor* je n-terica števil, denimo v prostoru $\mathbb{R}^n$ ali $\mathbb{C}^n$. n imenujemo *dimenzija* prostora. Vektor zapišemo kot stolpec *komponent*

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}. \tag{3.1}$$

Vektor si lahko predstavljamo geometrijsko kot usmerjeno daljico v prostoru ali pa kot povsem abstrakten algebrajski pojem.

Vektorski prostor je množica vseh vektorjev z dvema zahtevama:

1. Vektorje lahko seštevamo po komponentah,

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{bmatrix}. \tag{3.2}$$

2. Vektorje lahko pomnožimo s skalarjem k,

$$k \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ka_1 \\ \vdots \\ ka_n \end{bmatrix}. \tag{3.3}$$

Vektorski prostor je osnovni pojem *linearne algebre*, pomembne veje matematike.

Baza je nabor vektorjev $\mathbf{e}_i$, ki razpenjajo cel prostor: poljubni vektor v vektorskem prostoru lahko zapišemo kot linearno kombinacijo baznih vektorjev,

$$\mathbf{v} = v_1\mathbf{e}_1 + \ldots + v_n\mathbf{e}_n. \tag{3.4}$$

Količine v_i so skalarji, ki tvorijo *komponente* ali *koordinate* vektorja v izbrani bazi. Bazni vektorji morajo biti linearno neodvisni, kar pomeni, da nobeden izmed njih ne sme biti zapisan kot linearna kombinacija preostalih. Na primer $\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$ in $\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$ niso linearno neodvisni, saj je tretji vsota prvih dveh. Dimenzija vektorskega prostora je enaka številu baznih vektorjev. Obstajajo tudi neskončno dimenzionalni vektorski prostori.

Standardna baza je

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \ldots, \quad \mathbf{e}_n = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{3.5}$$

Bazni vektorji določajo koordinatni sistem. Zapišemo lahko

$$\mathbf{v} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + \ldots + x_n\mathbf{e}_n = x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \ldots + x_n \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}. \tag{3.6}$$

Koordinate x_i v standardni bazi se imenujejo tudi *kartezične* koordinate. Če si izberemo drugačno bazo $\{\mathbf{f}_i\}$, bodo komponente y_i v zapisu $\mathbf{v} = \sum_i y_i\mathbf{f}_i$ drugačne od komponent x_i v zapisu $\mathbf{v} = \sum_i x_i\mathbf{e}_i$, čeprav imamo opravka z istim vektorjem $\mathbf{v}$.

3.2 Skalarni produkt

Skalarni produkt je predpis, ki dvema vektorjema priredi skalarno vrednost: $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 = c$. V Evklidskem prostoru velja, denimo, $\mathbf{AB} \cdot \mathbf{AC} = |\mathbf{AB}|\,|\mathbf{AC}| \cos\theta$, kjer je θ kot med daljicama AB in AC. Algebrajsko za $\mathbb{R}^n$ velja

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1b_1 + \ldots + a_nb_n. \tag{3.7}$$

Posplošitev za $\mathbb{C}^n$ se razlikuje v pomembni podrobnosti. Velja namreč

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1^*b_1 + \ldots a_n^*b_n, \tag{3.8}$$

kjer zvezdica označuje kompleksno konjugiranje, $z^* = \bar{z}$. Prednost te definicije je, da je $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$ nenegativno realno število, zato lahko vpeljemo pojem *norme* (dolžine vektorja) podobno kot v realnih vektorskih prostorih:

$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}. \tag{3.9}$$

Normirati vektor pomeni, da ga podaljšamo oziroma skrajšamo tako, da bo imel normo 1:

$$\mathbf{v} \to \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|}. \tag{3.10}$$

Skalarni produkt pogosto zapišemo z oklepaji:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = a_1^*b_1 + \ldots + a_n^*b_n. \tag{3.11}$$

Paziti pa moramo, da velja

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{b}, \mathbf{a})^*. \tag{3.12}$$

Če je skalarni produkt dveh vektorjev enak nič, sta vektorja med seboj *pravokotna* ali *ortogonalna*.

Dualni vektorji so vrstice $\begin{bmatrix} v_1^* & \ldots & v_n^* \end{bmatrix}$. Velja torej

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \left(\begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} a_1^* & \ldots & a_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1^*b_1 + \ldots + a_n^*b_n. \tag{3.13}$$

Vektor vrstico si lahko tolmačimo tudi kot $1 \times n$ matriko, vektor stolpec pa kot $n \times 1$ matriko. Veljajo običajna pravila za matrično množenje: vsak element matrike rezultata dobimo kot produkt vrstice levega faktorja s stolpcem desnega faktorja.

Ortonormirana baza je baza, za katero velja

$$(\mathbf{f}_i, \mathbf{f}_j) = \delta_{ij}, \tag{3.14}$$

kjer je δ_{ij} *Kroneckerjev simbol delta*, definiran kot $\delta_{ij} = 1$, če $i = j$, in 0 sicer. To pomeni, da so vektorji med seboj pravokotni, vsak izmed njih pa ima normo 1. Za standardno bazo to očitno velja.

3.3 Bra-ket (Diracov) zapis

Eleganten zapis vektorjev je iznašel Dirac. Uporabljali ga bomo tudi mi. Vektorje zapišemo kot *ket* (navpična črta in lomljeni desni oklepaj), $|\psi\rangle$. Dualne vektorje zapišemo kot *bra* (lomljeni levi oklepaj in navpična črta), $\langle\psi|$. Skalarni produkt je produkt braja z leve in keta z desne, pri čemer lahko eno izmed dveh navpičnih črt izpustimo, torej $\langle\psi|\phi\rangle$ namesto $\langle\psi|\,|\phi\rangle$. Imeni bra in ket prideta iz angl. bracket (oklepaj).

Pišemo lahko torej $\langle A| = \begin{bmatrix} a_1^* \dots a_n^* \end{bmatrix}$, $|B\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$ in sledi

$$\langle A|B\rangle = (|A\rangle, |B\rangle) = \begin{bmatrix} a_1^* \dots a_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i. \tag{3.15}$$

Norma vektorja je torej $\sqrt{\langle A|A\rangle}$, kar zapišemo tudi kot $\|\,|A\rangle\,\|$.

3.4 Hilbertov prostor

Hilbertov prostor je vektorski prostor z definiranim skalarnim produktom. Med Hilbertove prostore spadajo navadni Evklidski prostor ter prostori realnih in kompleksnih vektorjev, $\mathbb{R}^n$ in $\mathbb{C}^n$.

Sedaj smo si pripravili matematično podlago za naslednjo trditev:

postulat 1

Kvantno stanje je element Hilbertovega prostora.

V nadaljevanju bomo pojma stanje in vektor uporabljali kot sinonima. Izbira ustreznega Hilbertovega prostora je odvisna od konkretnega problema, s katerim imamo opravka, kar je podobno izbiri nabora spremenljivk, potrebnih za opis klasičnega sistema. Hilbertov prostor mora biti kompleksen, ker faze kompleksnih komponent igrajo ključno vlogo v teoriji. Imaginarna enota i nastopa tudi v osnovni enačbi gibanja, Schrödingerjevi enačbi (razdelek 3.20). V klasični mehaniki stanje sistema opredelimo tako, da podamo vrednosti vseh spremenljivk, v kvantni mehaniki pa tako, da izberemo element Hilbertovega prostora.

3.5 Dvonivojski sistem

Dvonivojski sistem je kvantni sistem z dvodimenzionalnim Hilbertovim prostorom. Ta ima dve bazni stanj, ki ju označimo z $|0\rangle$ in $|1\rangle$. Tudi poljubne linearne kombinacije $|0\rangle$ in $|1\rangle$ so dovoljena stanja, saj so ravno tako elementi Hilbertovega prostora. Velja torej načelo superpozicije tako kot pri valovanjih. Do danes ni še noben eksperiment nakazal možnosti, da bi v kvantni mehaniki obstajale kakšne nelinearnosti, ki bi kvarile veljavnost načela superpozicije.

Splošno stanje dvonivojskega sistema je torej

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle\,, \tag{3.16}$$

kjer sta α in $\beta \in \mathbb{C}$ koeficienta. Imenujemo ju tudi *verjetnostni amplitudi* in sta podobni kompleksnim amplitudam pri valovanjih. Stanje zapišemo tudi kot vektor stolpec

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}, \tag{3.17}$$

če se odločimo za uporabo baze

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{3.18}$$

3.6 Spin

Vrtilna količina točkastega telesa v klasični mehaniki se zapiše

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{r} \times (m\mathbf{v}). \tag{3.19}$$

Tudi elektron, obravnavan v okviru kvantne mehanike, ima tirno vrtilno količino, povezano z njegovim gibanjem v prostoru. Ima pa tudi lastno (notranjo) vrtilno količino, *spin*. Uporabna je analogija s planetom Zemlja, ki kroži okrog Sonca (tirna vrtilna količina), hkrati pa se vrti okoli lastne osi (lastna vrtilna količina). Obstoj spina je presenetljiv, saj je elektron točkast (ali, bolje, nesestavljen) in ne moremo reči, da se vrti okoli lastne osi. Lastna vrtilna količina torej ni povezana z vrtenjem mas, temveč je intrinzična lastnost delca. To je razvidno tudi iz tega, da lahko spin pripišemo brezmasnim delcem; foton ima spin 1, čeprav nima mase.

Elektron je fermion in ima spin $S = 1/2$. Njegovo lastno vrtilno količino zapišemo kot $\mathbf{\Gamma} = \hbar\mathbf{S}$, kjer je $\mathbf{S} = \{S_x, S_y, S_z\}$ vektor brezdimenzijskih komponent, Planckova konstanta $\hbar$ pa ima ravno dimenzije vrtilne količine, $[\mathrm{Js}] = [\mathrm{kgm}^2/\mathrm{s}]$. V kvantni mehaniki stanje vrtilne količine opredelimo s *spinskim kvantnim številom*, ki je projekcija spina na izbrano smer, recimo komponenta S_z vzdolž osi z. Dovoljene so samo diskretne vrednosti od $-S$ do S s korakom 1: komponenta vrtilne količine je *kvantizirana* na $2S+1$ različnih vrednosti. Pri elektronu je lahko torej $S_z = 1/2$ ali $S_z = -1/2$. Včasih rečemo, da spin elektrona »kaže gor« oziroma »dol«, zato spinsko stanje zapišemo tudi kot $|\uparrow\rangle$ in $|\downarrow\rangle$. Komponenta vrtilne količine v smeri z je za faktor $\hbar$ večja od brezdimenzijske količine S_z:

$$\Gamma_z = \hbar S_z = \pm\frac{\hbar}{2}. \tag{3.20}$$

V klasični fiziki krožeči nabiti delci ustvarijo *magnetni (dipolni) moment*

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} q \mathbf{r} \times \mathbf{v}, \tag{3.21}$$

kjer je q naboj delca. Od tod sledi zveza

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m} \boldsymbol{\Gamma}. \tag{3.22}$$

Izkaže se, da velja podobna zveza tudi za notranjo vrtilno količino elektrona:

$$\boldsymbol{\mu} = g_S \frac{-e_0}{2m} \boldsymbol{\Gamma} = -g_S \frac{e_0 \hbar}{2m} \mathbf{S}, \tag{3.23}$$

kjer je koeficient $g_S = 2{,}002\,319$. Popravek k 2 se imenuje anomalni magnetni moment elektrona in ga je možno izračunati v okviru QED. Zaradi izjemnega ujemanja z meritvami predstavlja pomemben uspeh teorije.

3.7 Sternov in Gerlachov eksperiment

Stern in Gerlach sta leta 1922 raziskovala spremembo smeri delcev med letom skozi nehomogeno magnetno polje (slika 3.1). Poskuse sta opravljala z atomi, ki so električno nevtralni; nabiti delci imajo namreč v magnetnem polju ukrivljeno pot zaradi Lorentzeve sile $\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, to pa ju ni zanimalo. Nekateri atomi imajo magnetni dipolni moment zaradi lastne vrtilne količine, torej se obnašajo kot drobne magnetnice, podobno kot zgoraj opisano za elektrone. Če je magnetno polje homogeno, na magnetni dipol ne deluje magnetna sila in polje ne vpliva na smer gibanja delca. Če pa je polje nehomogeno, recimo če njegova jakost narašča v smeri osi z, na dipol deluje magnetna sila in pride do odklona smeri gibanja. Naj kaže polje v smeri osi z, torej je od nič različna le komponenta B_z. Energija magnetnega momenta μ v magnetnem polju $\mathbf{B}$ je

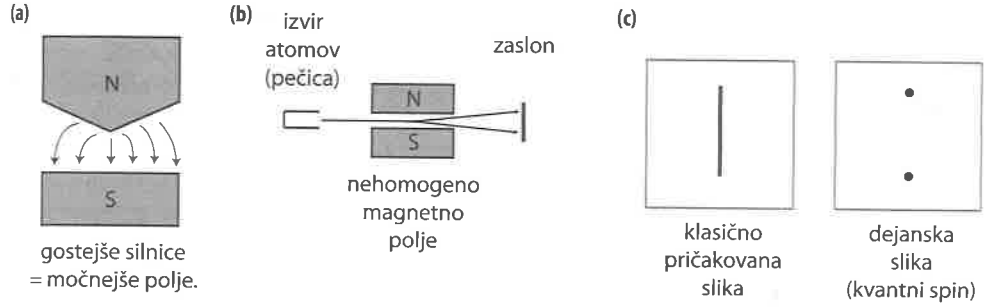
$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B_z, \tag{3.24}$$

sila v smeri z pa je

$$F_z = -\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}z} = \mu_z \frac{\mathrm{d}B_z}{\mathrm{d}z}. \tag{3.25}$$

Odvisno od predznaka momenta μ_z se smer gibanja deleca odkloni v smeri proti močnejšemu polju ali v smeri proti šibkejšemu polju, glej sliko 3.1(b).

Za atom brez magnetnega momenta bi na zaslonu videli eno samo piko. Za atom z magnetnim momentom bi na temeljih klasične fizike na zaslonu pričakovali zvezno črto, ki ustreza vsem možnim komponentam μ_z od minimalne $-\mu$ do maksimalne μ, kjer je μ velikost magnetnega momenta atoma. Dejansko so v eksperimentu opazili dve ločeni piki, glej sliko 3.1(c). Tako so odkrili kvantizacijo vrtilne količine: lastni magnetni moment je neposredno povezan z lastno vrtilno količino (spinom), ki ima v tem primeru dve možni vrednosti komponente, $S_z = \pm 1/2$, zato velja $\Gamma_z = \pm\hbar/2$. To bomo bolje razumeli po obravnavi meritev v kvantni mehaniki v naslednjih razdelkih.



Slika 3.1. (a) Ustvarjanje nehomogenega magnetnega polja. (b) Postavitev pri eksperimentu Sterna in Gerlacha. (c) Sliki na zaslonu, kot ju napovedujeta klasična oziroma kvantna mehanika.

Sternov in Gerlachov eksperiment je način merjenja komponente spina v smeri naraščajočega magnetnega polja. Aparaturo lahko obrnemo v različne smeri in merimo komponente Γ_x, Γ_y in Γ_z. V nadaljevanju bomo spoznali, da ne moremo izmeriti več komponent sočasno (razdelek 6.6).

3.8 Verjetnostna interpretacija

Ko opravimo meritev neke lastnosti kvantnega dvonivojskega sistema, denimo določimo spinsko kvantno število S_z, ugotovimo, da kaže spin ali gor ali dol. Nikoli ne izmerimo »nekaj vmes«. Če ponavljamo meritve na povsem enako pripravljenem sistemu v stanju $|\psi\rangle = \alpha\,|\uparrow\rangle + \beta\,|\downarrow\rangle$, bomo včasih izmerili gor, včasih pa dol. Verjetnost je določena z $|\alpha|^2$ oziroma z $|\beta|^2$. Veljati mora

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \tag{3.26}$$

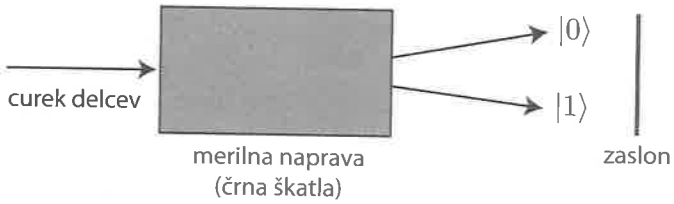
saj je vsota obeh verjetnosti enaka 1. Zato moramo vektorje, ki ustrezajo stanjem, vedno normirati. Rezultata posamezne meritve v naprej ne moremo napovedati (razen če je $|\alpha|^2 = 1$ in $\beta = 0$ ali pa $|\beta|^2 = 1$ in $\alpha = 0$). Da je verjetnost kvadrat absolutne vrednosti verjetnostne amplitude, je analogno temu, da je intenziteta valovanja kvadrat absolutne vrednosti kompleksne amplitude (glej razdelek 1.6).

Kot primer vzemimo stanje

$$|\psi\rangle = \frac{3}{5}\,|0\rangle + \frac{4}{5}\,|1\rangle\,. \tag{3.27}$$

Stanje je normirano, saj je $(3/5)^2 = 0{,}36$ in $(4/5)^2 = 0{,}64$, torej je vsota 1. Če bi opravili meritev, ali je delec v stanju $|0\rangle$ ali $|1\rangle$, na 100 popolnoma enako pripravljenih delcih, bi (najbolj verjetno) v 36 primerih dobili rezultat 0, v 64 primerih pa 1. Shematsko si lahko predstavljamo, da takšne meritve opravimo tako, da curek delcev pošljemo v merilno napravo, ki loči delce in ukloni njihovo pot v odvisnosti od stanja. Delci, ki letijo iz škatle, pristanejo na zaslonu v dveh različnih točkah, odvisno od

njihovega kvantnega stanja. Ker so delci, ki ustrezajo različnim kvantnim stanjem $|0\rangle$ ali $|1\rangle$, prostorsko ločeni na celotni poti do zaslona, med seboj po izhodu iz merilne naprave ne morejo več interferirati, zato je njihova trajektorija (»gor« ali »dol«) že klasična informacija, torej rezultat meritve.



Slika 3.2. Meritev v kvantni mehaniki: kvantno stanje pomerimo tako, da delcu spremenimo trajektorijo skozi merilno napako v odvisnosti od njegovega stanja.

3.9 Meritve v klasični in v kvantni mehaniki

V klasični fiziki lastnosti sistema obstajajo neodvisno od meritve, so elementi realnosti, spremenljivke, ki povsem opišejo sistem. Meritev jih le razkrije. Primer je položaj delca, ki je dobro določen ne glede na to, ali je sistem opazovan (»Luna obstaja, tudi če je nihče ne opazuje.«).

V kvantni mehaniki vektor stanja določa verjetnosti, da bomo pri meritvi dobili določen rezultat. »Merljive lastnosti« sistema nimajo neodvisnega obstoja, saj sam postopek meritve vpliva na realnost. Pomembno je poudariti, da dva delca iz množice lahko dasta različna rezultata, čeprav sta opisana pred vhodom v merilno napravo s povsem enakim vektorjem stanja $|\psi\rangle$ in se pred meritvijo v prav ničemer ne razlikujeta. *Kvantna nedoločenost* je bistvena lastnost kvantnomehanskih sistemov.

V začetku razvoja kvantne mehanike so poskušali razviti *teorije skritih spremenljivk*. Predpostavljali so, da kvantno stanje ni popoln opis, temveč da obstajajo dodatne »skrite« spremenljivke, in da kvantna mehanika ni pravilna oziroma popolna, temveč da bi kompletna teorija morala biti *deterministična*, ne pa *verjetnostna*. Verjetnostna interpretacija kvantne mehanike je motila, denimo, A. Einsteina (»Bog ne kocka.«). Einstein, Podolski in Rosen so leta 1935 predlagali miselni eksperiment, ki naj bi pokazal absurdnost kvantne mehanike. Bell je kasneje, leta 1964, izpeljal neenačbe, ki opredeljujejo največjo mero korelacij v klasični teoriji ob predpostavki *lokalnega realizma* (lokalnost: na predmet vpliva samo njegova neposredna okolica; realizem: predmeti imajo lastnosti neodvisno od meritve). Eksperimentalni test je kasneje pokazal, da so Bellove neenačbe kršene, kar pomeni, da ni skritih spremenljivk in da je hipoteza lokalnega realizma napačna (glej razdelek 6.8).

3.10 Opazljivke in operatorji

Oglejmo si bolj podrobno, kako proces meritve v kvantni mehaniki opišemo formalno matematično. Vsaki merljivi količini (rečemo tudi fizikalni *opazljivki*) bomo priredili ustrezen linearni operator. *Operator* A je ukaz, ki deluje na vektor $|\psi\rangle$ in kot rezultat vrne nek drug vektor $|\phi\rangle$, torej $A|\psi\rangle = |\phi\rangle$. Operatorju zato rečemo tudi *preslikava*. Operator je linearen, če velja

$$A\left(\sum_{i=1}^{n} a_i |e_i\rangle\right) = \sum_{i=1}^{n} a_i A(|e_i\rangle), \tag{3.28}$$

kjer so a_i konstante, $|e_i\rangle$ pa tvorijo ortonormirano bazo za n-dimenzionalni Hilbertov prostor. Linearen operator je povsem definiran s svojim delovanjem na bazne vektorje. Pogoj linearnosti operatorjev je ključen v kvantni mehaniki, sicer ne bi veljalo načelo superpozicije.

Linearne operatorje lahko opišemo z njihovo *matrično upodobitvijo* (reprezentacijo). Naj velja

$$A|e_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} A_{ij} |e_i\rangle. \tag{3.29}$$

Z matriko A_{ij}, ki ima $n \times n$ elementov, smo delovanje operatorja povsem opredelili; obstaja ekvivalenca med operatorji in matrikami. Pogosto je bolj pripravno računati z matrikami kot z abstraktnimi operatorji.

Primer: V vektorskem prostoru dvonivojskega sistema naj za operator A velja $A|0\rangle = |1\rangle$ in $A|1\rangle = |0\rangle$. Matrika operatorja je očitno

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{3.30}$$

Obstaja operator *identiteta*, ki vrne vektor nespremenjen $\mathbb{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle$. Ker po definiciji velja $\mathbb{I}|0\rangle = |0\rangle$, $\mathbb{I}|1\rangle = |1\rangle$, je

$$\mathbb{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{3.31}$$

To je torej kar enotska matrika.

V Diracovem bra-ket zapisu lahko zvezo med operatorjem in matrično upodobitvijo zapišemo tudi kot

$$A = \sum_{ik} |e_i\rangle A_{ik} \langle e_k|. \tag{3.32}$$

Izraz je popolnoma ekvivalenten izrazu (3.29). Preverimo: z desno stranjo enačbe (3.32) delujemo na $|e_j\rangle$. Dobimo

$$\begin{aligned} A|e_j\rangle &= \sum_{ik} |e_i\rangle A_{ik} \langle e_k|e_j\rangle = \sum_{ik} |e_i\rangle A_{ik}\delta_{kj} \\ &= \sum_{ik} |e_i\rangle A_{ij}\delta_{kj} = \sum_{i} |e_i\rangle A_{ij}, \end{aligned} \tag{3.33}$$

kar je enako desni strani enačbe (3.29). Pri dokazu smo upoštevali, da tvorijo $|e_j\rangle$ ortonormirano bazo (vrstica 2), da je $k = j$ pri od nič različnih prispevkih (vrstica 3), in da je $\sum_k \delta_{kj} = 1$, ker je vedno en sam δ_{kj} (tisti pri $k = j$) enak ena, vsi ostali pa nič (vrstica 4).

3.11 Hermitska konjugacija

Pomembna operacija v linearni algebri je *hermitska konjugacija* operatorja A, ki jo označimo z $A^\dagger$ in je definirana preko skalarnega produkta z

$$(|a\rangle, A|b\rangle) = (A^\dagger|a\rangle, |b\rangle) = (|b\rangle, A^\dagger|a\rangle)^* \tag{3.34}$$

ali v Diracovem zapisu

$$\langle a|A|b\rangle = (\langle b|A^\dagger|a\rangle)^*. \tag{3.35}$$

Znak † imenujemo *bodalo*. Hermitska konjugacija je posplošitev pojma kompleksne konjugacije kompleksnih števil na operatorje in matrike. V matričnem zapisu hermitsko konjugacijo dosežemo s transpozicijo in kompleksno konjugacijo matričnih elementov:

$$(A^\dagger)_{ij} = (A^*)^T_{ij} = A^*_{ji}. \tag{3.36}$$

Primer:

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix}. \tag{3.37}$$

Velja $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ in $(A^\dagger)^\dagger = A$. Definiramo lahko še $|v\rangle^\dagger = \langle v|$. Potem smemo zapisati $(A|v\rangle)^\dagger = \langle v|A^\dagger$.

Hermitski (ali *sebi-adjungirani*) operatorji so tisti, za katere velja $A^\dagger = A$. Hermitski operatorji so posplošitev pojma realnih števil, ki so enaka svojim kompleksno konjugiranim vrednostim ($z = \bar{z} \to z \in \mathcal{R}$), na operatorje.

Sedaj lahko zapišemo

postulat 2

V kvantni mehaniki opazljivkam ustrezajo hermitski operatorji.

3.12 Operatorji za spin

Kot konkreten primer si oglejmo operatorje za spin elektrona. Elektron je fermion z $S = 1/2$, kar ustreza dvonivojskemu sistemu s stanjema $|\uparrow\rangle$ in $|\downarrow\rangle$. Hilbertov prostor je dvodimenzionalen, zato lahko operatorje za komponente vrtilne količine S_x, S_y in S_z zapišemo z nekimi 2×2 matrikami. Pravo izbiro je našel Pauli okoli leta 1925:

$$S_x = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_x, \quad S_y = \begin{bmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_y, \quad S_z = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_z. \tag{3.38}$$

Uvedli smo hermitske matrike σ, ki se imenujemo *Paulijeve matrike*:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{3.39}$$

Včasih k naboru Paulijevih matrik dodamo še identiteto $\mathbb{I}$, ki jo tedaj označimo z σ_0. Paulijeve matrike so izjemno pomembne v kvantnem računalništvu.

3.13 Lastna stanja, lastne vrednosti

Problem lastnih vrednosti je iskanje vektorjev $|v\rangle$ in vrednosti λ, da za operator A velja

$$A|v\rangle = \lambda|v\rangle. \tag{3.40}$$

Takšen $|v\rangle$ se imenuje *lastni vektor*, vrednost λ pa *lastna vrednost*. Učinek A na $|v\rangle$ je torej, da lastni vektor zgolj podaljša ali skrajša, ne spremeni pa mu smeri.

Rezultat meritve količine, opisane z operatorjem A, je ena izmed njegovih lastnih vrednosti (glej naslednji razdelek 3.14 o Bornovem pravilu). Ker je rezultat meritve realna količina, morajo biti vse lastne vrednosti operatorja realne. Hermitski operatorji ta pogoj izpolnjujejo.

Linearno neodvisnih lastnih vektorjev hermitskega operatorja je toliko, kot je dimenzija Hilbertovega prostora. Lastni vektorji za različne lastne vrednosti so ortogonalni. Iz njih lahko tvorimo ortonormirano bazo. Lastna vednost λ je lahko enaka za več lastnih vektorjev; rečemo, da je takšna lastna vrednosti *degenerirana*.

Lastne vrednosti najlaže določimo za diagonalne matrike, pri katerih so vsi izvendiagonalni matrični elementi enaki nič. Lastne vrednosti so kar diagonalni elementi, pripadajoči lastni vektorji pa so bazni vektorji. Primer je matrika σ_z. Obstajata dva lastna vektorja, eden pripada lastni vrednosti $\lambda = 1$, drugi lastni vrednosti $\lambda = -1$, saj velja

$$\sigma_z \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = +1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{in} \quad \sigma_z \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{3.41}$$

V splošnem pa lastne vrednosti določamo s *karakteristično enačbo* $\det(A - \lambda\mathbb{I}) = 0$, ki je polinom reda enakega dimenziji matrike. Množica vseh lastnih vrednosti se imenuje *spekter* operatorja. Za velike matrike lastne vrednosti računamo numerično.

Primer: $\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$. Velja $\sigma_x - \lambda\mathbb{I} = \begin{bmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{bmatrix}$, torej $\det(A - \lambda\mathbb{I}) = \lambda^2 - 1 = 0$. Lastni vrednosti sta dve, $\lambda_1 = 1$ in $\lambda_2 = -1$. Lastne vektorje nato določimo tako, da rešujemo sistem $A|v\rangle = \lambda|v\rangle$. Za $\lambda_1 = 1$ dobimo

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad \to x = y, \qquad \text{torej} \quad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{3.42}$$

Vrednost x smo izbrali tako, da je lastni vektor normiran na 1. Za $\lambda_2 = -1$ pa dobimo

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad \to x = -y, \qquad \text{torej} \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \tag{3.43}$$

Določanje lastnih vrednosti in lastnih vektorjev imenujemo tudi *diagonalizacija matrike*, saj ob spremembi baze iz standardne baze v bazo lastnih vektorjev postane matrika operatorja diagonalna. Bra-ket zapis operatorja v diagonalni bazi je

$$A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |i\rangle \langle i|, \tag{3.44}$$

pri čemer morajo biti lastni vektorji $|i\rangle$ ortonormirani. Temu zapisu rečemo tudi *razvoj operatorja po lastnih stanjih.*

Primer: Preverimo to za σ_x. Res velja

$$1\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} - 1\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

3.14 Bornovo pravilo

Zanima nas opazljivka, ki jo opisuje hermitski operator $A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |i\rangle \langle i|$.

postulat 3: Bornovo pravilo

Pri meritvi opazljivke A v stanju $|\psi\rangle$ bomo dobili rezultat λ_j z verjetnostjo

$$p_j = |\langle j|\psi\rangle|^2. \tag{3.45}$$

Z drugimi besedami: če je $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i |i\rangle$, tako da velja $\sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 = 1$, potem je $p_j = |c_j|^2$.

Če izmerimo spin elektrona vzdolž poljubne smeri, bo rezultat vedno $+1/2$ ali $-1/2$, saj imajo vsi trije opratorji S_x, S_y in S_z enaki lastni vrednosti, $\pm 1/2$.

Primer: Naj bo sistem v stanju

$$|\psi\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{3.46}$$

Če opravimo meritev z aparatom Sterna in Gerlacha s poljem v smeri osi z, je ustrezna opazljivka

$$S_z = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle \langle\uparrow| - \frac{1}{2} |\downarrow\rangle \langle\downarrow|. \tag{3.47}$$

Takoj vidimo, da je $p_\uparrow = 1$ in $p_\downarrow = 0$.

Če pa opravimo meritev s poljem v smeri osi x na sistemu v istem stanju, je ustrezna opazljivka

$$S_x = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} |+\rangle \langle+| - \frac{1}{2} |-\rangle \langle-|, \tag{3.48}$$

kjer smo lastni stanji označili z

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad \text{in} \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle). \tag{3.49}$$

Po Bornovem pravilu ugotovimo, da je

$$p_+ = |\langle+|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\uparrow| + \langle\downarrow|) |\uparrow\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}, \tag{3.50}$$

in

$$p_- = |\langle-|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\uparrow| - \langle\downarrow|) |\uparrow\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}. \tag{3.51}$$

Ta primer je zelo poučen, saj kaže na to, kako močno so rezultati meritve odvisni od orientacije magnetnega polja. Stanje $|\uparrow\rangle$, ki je lastno stanje operatorja S_z, se v bazi lastnih stanj operatorja S_x zapiše kot superpozicija lastnih stanj $|+\rangle$ in $|-\rangle$, saj velja

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle), \tag{3.52}$$

zato je tudi rezultat meritve 50 % verjetnosti za odklon v smer $+x$ in 50 % za odklon v smer $-x$.

Pogosto nas ne zanimajo verjetnosti za posamezne izide meritve operatorja A, temveč zgolj povprečna (oziroma, bolj natančno, pričakovana) vrednost izida, če enako meritev velikokrat ponovimo, kar zapišemo kot

$$\langle A\rangle = \sum_i \lambda_i p_i, \tag{3.53}$$

kjer so p_i verjetnosti za izide λ_i. Z uporabo Bornovega pravila lahko pokažemo, da za *pričakovano vrednost* opazljivke A, $\langle A\rangle$, velja

$$\langle A\rangle = \sum_i \lambda_i |\langle i|\psi\rangle|^2 = \sum_i \lambda_i \langle\psi|i\rangle \langle i|\psi\rangle = \langle\psi| \left(\sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i| \right) |\psi\rangle = \langle\psi| A |\psi\rangle. \tag{3.54}$$

Upoštevali smo, da je $|z|^2 = z^* z$, ter lastnost skalarnega produkta $\langle a|b\rangle = (\langle b|a\rangle)^*$, nato smo samo preuredili izraz, na koncu pa upoštevali razvoj operatorja A po lastnih vrednostih.

Pri meritvi spina v smeri x stanja $|\uparrow\rangle$ je tako pričakovana vrednost meritve

$$\langle\uparrow| S_x |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0. \tag{3.55}$$

3.15 Faze verjetnostnih amplitud

Ker verjetnosti pri meritvah računamo kot absolutne vrednosti verjetnostnih amplitud α in β, se pojavi vprašanje, ali so razlike v predznakih oziroma fazah sploh pomembne. Vzemimo primer dveh stanj

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{3}{5}|0\rangle + \frac{4}{5}|1\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{3}{5}|0\rangle - \frac{4}{5}|1\rangle. \end{aligned} \tag{3.56}$$

V obeh primerih je 36 % verjetnost, da bomo sistem našli v stanju $|0\rangle$ in 64 % v stanju $|1\rangle$. Pa vendar se stanji močno razlikujeta! Zadostuje, da pomerimo v kakšni drugi bazi, recimo $|+\rangle$ in $|-\rangle$. Za prvo stanje dobimo verjetnosti

$$\begin{aligned} p_+ &= \left|\frac{3}{5}\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{4}{5}\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{49}{50}, \\ p_- &= \left|\frac{3}{5}\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{4}{5}\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{50}, \end{aligned} \tag{3.57}$$

za drugo stanje pa ravno obratno, $p_+ = 1/50$ in $p_- = 49/50$.

Omenimo še, da po drugi strani »globalne« faze kvantnih stanj nimajo popolnoma nobenega vpliva na meritev. Imejmo stanji $|\psi_1\rangle$ in $|\psi_2\rangle = e^{i\phi}|\psi_1\rangle$, ki se razlikujeta zgolj v globalni fazi ϕ. Velja

$$|\langle i|\psi_2\rangle|^2 = \left|\langle i| e^{i\phi} |\psi_1\rangle\right|^2 = \left|e^{i\phi}\langle i|\psi_1\rangle\right|^2 = \left|e^{i\phi}\right|^2 |\langle i|\psi_1\rangle|^2 = |\langle i|\psi_1\rangle|^2, \tag{3.58}$$

torej dasta po Bornovem pravilu obe stanji povsem identične rezultate pri čisto vseh meritvah. Fazne razlike med posameznimi verjetnostnimi amplitudami pa so pomembne. Denimo pri $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta e^{i\phi}|1\rangle$ lahko *relativno fazo* ϕ določimo v interferenčnih poskusih. Če povzamemo, pri stanju

$$\alpha e^{i\phi_\alpha}|0\rangle + \beta e^{i\phi_\beta}|1\rangle = e^{i\phi_\alpha}\left(\alpha|0\rangle + \beta e^{i(\phi_\beta - \phi_\alpha)}|1\rangle\right) \tag{3.59}$$

ima merljive posledice samo razlika faz $\phi_\beta - \phi_\alpha$, ne pa posamezni fazi ϕ_α in ϕ_β.

3.16 Kubit

Bit je količina informacije, ki jo nosi klasični sistem z dvema stanjema, ki ju označimo z binarnima vrednostima 0 in 1. Primeri so številni: dve različni napetosti v digitalni logiki, dve smeri magnetizacije v magnetnem mediju, vtisnjene luknjice na zgoščenki, naboj na kondenzatorju v pomnilnikih DRAM, položaj klecnega stikala in podobno. Opazimo, da je konkretna informacija vedno vezana na svojo fizično reprezentacijo. To pomeni, da je vezana na zakone fizike. To velja tudi za obdelavo podatkov: če nek predlagani algoritem krši zakone fizike, potem zagotovo ni izvedljiv.

Kubit je pojem, vpeljan kot mera za *kvantno informacijo*. Kubit je namreč količina informacije, ki jo nosi kvantni dvonivojski sistem. Kubit lahko obravnavamo kot abstrakten matematični pojem ali kot opis stanja konkretnega fizičnega dvonivojskega sistema.

Klasični bit ima lahko dve vrednosti, 0 ali 1. Podobno je lahko kubit v stanjih $|0\rangle$ ali $|1\rangle$, lahko pa je tudi v poljubni linearni kombinaciji obeh,

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \tag{3.60}$$

z $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, kar je ključna razlika med bitom in kubitom.

Koliko spremenljivk potrebujemo, da popolnoma opredelimo kubit? α in β sta kompleksni spremenljivki, torej imamo štiri realne količine. Zaradi normalizacije mora veljati $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, torej ena prostostna stopnja odpade. Zapišemo lahko

$$|\alpha| = \cos(\theta/2), \quad |\beta| = \sin(\theta/2). \tag{3.61}$$

Torej je $\alpha = e^{i\phi_\alpha}\cos(\theta/2)$ in $\beta = e^{i\phi_\beta}\sin(\theta/2)$, kjer sta ϕ_a in ϕ_b dve fazi. Videli smo že, da globalne faze niso merljive, zato vpeljemo razliko faz $\phi = \phi_b - \phi_a$ in fiksiramo globalno fazo, tako da velja

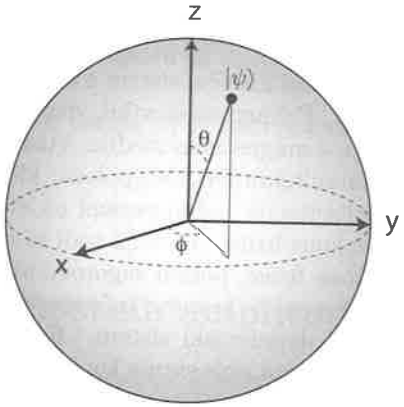
$$\alpha = \cos(\theta/2), \quad \beta = e^{i\phi}\sin(\theta/2), \tag{3.62}$$

torej je

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)|1\rangle. \tag{3.63}$$

Obstajata natanko dva prosta parametra, kota θ in ϕ. Stanje lahko prikažemo kot točko na krogelni lupini, ki jo imenujemo *Blochova sfera*, slika 3.3. Kota ϕ in θ sta ravno *azimut* in *polarni kot* v krogelnem koordinatnem sistemu. Severni pol $\theta = 0$ je stanje $|0\rangle$, južni pol $\theta = \pi$ pa stanje $|1\rangle$.

Vsaka točka na sferi predstavlja možno stanje kubita. Čeprav je na površini sfere neskončno mnogo točk, to ne pomeni, da je možno s kubitom shraniti neskončno veliko klasične informacije. Omejitev je namreč merjenje v kvantni mehaniki. Ob meritvi stanja enega spina v smeri osi z sta možna zgolj dva izida. Skrita informacija se ob meritvi izgubi zaradi *kolapsa valovne funkcije* (glej spodaj). Če lahko pripravimo neskončno veliko identičnih kubitov, lahko opravlimo veliko meritev v različnih smereh in tako izluščimo vrednosti α in β; postopek se imenuje *kvantna tomografija*. Če pa imamo v posesti zgolj en kubit, lahko opravimo eno samo meritev in fazna informacija ostane skrita.



Slika 3.3. Blochova sfera in točka, ki ustreza stanju $|\psi\rangle = \cos(\theta/2)\,|0\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)\,|1\rangle$.

3.17 Kolaps valovne funkcije

Bornovo pravilo dopolnimo:

postulat 4

Če pri meritvi opazljivke $A = \sum_i \lambda_i\,|i\rangle\langle i|$ izmerimo vrednost λ_i, potem je takoj po meritvi sistem v lastnem stanju $|i\rangle$.

Rečemo tudi, da je meritev *destruktivna*. Po Copenhagenski (Kœbenhavnski) interpretaciji kvantne mehanike (Bohr, Heisenberg, 1924–27) opisuje valovna funkcija verjetnosti za izide. Ko meritev dejansko opravimo, vrednost merjene količine izvemo, zato negotovosti ni več in valovna funkcija doživi *kolaps* v stanje, ki ustreza izmerjeni vrednosti. Sprememba je hipna.

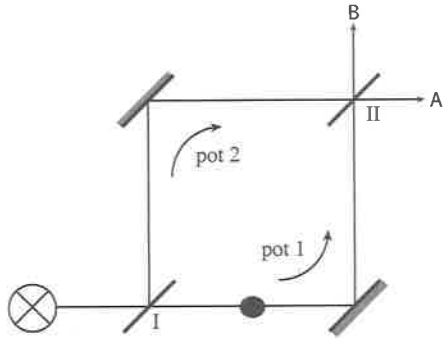
Primer: imejmo stanje $|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle$. Če merimo σ_z in izmerimo 1, potem je takoj po meritvi sistem v stanju $|\psi'\rangle = |0\rangle$.

Merilne naprave so klasične. Rezultat meritve je klasična lastnost, kot je, denimo, položaj kazalca na merilnem instrumentu, ki je dobro določeno stanje in ne superpozicija, kot je možno v kvantni mehaniki. Vprašanje povezave med kvantnim in klasičnim svetom je še vedno odprto vprašanje, ki pa presega samo fiziko in je bolj filozofske narave, saj med različnimi *interpretacijami* vsaj za zdaj ne znamo eksperimentalno razlikovati. Copenhagenska interpretacija je še vedno najbolj sprejeta, gotovo pa najbolj predavana interpretacija.

Možni ugovor je, da kvantna mehanika opisuje ves svet, zato bi skupaj z merjenim kvantnim sistemom morali tudi merilno napravo in opazovalca obravnavati kvantnomehansko. Celota bi tedaj bila deterministična. To je temelj *interpretacije številnih svetov*, po kateri se dejansko zgodijo vse možnosti, vendar se ob vsakem dogodku razveji vesolje glede na različne izide. Različna vesolja po daljšem času med seboj ne interferirajo, zato zaznamo en sam rezultat meritve.

3.18 Preizkuševalec bomb

Zanimiv miselni eksperiment sta predlagala Elitzur in Vaidman leta 1993. Imamo množico bomb, ki imajo zelo občutljiv detonator, saj jih aktivira že absorbcija enega samega fotona, vendar so nekatere izmed njih pokvarjene in fotona ne zaznajo. Radi bi dobili nekaj bomb, za katere bi z gotovostjo vedeli, da delujejo, ne da bi ob preizkusu eksplodirale. Je to sploh mogoče? V klasični fiziki nikakor ne.



Slika 3.4. Mach-Zehnderjev interferometer v postavitvi za opravljanje meritev brez interakcije. Narisan je žarek iz svetila, ki se razcepi na polprepustnem zrcalu (polne črta), potuje po dveh krakih (sivo senčeni črti sta navadni zrcali), in ponovno združi na izhodnem polprepustnem zrcalu, kjer pride do interference. A in B sta merilnika. V spodnji krak interferometra postavimo bombo (črna pika).

Poskusimo kvantno. Bombo postavimo v en krak Mach-Zehnderjevega interferometra skiciranega na sliki 3.4. To je naprava, v kateri žarek s polprepustnim zrcalom I razcepimo na dva, ki potujeta po ločenih poteh (1 in 2 na skici), nato pa se na izhodu naprave ponovno združita na polprepustnem zrcalu II in interferirata. Dolžine poti nastavimo tako, da v odsotnosti bombe vedno dobimo signal samo na merilniku A. Nato zmanjšamo intenziteto valovanja, tako da skozi napravo letijo posamezni fotoni. V spodnji krak (pot 1) postavimo bombo, ki bi jo želeli preizkusiti. Če je bomba pokvarjena, foton leti nemoteno in vedno ga zaznamo na senzorju A, kot če bombe sploh ne bi bilo. Če pa bomba deluje, pride do kolapsa valovne funkcije, ko prileti valovni paket fotona do detonatorja. Ker je foton v superpoziciji stanj (z enako verjetnostjo leti kot valovni paket v zgornjen ali v spodnjem kraku interferometra), sta možna dva izzida. Če je foton zaznan v spodnjem kraku (na poti 1), bo aktiviral bombo in jo izgubimo. Če pa foton ni zaznan v spodnjem kraku, se očitno nahaja v zgornjem kraku (na poti 2). V tem primeru do eksplozije ne pride, temveč foton leti naprej po poti 2 in se na zadnjem polprepustnem zrcalu (II) razcepi na valovna paketa, ki letita proti senzorjem A in B. Obstaja torej 50 % možnost, da dobimo signal na senzorju B. Desktruktivne interference na senzorju B, ki bi to možnost izničila, v tem primeru ni, saj foton zagotovo ni letel po spodnjem kraku (to vemo, ker ni bilo eksplozije). Vsak signal na senzorju B nam torej z gotovostjo pove, da bomba deluje. (Signal na senzorju A pa ne pomeni nujno, da je bomba pokvarjena.) Na ta način lahko torej iz

množice dobimo četrtino vseh delujočih bomb. Obstajajo bolj zapleteni postopki, s katerimi se da odbrati še večji delež.

Pomembno je poudariti, da detonator opravi meritev, ki poruši superpozicijo stanj, ni pa nujno, da je rezultat meritve, da foton obstaja na mestu detonatorja, temveč je lahko drugje. Po interpretaciji več svetov bi rekli, da vedno obstaja svet, v katerem delujoča bomba eksplodira, obstaja pa možnost, da smo mi v svetu, v katerem ni eksplodirala, vseeno pa vemo z gotovostjo, da je bomba delujoča.

Eksperiment, ki je potrdil pravilnost tega razmišljanja, je opravila skupina Zeilingerja leta 1994 (sicer brez eksplozivnih teles). Takšnim postopkom danes rečemo *meritev brez interakcije*.

3.19 Izrek o prepovedi kloniranja

Izrek o *prepovedi kloniranja* (angl. »no-cloning theorem«) je trditev, da ni mogoče pripraviti identične kopije nekega kvantnega stanja $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Izrek sta dokazala Wooters in Zurek leta 1982. Opazovati stanja ne smemo, ker bi prišlo do kolapsa valovne funkcije in bi izgubili informacijo o amplitudah α in β. Tudi drugi postopki kopiranja niso možni. Izrek ima globoke posledice za kvantno računalništvo in kvantno komuniciranje.

3.20 Schrödingerjeva enačba in stacionarna stanja

Spreminjanje kvantnega stanja s časom opisuje Schrödingerjeva enačba

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle\,, \tag{3.64}$$

ki igra podobno vlogo kot drugi Newtonov zakon v klasični mehaniki. H je hermitski operator, ki ustreza celotni energiji sistema (kinetična plus potencialna energija):

$$H = H_{\text{kin}} + V. \tag{3.65}$$

Imenuje se *Hamiltonov operator* (rečemo tudi hamiltonka ali hamiltonian). Njegove lastne vrednosti so energije, ki jih lahko dobimo ob meritvi celotne energije sistema. Najnižja se imenuje energija osnovnega stanja, ustrezno lastno stanje pa *osnovno stanje*; podobno je ravnovesnemu stanju v klasični fiziki. Stanja pri višjih energijah imenujemo *vzbujena stanja*. Reševanje problema lastnih vrednosti

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{3.66}$$

je osrednji problem kvantne mehanike.

Oblika hamiltonke je odvisna od lastnosti obravnavanega sistema (mas delcev, interakcij med njimi). Običajno jo dobimo tako, da v izrazu za energijo iz klasične mehanike klasične količine nadomestimo z ustreznimi operatorskimi.

Če operator H ni odvisen od časa, je splošna rešitev za časovno odvisnost stanja

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle\,, \tag{3.67}$$

v kar se zlahka prepričamo z odvajanjem po času. Operator $U = \mathrm{e}^{-iHt/\hbar}$ je unitaren (glej razdelek 4.7). Ker pa je H operator in ne navadno število, je potrebno eksponentno funkcijo pravilno tolmačiti in biti pazljiv pri računanju. Funkcije operatorjev računamo tako, da razvijemo izraz v Taylorjevo vrsto. Razvoj eksponentne funkcije je

$$\mathrm{e}^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \ldots, \tag{3.68}$$

kjer je $n! = 1 \times 2 \times \cdots \times n$ funkcija fakulteta, torej je

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \left(\frac{-it}{\hbar}\right)H|\psi(0)\rangle + \frac{1}{2!}\left(\frac{-it}{\hbar}\right)^2 H^2|\psi(0)\rangle + \ldots \tag{3.69}$$

Najbolj enostaven primer je, kadar je $|\psi(0)\rangle$ lastno stanje hamiltonke z energijo E, saj tedaj velja $H|\psi(0)\rangle = E|\psi(0)\rangle$, $H^2|\psi(0)\rangle = E^2|\psi(0)\rangle$, itd., in sledi

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle + \frac{1}{2!}\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)^2|\psi(0)\rangle + \ldots = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}|\psi(0)\rangle\,, \tag{3.70}$$

kjer smo vrsto sešteli nazaj v eksponentno funkcijo, katere argument je sedaj število. Izraz $|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}|\psi(0)\rangle$ pomeni, da se pri lastnih stanjih s časom spreminja le faza. Ker pa globalna faza ni pomembna, je sistem pravzaprav ves čas v istem stanju, zato lastna stanja energije imenujemo tudi *stacionarna stanja*.

Če sta $|\psi_1\rangle$ in $|\psi_2\rangle$ stacionarni stanji, $H|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle$ in $H|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle$, potem za linearno kombinacijo $|\psi(0)\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$ velja

$$|\psi(t)\rangle = \alpha\mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar}|\psi_1\rangle + \beta\mathrm{e}^{-iE_2t/\hbar}|\psi_2\rangle\,. \tag{3.71}$$

Ob poljubnem času še vedno velja, da z verjetnostjo $p = |\alpha|^2$ dobimo energijo E_1, z verjetnostjo $p = |\beta|^2$ pa E_2, zato je pričakovana vrednost energije $\langle H\rangle = |\alpha|^2E_1 + |\beta|^2E_2$. Če sta energiji E_1 in E_2 različni, potem se s časom spreminja relativna faza $(E_1 - E_2)t/\hbar$ med stanjema $|\psi_1\rangle$ in $|\psi_2\rangle$, kar ima merljive posledice. Superpozicija lastnih stanj energije torej ni stacionarno stanje.

3.21 Dinamika dvonivojskega sistema

Oglejmo si preprost primer: spin v magnetnem polju. Pomemben je za razumevanje tehnik, kot sta *elektronska paramagnetna resonanca* (EPR) in *jedrska magnetna resonanca* (JMR, angl. NMR), uporabnih v različnih znanstvenih vedah (fiziki, kemiji, biologiji), v medicini za slikanje mehkih tkiv ter v kvantnem računalništvu.

Energija magnetnega dipola z momentom $\boldsymbol{\mu}$ v polju $\mathbf{B}$ je

$$E = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}, \tag{3.72}$$

spinski magnetni dipolni moment elektrona pa je (glej razdelek 3.6)

$$\boldsymbol{\mu} = g_s\frac{-e_0}{2m_e}\boldsymbol{\Gamma} = -g_s\frac{e_0\hbar}{2m_e}\mathbf{S} = -g_s\mu_B\mathbf{S}. \tag{3.73}$$

Uvedena količina μ_B se imenuje Bohrov magneton,

$$\mu_B = \frac{e_0\hbar}{2m_e} = 9{,}27 \times 10^{-24}\,\mathrm{J/T} = 5{,}8 \times 10^{-5}\,\mathrm{eV/T}. \tag{3.74}$$

Velja še $g_s \approx 2$. Hamiltonov operator za elektronski spin v polju je torej

$$\begin{aligned} H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} &= \frac{g_s\mu_B}{2}\left(B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z\right) \\ &= \frac{g_s\mu_B}{2}\left(B_x\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} + B_y\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix} + B_z\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\right) \\ &= \frac{g_s\mu_B}{2}\begin{bmatrix}B_z & B_x - iB_y\\ B_x + iB_y & -B_z\end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{3.75}$$

Produkt $\mu_B B$, kjer je $B = |\mathbf{B}|$, ima enoto energije. Definirajmo $\hbar\omega_0 \equiv g_s\mu_B B$. Energija $\hbar\omega_0$ se imenuje *Zeemanova energija*, frekvenca ω_0 pa *Larmorjeva frekvenca*. Če je polje usmerjeno vzdolž osi z, se enačba (3.75) poenostavi:

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}. \tag{3.76}$$

Lastni stanji z energijama $E_\uparrow = \hbar\omega_0/2$ in $E_\downarrow = -\hbar\omega_0/2$ sta kar $|\uparrow\rangle$ in $|\downarrow\rangle$.

Izberimo za začetno stanje poljubno točko na Blochovi sferi:

$$|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-i\phi/2}\,|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{+i\phi/2}\,|\downarrow\rangle\,. \tag{3.77}$$

Izkoristili smo svobodno izbiro globalne faze (standardni izraz smo pomnožili z $\mathrm{e}^{-i\phi/2}$), da bi dobili bolj simetričen zapis. Časovni razvoj je, po enačbi (3.71),

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-i\phi/2}\mathrm{e}^{-iE_+t/\hbar}\,|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{i\phi/2}\mathrm{e}^{-iE_-t/\hbar}\,|\downarrow\rangle \\ &= \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-i(\phi+\omega_0 t)/2}\,|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{i(\phi+\omega_0 t)/2}\,|\downarrow\rangle\,, \end{aligned} \tag{3.78}$$

torej velja $\theta(t) = \theta, \phi(t) = \phi + \omega_0 t$. Takšno kroženje po Blochovi sferi vzdolž geografskega vzprednika θ imenujemo *Larmorjeva precesija*.

Oglejmo si pričakovane vrednosti operatorjev spina v odvisnosti od časa:

$$\begin{aligned} \langle S_z\rangle &= \langle\psi(t)|\,\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}|\psi(t)\rangle = \\ &= \left[\cos\tfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{i(\phi+\omega_0 t)/2} \quad \sin\tfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-i(\phi+\omega_0 t)/2}\right]\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-i(\phi+\omega_0 t)/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{i(\phi+\omega_0 t)/2}\end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\left(\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{2}\cos\theta, \end{aligned} \tag{3.79}$$

in

$$\begin{aligned} \langle S_x\rangle &= \langle\psi(t)|\,\frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}|\psi(t)\rangle \\ &= \left[\cos\tfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{i(\phi+\omega_0 t)/2} \quad \sin\tfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-i(\phi+\omega_0 t)/2}\right]\frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-(\phi+\omega_0 t)/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{i(\phi+\omega_0 t)/2}\end{bmatrix} \\ &= \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\left[\mathrm{e}^{i(\phi+\omega_0 t)} + \mathrm{e}^{-i(\phi+\omega_0 t)}\right] = \frac{1}{2}\sin\theta\cos(\phi+\omega_0 t). \end{aligned} \tag{3.80}$$

Podobno dobimo še

$$\langle S_y\rangle = \frac{1}{2}\sin\theta\sin(\phi+\omega_0 t). \tag{3.81}$$

Pričakovane vrednosti $\langle S_x\rangle$, $\langle S_y\rangle$ in $\langle S_z\rangle$ se obnašajo natanko tako kot komponente klasične vrtilne količine, ki precedira.

Larmorjeva precesija je ključnega pomena pri meritvah z jedrsko magnetno resonanco. Larmorjeva frekvenca ω_0 je neodvisna od kota θ, ima pa majhne popravke zaradi okolice magnetnega jedra (*kemijski premik*), zato lahko iz premikov določimo strukturo molekul.

4

Kvantno računanje in komuniciranje

4.1 Klasični računalniki

Včasih se je računalo predvsem na roke ter s pomagali, kot so logaritemska računala in mehanski kalkulatorji. Izum tranzistorja leta 1947 in integriranega vezja leta 1958 sta omogočila razmah digitalnih računalnikov. Z napredkom tehnike se je razvilo tudi računalništvo kot znanstvena veda o algoritmih in o delovanju računskih naprav.

Že v tridesetih letih je Turing razvil abstraktno predstavitev računskega stroja. *Turingov stroj* je naprava, ki obdeluje zaporedje simbolov z uporabo tabele pravil, ki določajo simbolom pripadajoče operacije. Splošnejši je pojem *univerzalnega Turingovega stroja*, ki lahko simulira kateri koli drug Turingov stroj. S tem je bil vpeljan moderni koncept algoritma kot mehanskega postopka, ki ga izvaja računski stroj. Omenimo še *Church-Turingovo tezo*, da je neka funkcija algoritmično izračunljiva, če in samo če je izračunljiva s Turingovim strojem.

Računanje sicer lahko obravnavamo čisto abstraktno matematično, vendar imamo v mislih vedno tudi nek fizikalni sistem, ki račun izvaja. Sodobni računalniki so digitalne elektronske naprave, implementirane z logičnimi vrati v tehnologiji CMOS in z zelo visoko stopnjo integracije, pomnilniškimi elementi in vzhodno/izhodnimi enotami. Njihov opis je mogoč v okviru klasične fizike. Skozi posamezne tranzistorje se pretaka veliko število elektronov, ki jih lahko opišemo z zvezno gostoto naboja, torej kot nekakšno tekočino.

4.2 Kvantni računalniki

V zadnjih letih je postalo mogoče zelo natančno upravljati s kvantnimi sistemi in kvantne tehnologije počasi prodirajo iz laboratorijev v končne izdelke. Kaj si lahko obetamo?

Kvantno računalništvo se je najprej pojavilo kot matematično fizikalna veda o uporabi kvantnih sistemov za obdelavo podatkov, pri čemer je bistveni novi element »skrita informacija« v superpoziciji kvantnih stanj. Deutsch je predlagal koncept *univerzalnega kvantnega računalnika* oziroma kvantnega Turingovega stroja (1985), naprave, s katero lahko implementiramo vsak kvantni algoritem. Danes je poznanih že nekaj *kvantnih algoritmov* za probleme, ki niso učinkovito rešljivi na klasičnem računalniku: najpomembnejša sta gotovo razbijanje na prafaktorje (Shor, 1994) in iskanje po neurejenem seznamu (Grover, 1995). Zanimiva je tudi ideja o *simuliranju* kvantnih sistemov z drugimi kvantnimi sistemi (Feynman, 1982): kvantne simulacije bodo morda ena poglavitnih aplikacij kvantnega računalništva v bližnji prihodnosti. Primer je D-Wave Two, ki sicer ni univerzalen kvantni računalnik, temveč izvaja simulacijo *kvantnega popuščanja*, kar je način reševanja nekaterih optimizacijskih problemov. Trenutno je učinkovitost primerljiva z najboljšimi klasičnimi algoritmi, vendar kvantni algoritem bolje skalira z velikostjo problema.

Področje je še v povojih in odprta ostajajo nekatera ključna vprašanja:

- Zakaj so kvantni računalniki bolj zmogljivi od klasičnih (če to sploh so)?
- Katere družine problemov lahko bolj učinkovito računamo s kvantnim računalnikom?
- Kako velika je ta množica v primerjavi s problemi, ki so učinkovito rešljivi s klasičnimi računalniki?

Pomembno je tudi področje kvantnega komuniciranja, torej prenašanje kvantne informacije. Veliko zanimanja vzbuja predvsem zaradi možnosti zajamčeno varnega prenašanja podatkov brez kakršne koli možnosti prisluškovanja.

4.3 Sestavljeni sistemi in tenzorski produkt

Klasično opišemo sistem več delcev preprosto z vpeljavo ustreznega števila koordinat za delce: $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, itd., torej po en krajevni vektor za vsak delec. Stanje za N delcev bi lahko zapisali z enim velikim vektorjem s $3N$ komponentami. Takšno zlaganje vektorjev se imenuje *direktni produkt*; dimenzije prostora se v tem primeru seštevajo.

V kvantni mehaniki je bolj zapleteno, saj moramo sestaviti večji Hilbertov prostor, katerega elementi bodo večdelčna kvantna stanja. V ta namen uporabimo matematično orodje *tenzorski produkt*, katerega namen je zlaganje vektorskih prostorov v večjega, pri čemer se ohranja lastnost linearnosti; dimenzije prostora se v tem primeru množijo.

Naj bosta V in W vektorska prostora. $V \otimes W$ (beri: V tenzorsko W) je vektorski prostor, sestavljen iz produktov $|v\rangle \otimes |w\rangle$, kjer je $|v\rangle$ element prostora V, $|w\rangle$ pa element prostora W. To je torej množica parov in njihovih linearnih kombinacij. Če je $|i\rangle$ baza za V in $|j\rangle$ baza za W, potem je $|i\rangle \otimes |j\rangle$ baza za $V \otimes W$. Možni so različni zapisi, ki pa so povsem ekvivalentni: $|v\rangle \otimes |w\rangle$, $|v\rangle\,|w\rangle$, $|v, w\rangle$, $|vw\rangle$.

Primer: Naj bosta V in W vektorska prostora, ki ustrezata kubitoma. Baza za V je $|0\rangle$, $|1\rangle$; isto velja za W. Baza za $V \otimes W$ je torej $|0\rangle \otimes |0\rangle$, $|0\rangle \otimes |1\rangle$, $|1\rangle \otimes |0\rangle$ in $|1\rangle \otimes |1\rangle$. Vsa stanja prostora so razpeta na te vektorje, kar vključuje tudi vse možne linearne kombinacije, denimo $|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle$. Možnost tvorjenja superpozicij je glavna razlika in prednost v primerjavi s klasičnimi večbitnimi sistemi.

Veljajo naslednja pravila (*bilinearnost*):

1. $z(|v\rangle \otimes |w\rangle) = (z\,|v\rangle) \otimes |w\rangle = |v\rangle \otimes (z\,|w\rangle)$, kjer je z nek skalar,
2. $(|v_1\rangle + |v_2\rangle) \otimes |w\rangle = |v_1\rangle \otimes |w\rangle + |v_2\rangle \otimes |w\rangle$,
3. $|v\rangle \otimes (|w_1\rangle + |w_2\rangle) = |v\rangle \otimes |w_1\rangle + |v\rangle \otimes |w_2\rangle$.

Od tod sledi, na primer, pravilo $(\alpha\,|v_1\rangle + \beta\,|v_2\rangle) \otimes |w\rangle = \alpha\,|v_1\rangle \otimes |w\rangle + \beta\,|v_2\rangle \otimes |w\rangle$. Ni naključje, da Hilbertove prostore zlagamo skupaj ravno s pomočjo tenzorskega produkta, saj je ta »združljiv« z načelom superpozicije. To sledi prav iz naštetih treh pravil. Tenzorski produkt lahko posplošimo na trojne in večkratne produkte, recimo $V \otimes W \otimes Z$.

Tenzorsko množimo tudi operatorje. Če je A operator v prostoru V in B v prostoru W, definiramo operator $A \otimes B$ kot

$$(A \otimes B)(|v\rangle \otimes |w\rangle) \equiv (A\,|v\rangle) \otimes (B\,|w\rangle)\,. \tag{4.1}$$

Za skalarni produkt velja pravilo:

$$\left(\sum_i a_i\,|v_i\rangle \otimes |w_i\rangle\,, \sum_j b_j\,|v'_j\rangle \otimes |w'_j\rangle\right) = \sum_{ij} a_i^* b_j\,\langle v_i|v'_j\rangle\,\langle w_i|w'_j\rangle\,. \tag{4.2}$$

Primer: Imejmo dva kubita, denimo dva spina. Zanima nas komponenta z prvega spina ter komponenta x drugega spina, čemur ustreza operator $\sigma_z \otimes \sigma_x$. Če je sistem v stanju $|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$, potem velja

$$(\sigma_z \otimes \sigma_x)(|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) = (\sigma_z\,|\uparrow\rangle) \otimes (\sigma_x\,|\uparrow\rangle) = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle\,. \tag{4.3}$$

Izračunajmo še pričakovano vrednost:

$$\langle\sigma_z \otimes \sigma_x\rangle = \langle\uparrow| \otimes \langle\uparrow|\,(\sigma_z \otimes \sigma_x)\,|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = (\langle\uparrow| \otimes \langle\uparrow|)\,(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle) = \langle\uparrow|\uparrow\rangle\,\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0. \tag{4.4}$$

Zelo uporaben je matrični zapis, imenovan *Kroneckerjev produkt*. Naj bo A $m \times n$ matrika, B pa $p \times q$ matrika. Matrika $A \otimes B$ je matrika velikosti $mp \times nq$, katere strukturo lahko zapišemo bločno kot

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1n}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \dots & A_{2n}B \\ \vdots & & & \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \dots & A_{mn}B \end{bmatrix}. \tag{4.5}$$

Primer: Zapišimo Kroneckerjev produkt $|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$. Velja $|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$, torej je

$$|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\\0\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}. \tag{4.6}$$

Za tenzorski operator $\sigma_z \otimes \sigma_x$ dobimo

$$\sigma_z \otimes \sigma_x = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix} & 0\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix}\\0\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix} & -1\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & 0\\1 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & -1\\0 & 0 & -1 & 0\end{bmatrix}. \tag{4.7}$$

Preverimo prejšnje rezultate:

$$(\sigma_z \otimes \sigma_x)(|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) = \begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & 0\\1 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & -1\\0 & 0 & -1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}. \tag{4.8}$$

Po drugi strani pa velja

$$|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\\0\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}. \tag{4.9}$$

S tem smo preverili enačbo (4.3). **Pozor**: tenzorski produkt ni komutativen. Na primer: $\sigma_z \otimes \sigma_x \neq \sigma_x \otimes \sigma_z$, saj velja

$$\sigma_x \otimes \sigma_z = \begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} & 1\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}\\1\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} & 0\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 0 & 1 & 0\\0 & 0 & 0 & -1\\1 & 0 & 0 & 0\\0 & -1 & 0 & 0\end{bmatrix}.$$

4.4 Sistem več kubitov

Imejmo sistem dveh kubitov. Standardna baza za ta štiridimenzionalni Hilbertov prostor so stanja $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$, kjer uporabljamo kompaktni zapis tenzorskih produktov zaradi boljše preglednosti. Hitro se lahko prepričamo, da ta štiri stanja tvorijo ortonormirano bazo. Poljubno stanje dvokubitnega sistema zapišemo kot linearno kombinacijo

$$|\psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle. \tag{4.10}$$

Stanje mora biti normirano, zato velja omejitev

$$\sum_{ij} |\alpha_{ij}|^2 = 1, \tag{4.11}$$

poleg tega globalna faza stanja ni fizikalno pomembna. Od skupaj $4 \times 2 = 8$ realnih parametrov torej dva odpadeta in v splošnem dvokubitno stanje popolnoma opišemo s šestimi neodvisnimi parametri. To pa sta dva parametra več, kot za opis dveh popolnoma neodvisnih kubitov! V splošnem torej dvokubitnega sistema ne moremo opisati s točkami na površini dveh Blochovih sfer. Dodatna informacija, ki jo ima dvokubitni sistem v primerjavi z dvema popolnoma neodvisnima kubitoma, je ključnega pomena za kvantno računanje.

Velikost Hilbertovega prostora v sistemih z veliko kubiti hitro narašča. Za n kubitov je dimenzija enaka 2^n, torej za 50 kubitov potrebujemo $2^{50} \sim 10^{15}$ amplitud. Če bi jih hoteli shraniti na klasičnem računalniku s kompleksnimi števili s plavajočo vejico in dvojno natančnostjo, bi potrebovali 16 PB pomnilnika. Simulacije kvantnih sistemov s klasičnimi računalniki so torej omejene na kakšnih 30 do 40 kubitov. To je huda omejitev in številna odprta vprašanja v teoretični fiziki in kemiji ostajajo brez odgovora, ker točnih analitičnih rešitev ne poznamo (ali celo vemo, da jih ni), simulacije pa so numerično prezahtevne ravno zaradi velikosti Hilbertovega prostora. Kvantni računalniki bi tu bili v veliko pomoč.

4.5 Meritve v večkubitnih sistemih

Imejmo dva kubita in opravimo meritev na prvem kubitu. Recimo, da pomerimo, s kakšno verjetnostjo je v stanju $|0\rangle$. Prispevka sta dva, iz člena z $|00\rangle$ in iz člena z $|01\rangle$. Verjetnost je $p_1 = |\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2$, saj se verjetnosti nezdružljivih dogodkov seštevajo (velja $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$, če je $P(A \cap B) = 0$). Ob meritvi pride do kolapsa valovne funkcije, zato je sistem potem v stanju $|\psi'\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle$, oziroma, bolj natančno, ker moramo stanje ponovno normirati, v stanju

$$|\psi'\rangle = \frac{\alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle}{\sqrt{|\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2}}. \tag{4.12}$$

Recimo, da potem opravimo dodatno meritev, in sicer nas zanima, če je drugi kubit v stanju $|1\rangle$. Verjetnost je po Bornovem pravilu

$$p_2 = \frac{|\alpha_{01}|^2}{|\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2}. \tag{4.13}$$

Lahko pa že na začetku naredimo sočasno meritev, pri kateri pomerimo, ali je prvi kubit 0, drugi pa 1. Verjetnost je $p_3 = |\alpha_{01}|^2$. Ta meritev je enakovredna prvima dvema. Kot preizkus lahko hitro preverimo, da je

$$p_3 = p_1 p_2, \tag{4.14}$$

saj gre za *pogojne verjetnosti.* Prvi dve ločeni meritvi lahko opravimo tudi v obratnem vrstnem redu. Verjetnosti parcialnih meritev bosta drugačni, še vedno bo pa zmnožek enak, kar je v skladu s pravilom

$$P(A \cap B) = P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A). \tag{4.15}$$

Pravila merjenja v kvantni mehaniki so logično povsem konsistentna, čeprav morda izgledajo nenavadno.

4.6 Bellova stanja in kvantna prepletenost

Oglejmo si stanje dvokubitnega sistema imenovano Bellovo stanje:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle + |11\rangle\right). \tag{4.16}$$

Pomerimo prvi kubit. Z enako verjetnostjo dobimo rezultat 0 ali 1. Če dobimo 0, potem je stanje sistema po meritvi $|00\rangle$, zato bo meritev drugega kubita zagotovo dala rezultat 0. Če dobimo 1, potem je stanje sistema po meritvi $|11\rangle$ in meritev drugega kubita bo zagotovo dala rezultat 1. Rečemo, da sta rezultata meritev *korelirana.* To se zgodi tudi, če sta oba kubita prostorsko ločena z razdaljo x, drugo meritev pa opravimo po času, manjšem od x/c, kjer je c svetlobna hitrost. (Recimo drugi kubit pošljemo na Luno, meritvi pa opravimo praktično sočasno. $x_{\text{Luna}}/c = 1{,}3\,\text{s}$.) V tem primeru se informacija o rezultatu prve meritve ni mogla prenesti na mesto drugega kubita do časa, ko je izvedena druga meritev, zato sta meritvi gotovo neodvisni. Rezultata meritve sta kljub temu korelirana.

Hipne spremembe ob meritvi prvega kubita in korelirani rezultati so eksperimentalno dejstvo, ki je danes med fiziki splošno sprejeto, odprto je morda le še vprašanje interpretacije. Bell je pokazal, da so korelacije v stanju $|\psi\rangle$ močnejše, kot bi jih lahko dobili v katerem koli klasičnem sistemu. (Glej razdelek 6.8!)

Podobne lastnosti ima stanje

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|01\rangle - |10\rangle\right). \tag{4.17}$$

Po merjenju na prvem kubitu bomo kot rezultat pri meritvi drugega vedno dobili obratno vrednost: rezultati so popolnoma *antikorelirani.*

Tip superpozicije kvantnih stanj, ki vodi k (anti)koreliranim rezultatom meritev, imenujemo *kvantna prepletenost.* To je ključna lastnost kvantnomehanskih sistemov, ki omogoča kvantno komuniciranje in kvantno računanje. Prepletenost se smatra kot sredstvo (resurs), ki omogoča sicer »nemogoče« računske postopke. Eksperimentalno lahko takšna stanja pripravimo s parametričnim sipanjem laserske svetlobe. Gre za nelinearen pojav, pri katerem en foton razpade na par kvantno prepletenih fotonov s pol manjšo energijo.

Obstajajo štiri Bellova kvantno prepletena stanja, ki igrajo pomembno vlogo v kvantnem računanju:

$$\begin{aligned}
|\beta_{00}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle + |11\rangle\right),\\
|\beta_{01}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|01\rangle + |10\rangle\right),\\
|\beta_{10}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle - |11\rangle\right),\\
|\beta_{11}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|01\rangle - |10\rangle\right).
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Tvorijo ortonormirano bazo v prostoru dveh kubitov. Poljubno stanje dveh kubitov lahko torej zapišemo kot

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij}\,|\beta_{ij}\rangle, \tag{4.19}$$

kjer indeksa ij tečeta po naboru 00, 01, 10 in 11.

Če znamo neko dvodelčno stanje zapisati kot tenzorski produkt dveh ločenih stanj, potem kvantne prepletenosti ni. Primer:

$$|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle = \left(|0\rangle + |1\rangle\right) \otimes \left(|0\rangle + |1\rangle\right). \tag{4.20}$$

V tem primeru meritev prvega kubita v ničemer ne vpliva na rezultate meritev na drugem kubitu. Rečemo, da je stanje kubitov *separabilno* (ločljivo).

4.7 Unitarnost in časovni potek

Operator U je *unitaren*, če velja

$$UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{I}, \tag{4.21}$$

kjer je $\mathbb{I}$ operator identiteta. Izpolnjevanje pogoja lahko preverimo tudi za pripadajočo matrično reprezentacijo operatorja: po množenju matrike z lastno hermitsko konjugiranko moramo dobiti matriko identiteta z enicami po diagonali.

Unitaren operator ohranja skalarni produkt: če z njim delujemo na dva vektorja, njun skalarni produkt ostane nespremenjen, saj velja:

$$\left(U|v\rangle, U|w\rangle\right) = \left(|v\rangle, U^\dagger U|w\rangle\right) = \left(|v\rangle, \mathbb{I}|w\rangle\right) = \left(|v\rangle, |w\rangle\right). \tag{4.22}$$

Unitarni operatorji imajo pomembno lastnost ohranjanja norme. V kvantni mehaniki to ustreza »ohranitvi verjetnosti«. Če je začetno stanje $|\psi\rangle$ normirano, torej je $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, potem velja $(\langle\psi|U^\dagger)(U|\psi\rangle) = 1$ in je tudi preslikano stanje $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ normirano.

Če se omejimo na matrike, ki imajo realne matrične elemente, dobimo podmnožico unitarnih matrik, ki se imenujejo *ortogonalne matrike*, za katere velja

$$O^T O = OO^T = \mathbb{I}. \tag{4.23}$$

Primer je matrika za rotacijo za kot θ v dveh dimenzijah:

$$R(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}. \tag{4.24}$$

Splošne unitarne matrike oziroma operatorji so torej neke vrste zasuk v kompleksnem Hilbertovem prostoru.

postulat 5

Časovno spreminjanje kvantnega stanja opišemo z unitarnim operatorjem.

To velja za vse izolirane kvantne sisteme, ki nimajo interakcij z okolico. Velja torej

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)\,|\psi(t_1)\rangle\,, \tag{4.25}$$

kjer je $|\psi(t)\rangle$ stanje sistema ob času t. Vsi unitarni operatorji so možen opis sprememb v času.

Procesi v izoliranih sistemih so povsem *reverzibilni*: za vsak proces obstaja obratni proces, v katerem si dogodki sledijo v obratnem vrstnem redu. Če je $|\psi'\rangle = U\,|\psi\rangle$, pomnožimo z leve z $U^\dagger$ in dobimo

$$U^\dagger\,|\psi'\rangle = U^\dagger U\,|\psi\rangle = |\psi\rangle\,. \tag{4.26}$$

Če U opisuje spremembo v času naprej, potem $U^\dagger$ opisuje spremembo v času nazaj. Tudi v klasičnem računalništvu obstaja pomembno področje *reverzibilnega računanja*, ki ima kar nekaj stičnih točk s kvantnim računalništvom.

4.8 Kvantna vezja

Kvantne algoritme lahko simbolično predstavimo z diagrami, ki opisujejo časovni potek računanja in se imenujejo *kvantna vezja*. Črte oziroma »žičke« predstavljajo kubite, čas teče od leve proti desni strani diagrama, enobitne operacije označimo s kvadrati z oznako operacije. Klasične bite označimo z dvojno črto. Meritve, opravljene na kubitu, označimo s simbolom za merilni instrument. Dogovor je, da vedno opravimo meritev v bazi $|0\rangle$, $|1\rangle$ (torej z napravo Sterna in Gerlacha z gradientom magnetnega polja v smeri z, če je naš kubit stanje spina). Na izhodu merilnega instrumenta dobimo klasični bit, 0 za stanje $|0\rangle$, 1 za stanje $|1\rangle$.

Obstaja nekaj bistvenih razlik med klasičnimi logičnimi vezji in kvantnimi:

- Klasična vrata so **nereverzibilna**. Denimo vrata NAND vrnejo isti rezultat 1 za tri možna vhodna stanja, 00, 01 in 10, zato se nekaj informacije nepovratno izgubi. Kvantna vrata so unitarna operacija, zato so vedno reverzibilna. Ker je rezultat operacije kvantno stanje iz istega Hilbertovega prostora kot vhodno stanje, je število izhodov nujno enako številu vhodov.
- Kvantna vezja so nujno **aciklična**, kar pomeni, da ne sme biti zank. To je posledica tega, da kvantno vezje označuje nek časovni potek opravljanja operacij, ki gre vedno od leve proti desni.
- En izhod **se ne more razcepiti na več vej**, ker kloniranje kubitov ni dovoljeno. V klasični digitalni logiki pa je dovoljen »fan-out«: izhod iz logičnih vrat lahko vodi na več vhodov drugih vrat.

4.9 Enokubitna kvantna vrata

Kvantna vrata so unitarna transformacija, ki vhodnemu stanju priredi izhodno: $|\psi\rangle \to |\psi'\rangle$. Spomnimo, da uporabljamo dogovor za vektorski zapis, po katerem je

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{in} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{4.27}$$

V Boolovi logiki so vrata NE (NOT) negacija:

$$0 \to 1, \quad 1 \to 0. \tag{4.28}$$

Po analogiji uvedemo kvantna vrata NE:

$$|0\rangle \to |1\rangle\,, \quad |1\rangle \to |0\rangle\,. \tag{4.29}$$

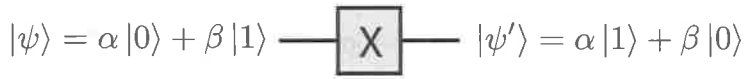
Ker mora biti operator, ki ustreza vratom, linearen, velja pravilo tudi za superpozicijo:

$$\alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle \to \alpha\,|1\rangle + \beta\,|0\rangle\,. \tag{4.30}$$

V matričnem zapisu torej operator NOT priredi vektorju $\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ rezultat $\begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}$. Ustrezno unitarno matriko pa že poznamo: to je Paulijeva matrika σ_x. V kvantnem računalništvu jo pogosto označimo kar z X (podobno zapišemo še $\sigma_y = Y$ in $\sigma_z = Z$). Torej

$$U_{\text{NOT}} = X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{4.31}$$

Ta vrata imenujemo tudi *bit-flip*. Prikazana so na sliki 4.1.



Slika 4.1. Kvantna vrata NOT.

Uporabna operacija ustreza tudi Paulijevi matriki $\sigma_z = Z$, saj velja $Z\,|0\rangle = |0\rangle$ in $Z\,|1\rangle = -\,|1\rangle$. Vrata obrnejo fazo stanju $|1\rangle$, stanje $|0\rangle$ pa pustijo nespremenjeno, zato jih imenujemo tudi *phase-flip*. Torej

$$U_{\text{phase-flip}} = Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{4.32}$$

Zelo uporabna so še *Hadamardova vrata* (po francoskem matematiku Jacquesu Hadamardu; izg. »adamar«), slika 4.2. Vrata H lastnim stanjem matrike σ_z priredijo lastni stanji matrike σ_x:

$$\begin{aligned} H\,|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right), \\ H\,|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |1\rangle\right). \end{aligned} \tag{4.33}$$

Matrično jih torej lahko zapišemo kot

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \tag{4.34}$$

Velja $H^2 = 1$.

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle \;\text{—}\boxed{\text{H}}\text{—}\; |\psi'\rangle = \alpha\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right) + \beta\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |1\rangle\right)$$

Slika 4.2. Kvantna Hadamardova vrata.

Omenimo še vrata S in T, definirana z

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}, \quad T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}. \tag{4.35}$$

4.10 Večkubitna kvantna vrata

Enobitni računalniki niso posebno zanimivi, zato obravnavajmo še večkubitna vrata. Oglejmo si dvokubitna vrata *nadzorovani NE* (angl. controlled NOT, CNOT). Imajo dva vhoda: nadzorni in ciljni kubit, glej sliko 4.3. Če je nadzorni kubit $|0\rangle$, se ciljni kubit ne spremeni. Če pa je kontrolni kubit $|1\rangle$, se ciljni obrne: $|0\rangle \to |1\rangle$, $|1\rangle \to |0\rangle$. Velja torej

$$\begin{aligned} |00\rangle &\to |00\rangle, \\ |01\rangle &\to |01\rangle, \\ |10\rangle &\to |11\rangle, \\ |11\rangle &\to |10\rangle. \end{aligned} \tag{4.36}$$

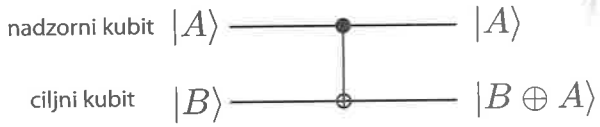
Ker lahko s Kroneckerjevim produktom zapišemo

$$|00\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{4.37}$$

vrata CNOT matrično zapišemo kot

$$U_{\text{CNOT}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{4.38}$$

Če je vhod A enak $|1\rangle$, dobimo vrata NOT za kubit B. Pravilo (4.36) lahko zapišemo tudi bolj elegantno kot $|A, B\rangle \to |A, B \oplus A\rangle$, kjer je $B \oplus A = B + A \mod 2$ seštevanje modulo 2, torej $0 \oplus 0 = 0$, $0 \oplus 1 = 1$, $1 \oplus 0 = 1$, $1 \oplus 1 = 0$.



Slika 4.3. Dvokubitna kvantna vrata CNOT.

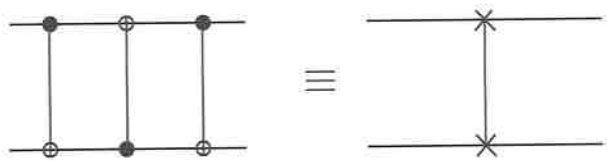
V kvantnih vezjih v vhodnem delu pogosto zasledimo zaporedje Hadamardovih vrat in vrat CNOT. Ta kombinacija pretvarja iz standardne baze $|ij\rangle$ v Bellovo bazo $|\beta_{ij}\rangle$, torej ustvarja kvantno prepletenost. Ker je kvantna mehanika unitarna, hitro ugotovimo, da obratno zaporedje ustreza obratni transformaciji iz Bellove v standardno bazo. To kombinacijo pogosto opazimo v izhodnem delu kvantnih vezij.

Obstaja dokaz, da lahko poljubna večkubitna vrata in kvantna vezja sestavimo zgolj iz vrat CNOT in različnih enokubitnih vrat, ki torej tvorijo kvantni ekvivalent univerzalnih vrat NAND v Boolovi algebri klasičnega računalništva. V praksi je cilj sestaviti stroj, ki zna izvajati operacije CNOT, H, S in T. Za ta vrata obstajajo izvedbe, ki so odporne na motnje in napake.

Kot zanimiv primer preprostega – a kljub temu netrivialnega – kvantnega vezja si oglejmo kombinacijo treh zaporednih vrat CNOT, pri čemer sta nadzorni in ciljni kubit pri drugih vratih obrnjena.

$$|a, b\rangle \to |a, a \oplus b\rangle \to |a \oplus (a \oplus b), a \oplus b\rangle = |b, a \oplus b\rangle \to |b, (a \oplus b) \oplus b\rangle = |b, a\rangle.$$

Upoštevali smo $x + 2y \mod 2 = x$. To vezje torej zamenja kubita a in b. To so vrata SWAP, slika 4.4.

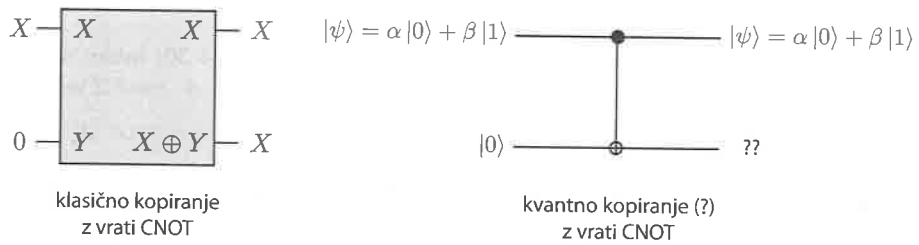


Slika 4.4. Kvantna vrata SWAP.

Vrata CNOT so bila prvič eksperimentalno prikazana leta 1995 v skupini D. Winelanda (Nobelova nagrada leta 2012 za »prelomne eksperimentalne metode, ki omogočajo meritve in manipuliranje posameznih kvantnih sistemov«).

4.11 Holevov izrek

Če na vhod B vrat CNOT postavimo fiksno $|0\rangle$, na vhod A pa $|0\rangle$ oziroma $|1\rangle$, bo na izhodu A in tudi B $|0\rangle$ oziroma $|1\rangle$, glej sliko 4.5. Ali smo s tem skopirali kubit?



Slika 4.5. Kopiranje informacije z vrati CNOT.

Poglejmo, kaj dobimo, ko damo na vhod A superpozicijo $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Vhod je torej

$$\alpha|00\rangle + \beta|10\rangle\,, \tag{4.39}$$

zato je po definiciji (4.36) izhod

$$\alpha|00\rangle + \beta|11\rangle\,. \tag{4.40}$$

Vendar ali je to enako kot dve kopiji kubita $|\psi\rangle$, kar bi zapisali kot

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle &= (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \\ &= \alpha^2|00\rangle + \alpha\beta|01\rangle + \alpha\beta|10\rangle + \beta^2|11\rangle\,. \end{aligned} \tag{4.41}$$

Takoj ugotovimo, da se izraza ujemata, zgolj če velja $\alpha\beta = 0$, oziroma v dveh primerih: $\alpha = 0$ in $\beta = 1$ (ko je $|\psi\rangle = |1\rangle$), ter $\alpha = 1$ in $\beta = 0$ (ko je $|\psi\rangle = |0\rangle$). Uspešno lahko torej kloniramo zgolj ortogonalni stanji $|0\rangle$ in $|1\rangle$, ne pa poljubne superpozicije stanj. Kloniranje ortogonalnih stanj je ekvivalentno kopiranju klasične informacije, zato to ni nič presenetljivega.

Tudi pri meritvah velja, da lahko ločimo ortogonalna stanja s 100 % natančnostjo, neortogonalna pa ne (v tem primeru prihaja do napačnih meritev oziroma lažnih identifikacij). Če sta namreč dve stanji $|\psi_1\rangle$ in $|\psi_2\rangle$ neortogonalni, lahko zapišemo $|\psi_1\rangle = a|\psi_2\rangle +$ preostanek. Če sta stanji skoraj ortogonalni, je konstanta a majhna, vendar od nič različna. Če torej meritev pokaže, da naj bi bil sistem v stanju $|\psi_1\rangle$, vendarle obstaja določena majhna verjetnost, da je bil v resnici v stanju $|\psi_2\rangle$. Če pa sta stanji $|\psi_1\rangle$ in $|\psi_2\rangle$ splošni in je a znaten, potem je verjetnost napake zelo velika.

Ugotovitve tega razdelka so posledica bolj splošnega *Holevovega izreka*: pri meritvi kubita lahko izvemo največ en klasični bit informacije. Vsa ostala kvantna informacija ostane skrita.

4.12 Supergosto kodiranje

Supergosto kodiranje je postopek pošiljanja dveh klasičnih bitov informacije z izmenjavo zgolj enega fizičnega kubita. Alice in Bob imata vsak po en kubit iz prepletenega stanja

$$|\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle + |11\rangle\right), \tag{4.42}$$

Alice prvega, Bob pa drugega. Če želi Alice poslati klasična bita ij (00, 01, 10 ali 11), opravi na svojem kubitu eno izmed unitarnih operacij U_{ij} iz tabele 4.1. Bob svoj kubit pusti pri miru, kar ustreza unitarni operaciji identiteta I. Celotna operacije je torej tenzorski produkt $U_{ij} \otimes I$, rezultat pa je stanje

$$|\psi_{ij}\rangle = (U_{ij} \otimes I)\,|\beta_{00}\rangle\,, \tag{4.43}$$

glej tabelo 4.1. Alice nato svoj fizični kubit (en sam) pošlje Bobu, ki ima tedaj v posesti cel prepleteni par. Stanja $|\psi_{ij}\rangle$ pa so ravno Bellova stanja, ki so med seboj ortogonalna, zato jih lahko ločimo s 100 % zanesljivostjo. Z meritvijo v Bellovi bazi lahko torej Bob izve dva klasična kubita informacije.

Supergosto kodiranje je mogoče zato, ker sta na začetku kubita prepletena. Če bi Alice poslala Bobu en sam neprepleten kubit, bi s tem po Holevovem izreku lahko prenesla zgolj en klasični bit informacije (zakodiran z izbiro kvantnega stanja $|0\rangle$ ali $|1\rangle$, ki ju lahko ločimo s 100 % zanesljivostjo).

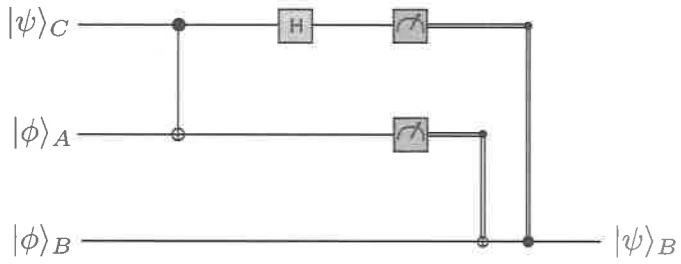
Če nekdo prestreže Alicin kubit, ne more prebrati sporočila, ker bi za meritev stanja potreboval še Bobov kubit. Ta postopek torej omogoča varno prenašanje klasične informacije, saj prisluškovalec ne more razbrati čisto nič informacije.

ij	U_{ij}	$\lvert\psi_{ij}\rangle$
00	$1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 00\rangle + \lvert 11\rangle\right)$
01	$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 10\rangle + \lvert 01\rangle\right)$
10	$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 00\rangle - \lvert 11\rangle\right)$
11	$XZ = iY = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\lvert 10\rangle + \lvert 01\rangle\right)$

Tabela 4.1. Alice želi poslati dva klasična bita ij in na svojem kubitu izvede unitarno operacijo U_{ij}. Končno stanje se izračuna kot delovanje tenzorskega produkta $U_{ij} \otimes I$ na začetnem stanju $|\beta_{00}\rangle$, pri čemer uporabimo pravilo (4.1).

4.13 Kvantna teleportacija

Pri *kvantni teleportaciji* prenesemo kvantno stanje (en kubit informacije) na drugo mesto, ne da bi pri tem fizično premaknili sistem v tem stanju. Eksperimentalno je teleportacija uspela na razdalji tudi do 143 km, med La Palmo in Tenerifom, kjer sta visoko v hribih observatorija. Zdaj so v pripravi prvi poskusi v vesolju: kitajski satelit Micius za kvantno komunikaciranje je v orbiti okoli Zemlje od avgusta 2016. Supergosto kodiranje in kvantna teleportacija sta tesno povezana (dualna).



Slika 4.6. Kvantno vezje, ki opravlja teleportacijo kubita $|\psi\rangle_C$.

Imejmo tri kubite, prepleteni par AB v Bellovem stanju

$$|\phi_{AB}\rangle = |\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle + |11\rangle\right), \tag{4.44}$$

ter kubit C, ki ga želimo teleportirati in ki je v poljubni linearni superpoziciji:

$$|\psi_C\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle\,. \tag{4.45}$$

Stanje celotnega trikubitnega sistema zapišemo torej kot

$$|\phi_{AB}\rangle \otimes |\psi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha\,|000\rangle + \beta\,|001\rangle + \alpha\,|110\rangle + \beta\,|111\rangle\right). \tag{4.46}$$

Najprej opravimo operacijo CNOT s kontrolnim kubitom C in ciljnim kubitom A. Dobimo

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha\,|000\rangle + \beta\,|101\rangle + \alpha\,|110\rangle + \beta\,|011\rangle\right). \tag{4.47}$$

Nato opravimo operacijo H na kubitu C. Dobimo

$$\frac{1}{2}\left(\alpha\,|000\rangle + \alpha\,|001\rangle + \beta\,|010\rangle - \beta\,|011\rangle + \alpha\,|110\rangle + \alpha\,|111\rangle + \beta\,|100\rangle - \beta\,|101\rangle\right). \tag{4.48}$$

Končno opravimo meritev kubitov A in C. Kot rezultat dobimo dva klasična bita, kubit B pa doživi kolaps v stanje, ki je odvisno od meritve in je tabelirano spodaj.

AC	$\lvert\psi'_B\rangle$
00	$\alpha\,\lvert 0\rangle + \beta\,\lvert 1\rangle$
01	$\alpha\,\lvert 0\rangle - \beta\,\lvert 1\rangle$
10	$\beta\,\lvert 0\rangle + \alpha\,\lvert 1\rangle$
11	$-\beta\,\lvert 0\rangle + \alpha\,\lvert 1\rangle$

Prepletenost med A in B je izgubljena. Izgubljeno je tudi kvantno stanje C. Opazimo pa, da so možna stanja $|\psi'_B\rangle$ podobna začetnemu $|\psi_C\rangle$, v primeru 00 je celo kar že enako. Alice pošlje izmerjena dva klasična bita informacije. Bob na podlagi dobljenih vrednosti popravi svoj kubit B, in sicer kot opisano v spodnji tabeli:

AC	U
00	1
01	Z
10	X
11	ZX

Hitro se lahko prepričamo, da je končni rezultat vedno $\alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle$, kot smo želeli.

Poudariti je treba, da gre pri kvantnem teleportiranju za prenos kvantnega stanja (informacije) brez premikanja fizičnih sistemov. Rezultat ni dodatna kopija začetnega kubita C, saj je izvorno stanje nepovratno izgubljeno ob meritvi, torej imamo na koncu le en kubit (B) v stanju $\alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle$. Omenimo še, da kvantnega stanja ni možno prestreči, saj klasična kubita ne nosita zadosti informacije, da bi rekonstruirali stanje: nujno je potrebno imeti v posesti kubit B. Ponovno je ključnega pomena kvantna prepletenost med kubitoma A in B.

Teleportacija poteka s končno hitrostjo, saj je potrebno poslati dva bita klasične informacije, kar je omejeno s svetlobno hitrostjo. Kljub temu, da je kolaps valovne funkcije v nekem smislu hipen, ne moremo rekonstruirati začetnega kvantnega stanja, dokler te informacije ne prejmemo. Ni pa zato potrebno čakati z nadaljnjimi računi: kubit B lahko lahko nastopa v nadaljnjih računskih korakih že pred končno operacijo U, ustrezno transformacijo pa potem izvedemo naknadno, ko prejmemo klasična kubita. Načelo superpozicije jamči, da bo rezultat enak. To je bistvena razlika med klasičnimi in kvantnimi mrežami.

4.14 Kvantni paralelizem

Imejmo dvokubitna vrata U_f, ki vhodno stanje $|x, y\rangle$ preslikajo kot

$$|x, y\rangle \to |x, y \oplus f(x)\rangle\,, \tag{4.49}$$

kjer je f neka funkcija, ki bit preslika v bit. Če je $y = 0$, potem je drugi izhodni kubit enak $f(x)$. Če je prvi kubit pripravljen v stanju $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, dobimo

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0, f(0)\rangle + |1, f(1)\rangle\right). \tag{4.50}$$

V grobem to pomeni, da smo sočasno izvrednotili f na vseh možnih vhodnih vrednostih: to je *kvantni paralelizem*. Postopek se lahko posploši na n kubitov z uporabo Hadamardovih vrat na vseh kubitih začetnega stanja $|00\ldots0\rangle$, kar da stanje

$$\frac{1}{2^{n/2}} \sum_{i_1,\ldots,i_n} |i_1,\ldots,i_n\rangle . \tag{4.51}$$

Dodamo še en kubit v stanju $|0\rangle$ in uporabimo kvantno vezje, ki implementira U_f. Kot izhod dobimo stanje

$$\frac{1}{2^{n/2}} \sum_{i_1,\ldots,i_n} |i_1,\ldots,i_n\rangle \otimes |f(i_1,\ldots,i_n)\rangle . \tag{4.52}$$

Da bo paralelizem zares uporaben, moramo znati še izluščiti koristno informacijo iz tega rezultata.

4.15 Shorov algoritem

Shorov algoritem (1994) je kvantni algoritem za razcep števil na prafaktorje, $N = pr$, kjer sta p in r praštevili. Zahtevnost najboljšega znanega klasičnega algoritma (NFS) narašča superpolinomsko s številom bitov n, potrebnih za zapis števila N, zahtevnost Shorovega pa logaritemsko. Pospešitev je eksponentna. Glavna motivacija za proučevanje faktorizacije so postopki za enkripcijo z javnimi ključi, kot je shema RSA, ki temelji na težavnosti razcepa števil na prafaktorje. S klasičnim računanjem je uspelo razbiti 768 bitni RSA v dveh letih, kvantno bi šlo bistveno hitreje. Je pa do danes uspelo s Shorovim algoritmom razcepiti samo $15 = 3 \times 5$ in $21 = 3 \times 7$ (z nekim drugim kvantnim algoritmom pa tudi $143 = 11 \times 13$ in $56142 = 241 \times 233$).

Algoritem spada v razred BQP (kvantni polinomski z omejeno napako): rešujemo problem odločanja z odgovorom da ali ne, ki ga lahko rešimo v polinomskem času, pri čemer je verjetnost napake navzgor omejena z $1/3$. Tudi število kubitov v razredu BQP mora biti polinomsko po n. Za Shorov algoritem zadošča $2n$ kubitov. Dokončni odgovor dobimo s ponavljanjem izračuna, pri čemer verjetnost napake pada proti nič.

Shorov algoritem temelji na kvantni Fourierovi transformaciji in na iskanju period funkcij.

4.16 Groverjev algoritem

Groverjev algoritem (1996) je kvantni algoritem za iskanje po neurejenih seznamih. Pospešek je zgolj kvadratičen, vendar je zaradi široke uporabnosti iskanja po seznamih vsakršna pohitritev zelo pomembna.

Problem iskanja je sledeč: za kateri element x seznama ima neka funkcija f izbrano vrednost y, $f(x) = y$? V bistvu določamo inverz funkcije. Klasično moramo pregledati vseh N elementov seznama, kvantno pa je to mogoče v $\sqrt{N}$ korakih. Dokazano je bilo, da je to optimalna (najhitrejša) rešitev.

5

Kvantni delci

Louis de Broglie (izg. »debroj«) je leta 1924 v svojem doktorskem delu postavil tezo, da se delci snovi obnašajo kot valovanje, torej da tako za snov kot za elektromagnetno sevanje velja *dualnost delec-valovanje*. Za prispevek k razvoju moderne kvantne teorije je leta 1929 prejel Nobelovo nagrado.

5.1 De Brogliejeva zveza

De Broglie je delcu, ki se giblje z gibalno količino $p = mv$ pripisal valovno dolžino

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{5.1}$$

Izraz se imenuje *de Brogliejeva zveza*. Upoštevajoč definicijo valovnega števila $k = 2\pi/\lambda$ jo zapišemo tudi kot

$$p = \hbar k. \tag{5.2}$$

Valovna narava snovi je bila potrjena v Davissonovem in Germerjevem eksperimentu (1927). Kristal niklja sta obstreljevala z elektroni in opazila podoben uklonski vzorec, značilen za valovanja, kot se vidi pri sipanju rentgenskih žarkov (razdelek 9.7). Eksperiment je imel ključen pomen za razvoj kvantne fizike in Davisson je leta 1937 prejel Nobelovo nagrado. Zanimivo je, da sta Davisson in Germer prišla do odkritja po naključju, saj sta pričakovala difuzen odboj elektronov enakomerno v vse smeri zaradi hrapavosti površine, ne pa sipanja elektronov v točno določene smeri. Zaradi nesreče pri načrtovanem eksperimentu sta morala prežariti polikristaliničen vzorec in nastal je lep monokristal, ki omogoča zelo jasne uklonske vzorce. Druga zanimivost je, da si je Davisson Nobelovo nagrado delil z Georgem Thomsonom, ki je neodvisno opravil podoben eksperiment. Georgev oče, J. J. Thomson, je desetletja prej odkril elektron (1897): pri proučevanju katodnih žarkov je prišel do zaključka, da gre za lahke nabite delce in da so ti sestavni deli atoma (prejel je Nobelovo nagrado 1906). Oče in sin sta torej razkrila različna (dualna) pogleda na naravo elektronov – in bila lepo nagrajena.

Ocenimo valovno dolžino elektronov, pospešenih v električnem polju. Kinetična energija je $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}p^2/m$, torej je $p = \sqrt{2mE_{\text{kin}}}$. Velja še $E_{\text{kin}} = e_0 U$, kjer je U pospeševalna napetost. Sledi

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}} \approx \frac{1{,}23\,\text{nm}}{\sqrt{U\,[\text{V}]}}. \tag{5.3}$$

Pri pospeševalni napetosti $U = 50\,\text{V}$ dobimo $\lambda = 0{,}17\,\text{nm}$, kar je primerljivo z medatomsko razdaljo.

Možnost opazovanja snovi s curkom elektronov je osnova delovanja *elektronskih mikroskopov*. Vzorec preslikamo s curkom hitrih elektronov namesto s svetlobo. Uporabljajo se zelo visoke pospeševalne napetosti, tudi do 1 MV. Ločljivost je velikostnega reda nekaj desetink nanometra; pri najbolj izpopolnjenih mikroskopih je možno doseči atomsko ločljivost (poglavje 8).

Pri še višjih kinetičnih energijah postane valovna dolžina primerljiva z velikostjo jedra, zato lahko na ta način raziščemo njegovo sestavo. V ta namen se gradi velike *pospeševalnike delcev*. Pri najvišjih energijah je valovna dolžina krajša od premera protona: možno je celo proučiti notranjost tega sestavljenega delca in določiti porazdelitev kvarkov.

Kako pa je z makroskopskimi telesi? Vzemimo drobec prahu premera $r = 1\,\mu\text{m}$ z maso $m = 1 \times 10^{-15}\,\text{kg}$ (kar je tipično za delec omenjene velikosti), ki se giblje s hitrostjo $v = 1\,\text{mm/s}$. Dobimo

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 0{,}66 \times 10^{-7}\,\text{nm}. \tag{5.4}$$

To je veliko manj od velikosti drobca prahu (celo veliko manj od velikosti atoma) in je popolno zanemarljivo. Drobec prahu se obnaša kot klasični delec in ne kaže nobenih lastnosti valovanja.

To je podobno kot v optiki. V *geometrijski optiki* smemo zanemariti valovne lastnosti svetlobe, ker je valovna dolžina λ veliko manjša od razdalj, ki nas zanimajo. Tedaj smemo optični sistem opisati z *žarki*, torej s *trajektorijami*. V *valovni optiki* pa svetlobo opišemo kot valovanje in lahko obravnavamo pojave, kot je uklon svetlobe, do katerih pride, če je velikost ovire za svetlobo primerljiva z njeno valovno dolžino. Močne kvantne pojave po tej analogiji torej pričakujemo, če se na razdalji, primerljivi z λ, močno spremenijo pogoji (recimo električno polje).

Kako pa je pri majhnih hitrostih zrna prahu? Postane de Brogliejeva valovna dolžina primerljiva z velikostjo delca in prah kaže valovne lastnosti? Ocenimo, pri kakšni hitrosti se bo to zgodilo:

$$v = \frac{h}{mr} \approx 1\,\text{pm/s}. \tag{5.5}$$

To je izjemno majhna hitrost, vendar v klasični mehaniki ni vnaprejšnjega razloga, da delec ne bi smel mirovati. Je mirujoče zrno prahu torej »kvantno«? Odgovor je vseeno nikalen. Upoštevati namreč moramo, da zrno prahu ni izolirano, temveč se zaletava v molekule plina, absorbira fotone, itd. Celo globoko v vesolju zrno prahu ni povsem izoliran sistem, saj je pritisk od nič različen, četudi je izjemno majhen. Poleg tega je vesolje prežeto s sevanjem mikrovalovnega ozadja. V vseh fizikalnih sistemih v ravnovesju pri končni temperaturi velja *ekviparticijski izrek* (izrek o enakomerni porazdelitvi energije), ki povezuje povprečno kinetično energijo delcev s temperaturo okolice:

$$\frac{1}{2}m\left\langle v^2\right\rangle = \frac{3}{2}k_B T. \tag{5.6}$$

Od tod lahko izračunamo, da ima povprečno hitrost $v = 1\,\text{pm/s}$ zrno prahu le pri skrajno nizki temperaturi $T = 2 \times 10^{-17}\,\text{K}$, kar je povsem nedosegljivo.[1] Pri sobni temperaturi ima zrno prahu v resnici povprečno hitrost nekaj mm/s.

5.2 Valovna funkcija

De Broglie je pokazal, da moramo zavreči klasična pojma točkastega delca in njegove trajektorije. V kvantni mehaniki stanje opišemo z vektorjem $|\psi(t)\rangle$ v Hilbertovem prostoru. Za delce je bolj prikladen opis z *valovno funkcijo* $\psi(\mathbf{r}, t)$. Valovna funkcija $\psi(\mathbf{r}, t)$ je *verjetnostna amplituda*, da delec najdemo v neki točki $\mathbf{r}$ ob času t. Bolj natančno, verjetnost, da najdemo delec v delu prostora s prostornino V, je enaka integralu

$$P = \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathrm{d}V, \tag{5.7}$$

kjer moramo integrirati po področju V. Izraz $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ zato imenujemo *verjetnostna gostota*. Veljati mora normalizacija:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2\, \mathrm{d}V = 1, \tag{5.8}$$

kjer integral poteka po vsem prostoru. Pokazati se da, da tvorijo kvadratno integrabilne funkcije, ki zadostijo pogoju (5.8), neskončnodimenzionalni Hilbertov prostor s skalarnim produktom

$$(\phi, \psi) = \int \phi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)\mathrm{d}V, \tag{5.9}$$

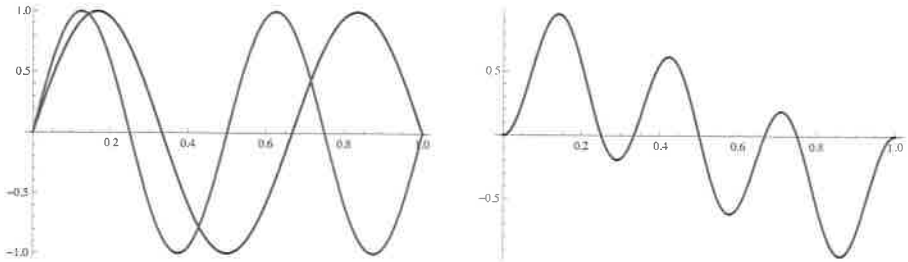
ilustriranim na sliki 5.1. Večina trditev, zapisanih za vektorje $|\psi\rangle$, velja tudi za valovne funkcije $\psi(\mathbf{r}, t)$.

5.3 Schrödingerjeva enačba za valovno funkcijo

Časovni razvoj valovne funkcije $\psi(\mathbf{r}, t)$ opisuje Schrödingerjeva enačba, ki jo sedaj zapišemo kot

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (H_{\text{kin}} + V)\,\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V\psi. \tag{5.10}$$

[1] Tekoči dušik ima vrelišče okoli 77 K, tekoči helij pri 4 K, z dilucijskimi hladilniki na izotop ^{3}He pa pridemo do 10 mK. Nižje temperature lahko v običajni snovi dosežemo le kratkotrajno. Manjšo količino atomov pa je možno z različnimi triki (ki vključujejo laserje in magnetna polja) ohladiti na kakšnih 100 nK: to področje raziskav se imenuje *fizika hladnih atomov*.



Slika 5.1. Funkciji $\phi(x) = \sin(3\pi x)$ in $\psi(x) = \sin(4\pi x)$, definirani na intervalu od 0 do 1, sta ortogonalni, $\int_0^1 \psi^*(x)\phi(x)\mathrm{d}x = 0$. Ta je razvidno iz grafa njunega zmnožka (desno), ki je liha funkcija glede na točko $x = 1/2$.

m je masa delca, $V(\mathbf{r})$ pa potencialna energija. V eni in dveh dimenzijah se izraz poenostavi, saj odpadejo parcialni odvodi po nepotrebnih krajevnih spremenljivkah.

Primerjajmo Schrödingerjevo enačbo z valovno enačbo (primer za eno dimenzijo)

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = c^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}. \tag{5.11}$$

Valovna funkcija v kvantni mehaniki je nujno kompleksna, medtem ko je prava rešitev valovne enačbe vedno realna funkcija. V Schrödingerjevi enačbi je odvod po času prvega reda, v valovni pa drugega.

5.4 Operatorji za valovne funkcije

Operator za valovno funkcijo je predpis, ki funkciji priredi drugo funkcijo. Operator položaja v smeri osi x je definiran z

$$X\psi = x\psi, \tag{5.12}$$

operator odvoda po koordinari x pa z

$$D_x\psi = \frac{\partial\psi}{\partial x}. \tag{5.13}$$

V izrazu za Schrödingerjevo enačbo prepoznamo operatorje drugega odvoda po kraju, denimo $D_x^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Zapišemo lahko

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(D_x^2 + D_y^2 + D_z^2\right) + V(\mathbf{r})\right]\psi. \tag{5.14}$$

Izraz med velikima oklepajema je operator. S primerjavo z enačbo (3.64) ugotovimo, da je to Hamiltonov operator H, ki se torej v tem primeru zapiše kot

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\mathbf{r}). \tag{5.15}$$

Za produkt operatorjev AB velja, da najprej deluje skrajno desni:

$$(AB)\psi = A(B\psi). \tag{5.16}$$

Vrstni red je pomemben, saj v splošnem $A(B\psi)$ ni enako $B(A\psi)$. V nadaljevanju bo pomemben pojem *komutatorja*, ki pove, kolikšna je razlika:

$$[A, B] = AB - BA. \tag{5.17}$$

Kot primer si oglejmo operatorja X in D_x:

$$\begin{aligned}[X, D_x]\psi &= \left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi \\ &= x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) \\ &= x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi - x\frac{\partial\psi}{\partial x} \\ &= -\psi.\end{aligned} \tag{5.18}$$

Ker zgornja izpeljava velja ne glede na to, kakšno funkcijo ψ smo izbrali, lahko zapišemo

$$[X, D_x] = -1. \tag{5.19}$$

Rečemo, da ta izraz velja »na operatorskem nivoju«, kar v grobem pomeni, da velja povsem splošno.

Pričakovano vrednosti opazljivke A v zapisu z valovno funkcijo $\psi(x)$ izračunamo kot

$$\langle A\rangle = \int \psi^*(x)A\psi(x)\mathrm{d}x. \tag{5.20}$$

Izraz moramo razumeti tako: z operatorjem A delujemo na funkcijo $\psi(x)$ in dobimo neko novo funkcijo $\phi(x)$. Potem izračunamo integral $\int \psi^*(x)\phi(x)\mathrm{d}x$, kjer smo funkcijo $\psi(x)$ kompleksno konjugirali. Pričakovana vrednost položaja x je, denimo,

$$\langle X\rangle = \int \psi^*(x)x\psi(x)\mathrm{d}x = \int |\psi(x)|^2 x\mathrm{d}x. \tag{5.21}$$

5.5 Prosti delec in ravni val

Obravnavajmo delec, na katerega ne deluje nobena sila, torej je potencialna energija enaka nič. Omejimo se na eno dimenzijo. Ugibamo, da se bo prosti delec obnašal kot ravni val, zato poskusimo Schrödingerjevo enačbo rešiti z nastavkom

$$\psi(x, t) = A\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}, \tag{5.22}$$

kjer je A neka konstanta. To je res rešitev, če je le izpolnjen pogoj

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}. \tag{5.23}$$

Iz De Brogliejevih in Einstein-Planckovih zvez vemo, da je $p = \hbar k$ in $E = \hbar\omega$, zato iz zveze (5.23) sledi $E = \frac{p^2}{2m}$: celotna energija E je kar enaka kinetični, $E_{\text{kin}} = mv^2/2 = p^2/2m$, saj potencialne ni. Opozoriti velja na razliko v primerjavi s svetlobo, kjer med ω in k velja linearna zveza $\omega = ck$, pri čemer je c svetlobna hitrost. Razlika med drugo potenco k v primeru Schrödingerjeve enačbe in prvo potenco k v primeru valovne je neposredno povezana s stopnjo odvodov v diferencialnih enačbah, fizikalno pa je to posledica tega, da ima elektron maso, foton pa ne.

Ker je verjetnostna gostota $|\psi(x,t)|^2 = |A|^2$ konstantna, ravni val predstavlja vrsto rešitve, kjer lahko delec z enako verjetnostjo najdemo v katerikoli točki. Delec je popolnoma delokaliziran.

V treh dimenzijah pojem valovnega števila posplošimo na *valovni vektor* s tremi komponentami, $\mathbf{k} = \{k_x, k_y, k_z\}$, z k pa označimo njegovo velikost $k = \|\mathbf{k}\|$. Valovni vektorji tvorijo *recipročni prostor* (medtem ko krajevni vektorji $\mathbf{r}$ tvorijo *realni* ali *koordinatni* prostor). Ravni val v splošnem zapišemo kot

$$\psi(\mathbf{r},t) = A\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} = A\mathrm{e}^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}. \tag{5.24}$$

Recipročni in koordinatni prostor sta med seboj *dualna*. Med njima prehajamo s preslikavo, ki se imenuje *Fourierova transformacija*. Stanje ravnega vala je delokalizirano v koordinatnem prostoru, a povsem lokalizirano v recipročnem, saj ga opišemo s točko $\mathbf{k}$. Stanje povsem lokaliziranega delca v koordinatnem prostoru pa ravno obratno ustreza povsem nedoločenemu stanju v recipročnem prostoru.

5.6 Operator gibalne količine in tok delcev

Ker je rezultat delovanja operatorja $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ na valovno funkcijo za ravni val enak

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2 = \frac{p^2}{2m}, \tag{5.25}$$

sklepamo, da je operator

$$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{5.26}$$

povezan z gibalno količino. Ko ta operator deluje na valovno funkcijo za ravni val, res dobimo $\hbar k = p$.

Z ravnim valom opišemo *curek* oziroma *žarek* delcev z enako gibalno količino. Curek elektronov pripravimo z *elektronsko puško*: kovinsko katodo iz volframa s tokom razžarimo, tako da iz nje uhajajo elektroni, ki jih usmerimo proti anodi priključeni na pozitivno napetost. Potrebne so še dodatne elektrode, ki usmerijo elektrone v vzporeden curek.

Gostoto toka delcev (število delcev na kvadratni meter na sekundo) v kvantni mehaniki izračunamo kot

$$j(x,t) = \frac{-i\hbar}{2m}\left(\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} - \psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\right). \tag{5.27}$$

Za ravni val $\psi(x,t) = A\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$ dobimo

$$j(x,t) = \frac{|A|^2\hbar k}{m} = \frac{|A|^2 p}{m} = |A|^2 v. \tag{5.28}$$

Količina $|A|^2$ meri gostoto delcev. Pomnožena s hitrostjo v določa gostoto *toka* delcev.

Če delci naletijo na oviro, se jih del odbije. V poenostavljenem enodimenzionalnem problemu je rešitev oblike

$$\psi(x,t) = A\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)} + B\mathrm{e}^{i(-kx-\omega t)}. \tag{5.29}$$

Za tok v tem primeru dobimo

$$j(x,t) = v\left(|A|^2 - |B|^2\right). \tag{5.30}$$

Valovna funkcija e^{ikx} torej ustreza gibanju delcev v desno, valovna funkcija e^{-ikx} pa gibanju delcev v levo: naraščanje faze valovne funkcije s koordinato x vsebuje informacijo o hitrosti in smeri delcev, kar je tudi skladno z operatorsko definicijo gibalne količine v enačbi (5.26).

5.7 Delec v potencialu

Obravnavajmo nabiti delec v električnem polju. Potencialna energija za delec z nabojem q je $V(\mathbf{r}) = q\phi(\mathbf{r})$, kjer je $\phi(\mathbf{r})$ *elektrostatični potencial*, ki ga merimo v enotah V. Za elektron je $q = -e_0$. Polje lahko vzpostavimo s kovinskimi elektrodami, lahko pa imamo v mislih tudi polje, ki ga v snovi ustvarijo pozitivno nabiti ioni in v katerem se gibajo valenčni elektroni atomov.

Predpostavimo, da V ni odvisen od časa. Iskali bomo stacionarna stanja, zato je časovna odvisnost povsem vsebovana v (nemerljivem) globalnem faznem faktorju in uporabimo nastavek

$$\psi(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\omega t}. \tag{5.31}$$

Sledi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = \hbar\omega\phi(\mathbf{r}). \tag{5.32}$$

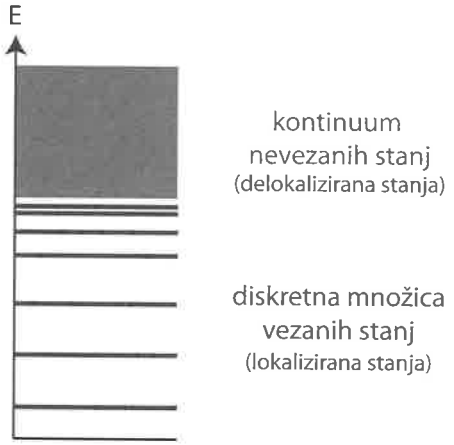
To je *stacionarna Schrödingerjeva enačba*. Valovna funkcija $\psi(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\omega t}$ je rešitev Schrödingerjeve enačbe pod pogojem, da je $\phi(\mathbf{r})$ rešitev stacionarne Schrödingerjeve enačbe. V valovni funkciji nastopa ena sama frekvenca ω, zato iz Einstein-Planckove zveze in iz de Brogliejeve hipoteze o snovnih valovanjih sledi, da imamo opravka s stacionarnim stanjem z dobro določeno celotno energijo $E = \hbar\omega$.

Valovna funkcija je za fizikalno realistične potenciale zvezna in zvezno odvedljiva funkcija. To lastnost ima tudi za nekatere matematične idealizacije potenciala, denimo za končne skoke v vrednosti potenciala. V eni dimenziji to pomeni, da ima valovna funkcija enako vrednosti na levi in na desni strani skoka, enakost pa velja tudi za prvi odvod na levi in na desni. Na meji z območjem z neskončnim potencialom pa je valovna funkcija zvezna, njen odvod pa nezvezen.

5.8 Vezana stanja

Rešitve, pri katerih je delec lokaliziran zaradi privlačnega potenciala $V(\mathbf{r})$, imenujemo *vezana stanja* in tvorijo *diskreten spekter* energij. Temu značilnemu kvantnomehanskemu pojavu rečemo *kvantizacija energije* in je razlog, da so absorpcijski spektri atomov diskretni. Pogosto obstaja za nek končno globok potencial le končno mnogo vezanih stanj. V eni in dveh dimenziji obstaja vsaj eno vezano stanje za poljubno plitev potencial, v treh dimenzijah pa mora biti potencial zadosti globok, da so vezana stanja sploh možna.

Pri višjih energijah so rešitve stacionarne Schrödingerjeve enačbe delokalizirane in tvorijo *kontinuum nevezanih stanj*, saj obstaja rešitev pri vsaki energiji nad *pragom*. Za nevezana stanja torej ni kvantizacije energije. Lep primer je elektron v privlačnem potencialu jedra, ki ima diskreten spekter vezanih stanj, če je elektron v orbitali okoli jedra, in kontinuum ioniziranih stanj, če je elektron iztrgan iz atoma.



Slika 5.2. Energijski spekter z diskretnim in zveznim (kontinuumskim) delom.

Če je potencial simetričen, so rešitve sode ali lihe glede na zrcaljenje preko sredine potenciala. *Simetrije* igrajo izjemno pomembno vlogo v fiziki, v kvantni mehaniki pa še posebej. Določajo *izbirna pravila*, ki opredeljujejo, kateri prehodi med kvantnimi stanji so dovoljeni, kateri pa prepovedani. Simetrije obravnava veja matematike, ki se imenuje *teorija grup*.

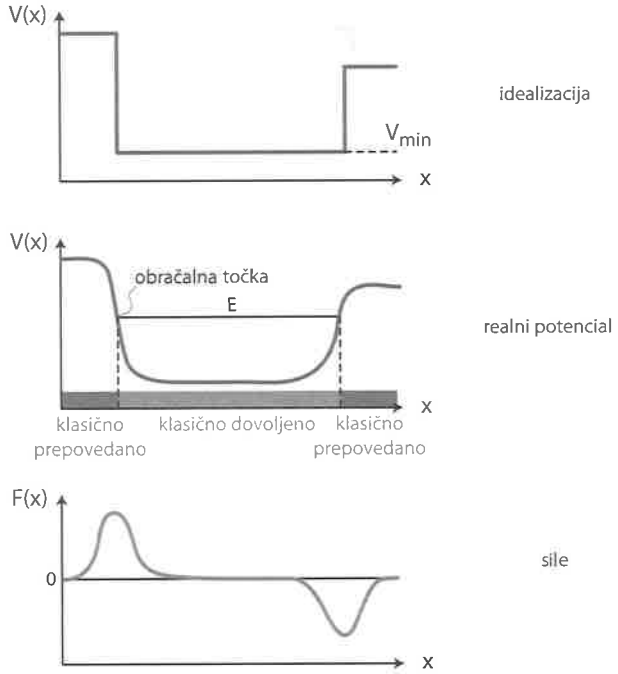
5.9 Potencialne jame

Oglejmo si obnašanje delca, ujetega v negativnem potencialu. Preprosta klasična analogija je točkasto telo v težnostnem polju z $V(x) = gmh(x)$, kjer je $g = 9{,}8\,\mathrm{m/s^2}$ gravitacijski pospešek, m masa telesa, $h(x)$ pa krajevno odvisna višina podlage. Telo si lahko predstavljamo kot kroglico, ki po podlagi drsi brez trenja in upora.

Če ima delec energijo E, se v klasični mehaniki nahaja samo na območju, kjer je $E \geq V(x)$, ker mora biti kinetična energija $E_{\mathrm{kin}} = E - V(x)$ pozitivna. Delec se torej giblje v dovoljenem območju med obračalnima točkama, kjer je $E = V(x)$. Onkraj obračalnih točk je *klasično prepovedano območje*, kamor delec ne more.

Klasično ima lahko delec, ujet v potencialu, poljubno energijo med minimalno potencialno energijo in energijo zgornjega robu potencialne jame. V kvantni mehaniki pa se delec obnaša kot valovanje, prihaja do odbojev na obeh stenah, ter do interference med vpadnim in odbojnim valovanjem. Možne so samo rešitve s točno določeno valovno dolžino in frekvenco, kot pri struni.

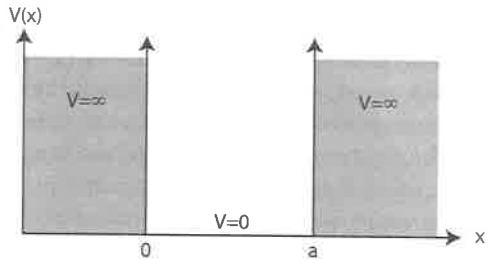
5.9.1 Neskončno globoka kvadratna potencialna jama



Slika 5.3. Delec v potencialni jami.

Imejmo jamo širine a. Potencial se v resnici ne more nezvezno spreminjati, torej je to idealizacija, ki pomeni, da na mejah med različnimi ravnimi deli potenciala na telo kratek čas deluje zelo močna sila, glej sliko 5.3.

Klasično delec potuje s konstantno hitrostjo in se odbija od sten, pri čemer se spremeni predznak hitrosti. Če nimamo prav nobenega podatka o legi delca, je verjetnost, da ga najdemo v neki točki, kar konstantna. Verjetnostna gostota je $\rho = 1/a$, saj mora veljati $\int \rho\,\mathrm{d}x = 1$. Videli bomo, da imajo kvantnomehanske rešitve verjetnostno gostoto, ki se spreminja s krajem.



Slika 5.4. Delec v neskončno globoki kvadratni potencialni jami.

Nalogo dodatno poenostavimo: potencial izven jame naj bo neskončno visok kot na sliki 5.4. Naj bo v jami $V = 0$. Stacionarno Schrödingerjevo enačbo zapišemo bolj strnjeno z vpeljavo konstantne $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$:

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2} + k^2\phi(x) = 0. \tag{5.33}$$

Izven jame je potencial neskončen, zato se delec tam ne more nahajati in velja $\phi(x) \equiv 0$. Valovna funkcija je zvezna. To pomeni, da na robovih velja $\phi(0) = 0$ in $\phi(a) = 0$. Enačba gibanja in robna pogoja so natanko takšni kot pri vpeti struni, zato je enaka tudi rešitev:

$$\phi(x) = A\sin(kx), \tag{5.34}$$

pri čemer iz robnega pogoja pri $x = a$ sledi $ka = n\pi$, torej

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \tag{5.35}$$

z $n = 1, 2, \ldots$, oziroma za energijo

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}. \tag{5.36}$$

Celo število n imenujemo *kvantno število.*

Konstanto A določimo tako, da bo valovna funkcija normirana:

$$\int_0^a |\phi_n(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1, \tag{5.37}$$

kjer je $\phi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$. Z uporabo identitete $\sin^2 u = [1 - \cos(2u)]/2$ lahko integral izračunamo za poljuben n in ugotovimo, da je v vseh primerih $A = \sqrt{2/a}$.

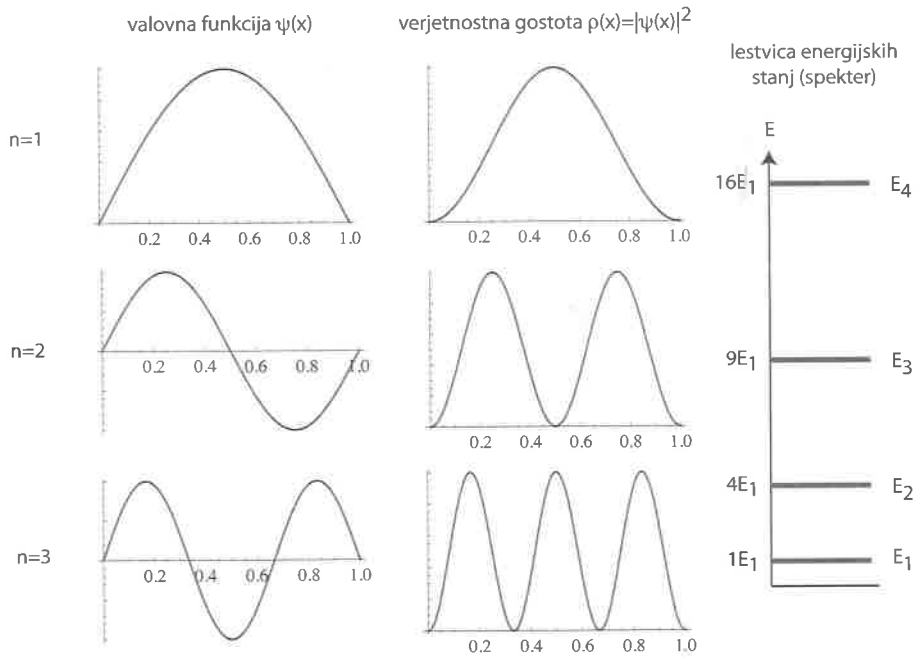
Osnovno stanje je torej

$$n = 1 \qquad \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}. \tag{5.38}$$

Prvo vzbujeno stanje je

$$n = 2 \qquad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right), \quad E_2 = 4\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}. \tag{5.39}$$

Valovne funkcije in verjetnostne gostote $\rho(x) = |\psi_n(x)|^2$ so prikazane na sliki 5.5. Iz slike je razvidno, da je kvantno število n povezano s številom *vozlov* (*ničel*) valovne funkcije. To velja splošno.



Slika 5.5. Valovne funkcije in verjetnostne gostote za delec v neskončno globoki potencialni jami ter energijski spekter vezanih stanj.

5.9.2 Končno globoka kvadratna potencialna jama

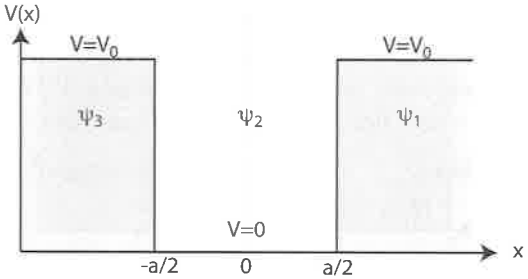
Obravnavajmo sedaj problem potencialne jame širine a, pri kateri je »višina sten« končna, $V = V_0$, kot na sliki 5.6. Zanimajo nas rešitve za primer $E < V_0$, ko je delec ujet v jami. Naloga je računsko zelo zahtevna, zato bomo le skicirali postopek reševanja in opisali končni rezultat.

Prostor razdelimo na oštevilčena območja. V osrednjem področju 2, torej v jami, je potencial enak nič, $V = 0$, in velja

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2} = E\phi(x). \tag{5.40}$$

Ponovno vpeljemo $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ in zapišemo splošno rešitev kot

$$\phi_2(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx). \tag{5.41}$$



Slika 5.6. Delec v končno globoki kvadratni potencialni jami.

Zunaj potencialne jame, v območjih 1 in 3, velja

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V_0\phi(x) = E\phi(x). \tag{5.42}$$

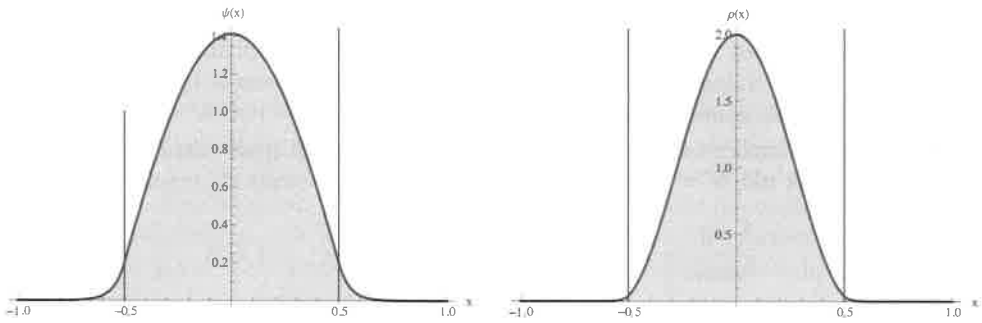
Ker je energija E manjša od potenciala V_0 na tem področju, je splošna rešitev v tem primeru sestavljena iz eksponentnih funkcij:

$$\phi_1(x) = C\mathrm{e}^{-\alpha x} + D\mathrm{e}^{\alpha x}, \tag{5.43}$$

kjer je $\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$. Podobno zapišemo splošno rešitev tudi v območju 3.

Poiščimo rešitev za osnovno stanje z najnižjo energijo. Valovna funkcija ne sme naraščati proti neskončnosti pri velikih x, ker vemo, da je delec *vezan* (ujet v potencialni jami). Zato je $D = 0$. Dokazati se da, da valovna funkcija osnovnega stanja nima vozlov, ter da morajo biti zaradi simetrije potenciala vse valovne funkcije ali lihe ali sode. Liha funkcija $\sin(kx)$ ima vozel pri $x = 0$, zato ni primerna in $A = 0$. Prava izbira z območje 2 je torej soda funkcija $\cos(kx)$.

Z upoštevanjem zveznosti valovne funkcije in njenega prvega odvoda na mejah med območjema 1 in 2 dobimo sistem transcendentnih enačb, ki podaja možne rešitve za celotno energijo E ter konstanti B in C. Podrobnosti nas ne zanimajo. Pomembna



Slika 5.7. Osnovno stanje kvadratne potencialne jame: levo je valovna funkcija $\psi(x)$, desno pa verjetnostna gostota $\rho(x) = |\psi(x)|^2$. Navpične črte označujejo rob jame.

pa je ugotovitev, da je konstanta C od nič različna. To pomeni, da je od nič različna verjetnost, da delec najdemo v klasično prepovedanem področju, glej sliko 5.7. To je posledica valovne narave delcev. Obstaja optična analogija, *evanescentno polje* pri totalnem odboju svetlobe, ki omogoča prisluškovanje optičnim komunikacijam brez pretrganja optičnega vlakna.

5.9.3 Parabolična potencialna jama (kvantno harmonično nihalo)

Oglejmo si še kvantno analogijo nihala na vijačno vzmet. Imejmo maso m na vzmeti s konstanto vzmeti k. Potencialno energijo zapišemo kot

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2, \tag{5.44}$$

kjer je $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ krožna frekvenca nihala. Rešiti moramo torej stacionarno Schrödingerjevo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2\phi(x) = E\phi(x). \tag{5.45}$$

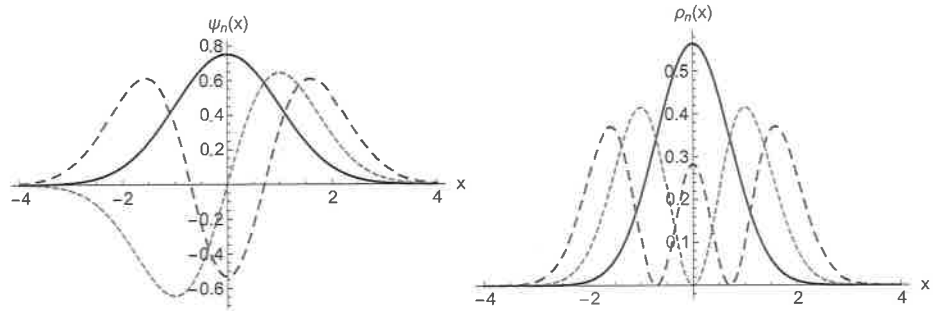
Reševanje te enačbe je zapleteno, zato bomo navedli le končni rezultat. Uvedemo pomožno brezdimenzijsko spremenljivko

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}x. \tag{5.46}$$

Lastna stanja so

$$\phi_n(\xi) = A\mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_n(\xi), \tag{5.47}$$

kjer je $H_n(\xi)$ n-ti Hermitov polinom. Kvantno število n teče od 0 dalje. Prvih nekaj Hermitovih polinomov je $H_0(z) = 1$, $H_1(z) = 2z$, $H_2(z) = 4z^2 - 2$, $H_3(z) = 8z^3 - 12z$. Valovne funkcije in verjetnostne gostote so prikazane na sliki 5.8.

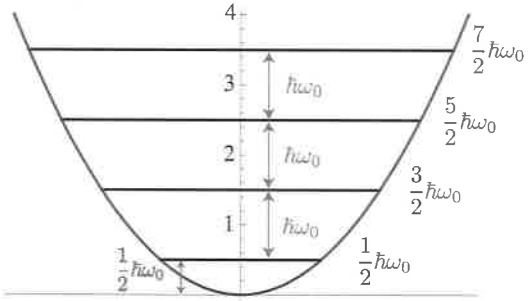


Slika 5.8. Osnovno stanje (polna črta) in prvi dve vzbujeni stanji (črtkani črti) kvantnega harmoničnega nihala.

Lastne energije so

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{5.48}$$

Energije si sledijo v enakomernih presledkih z razmikom $\hbar\omega_0$. To je ključna lastnost kvantnega harmoničnega nihala, ki jo je predpostavil že Planck ob samem začetku razvoja kvantne fizike. Omenimo še, da energija osnovnega stanja ($n = 0$) ni enaka nič, temveč $\hbar\omega_0/2$. To je *ničelna energija*, ki je posledica tega, da niti v osnovnem stanju kvantno harmonično nihalo ne miruje, saj položaj in gibalna količina ne moreta biti hkrati dobro določeni (glej razdelek 6.4 o Heisenbergovemu načelu nedoločenosti).



Slika 5.9. Energijski spekter kvantnega harmoničnega nihala.

Kvantno harmonično nihalo je najpomembnejši model v kvantni mehaniki. Razlog je enak kot pri klasičnem harmoničnem nihalu: poljubni potencial je v bližini ravnovesne točke (minimuma) približno paraboličen, torej harmoničen.

5.10 Gibanje elektronov skozi prepreke

5.10.1 Potencialni skok

Obravnavajmo dogajanje na mestu nagle spremembe potenciala. Velja naj

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ \text{konst.} & x > 0. \end{cases} \tag{5.49}$$

Na obeh straneh potencialnega skoka izberemo kot nastavek linearno superpozicijo ravnih valov, kar je splošna rešitev Schrödingerjeve enačbe:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad x < 0 \tag{5.50}$$

in

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}, \quad x > 0. \tag{5.51}$$

Potencial V za $x > 0$ je lahko pozitiven ali negativen. Iz pogojev za zveznost valovne funkcije in njenega prvega odvoda po kraju dobimo sistem enačb

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad \text{in} \quad k_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2). \tag{5.52}$$

Obravnavajmo primer, ko z leve pošljemo tok delcev proti skoku ($A_1 e^{ik_1 x}$). Nekaj delcev se odbije nazaj ($B_1 e^{-ik_1 x}$), nekaj pa jih je prepuščenih ($A_2 e^{ik_2 x}$). Daleč na desni ni toka delcev proti levi, zato mora veljati $B_2 = 0$. Enačbi moramo rešiti za A_2 in B_1, ki ju izrazimo z A_1:

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1 \quad \text{in} \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1. \tag{5.53}$$

Gostote verjetnostnega toka so

$$j_{\text{vp}} = \frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2, \quad j_R = \frac{\hbar k_1}{m}|B_1|^2, \quad j_T = \frac{\hbar k_2}{m}|A_2|^2. \tag{5.54}$$

Vpeljemo *odbojnost* (*reflektivnost*, R)

$$R = \frac{j_R}{j_{\text{vp}}} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \tag{5.55}$$

in *prepustnost* (*transmisivnost*, T)

$$T = \frac{j_T}{j_{\text{vp}}} = \frac{k_2|A_2|^2}{k_1|A_1|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \tag{5.56}$$

Vsota obeh je 1, saj se zaradi ohranitve naboja gostota verjetnostnega toka ohranja.

Oglejmo si posebni primer, ko velja $E < V$, torej ko je polna energija elektrona manjša od potencialne energije na desni strani in bi račun morali ponovili z novim nastavkom

$$\psi_2(x) = A_2 e^{-\alpha x} + B_2 e^{+\alpha x}. \tag{5.57}$$

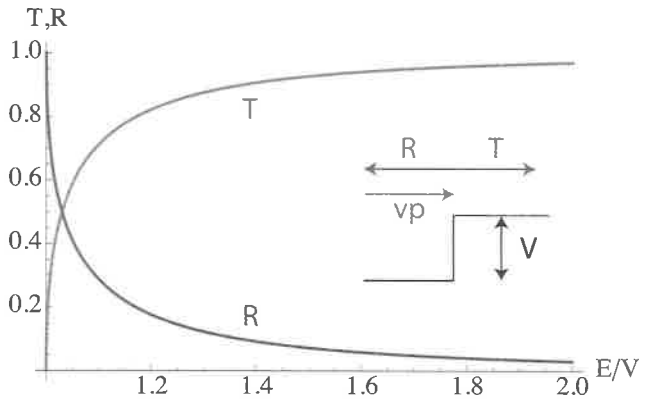
Formalno je to enako kot prej, če zahtevamo

$$\alpha = -ik_2 = -i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}, \tag{5.58}$$

zato lahko uporabimo kar prejšnje rezultate. B_2 moramo postaviti na nič, saj funkcija ψ_2 pri velikih x ne sme naraščati čez vse meje. Gostota verjetnosti eksponentno pojema:

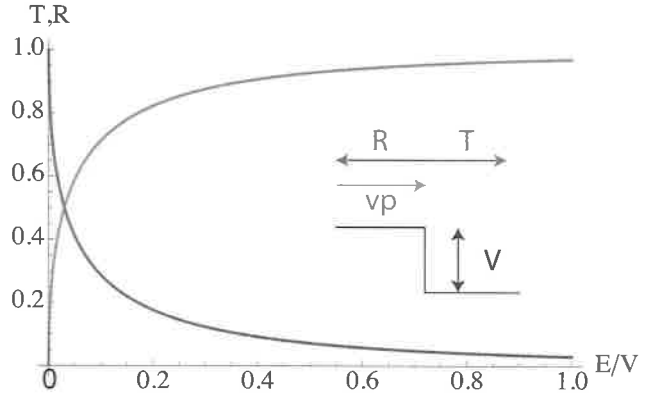
$$\rho_2(x) = |\psi_2|^2 = |A_2|^2 e^{-2\alpha x} = \frac{4k_1^2|A_1|^2}{|(k_1 + k_2)^2|} e^{-2\alpha x} = \frac{4k_1^2|A_1|^2}{k_1^2 + \alpha^2} e^{-2\alpha x}. \tag{5.59}$$

Tu smo uporabili enačbo (5.53). Ves tok elektronov se odbije, vendar pri tem delci za kratek čas zaidejo tudi v prepovedano območje. V klasični mehaniki so območja z $E < V$ povsem prepovedana, saj bi bila tam kinetična energija negativna. Kvantni delec pa lahko prodre tudi v takšno območje; tam je njegova valovna funkcija eksponentno upadajoča.



Slika 5.10. Potencialni skok: primer vpada na naraščajočo stopnico.

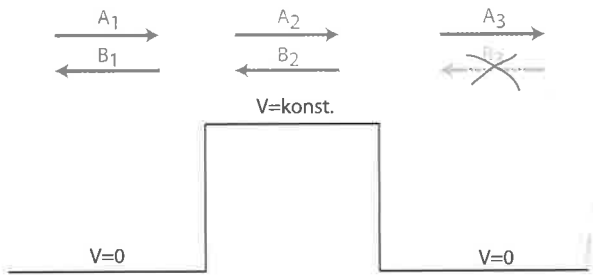
Na sliki 5.10 sta prikazani prepustnost T in odbojnost R za primer stopnice, kjer je potencial na desni strani višji kot na vpadni levi strani. Pri energijah E manjših od V je odboj popoln (območje $E/V < 1$, ki na sliki 5.10 ni prikazano). Pri energijah tik nad pragom prevodnosti je prepustnost T še vedno majhna, vendar naraste hitro proti $T = 1$, ko je energija delcev veliko nad V.



Slika 5.11. Potencialni skok: primer vpada na padajočo stopnico.

Na sliki 5.11 sta isti količini prikazani za primer, ko je potencial na desni strani nižji. Zanimivo je spoznanje, da je verjetnost za odboj od nič različna. Klasično bi seveda bila prepustnost popolna: kroglice, ki se kotalijo po klancu navzdol, se ne morejo odbiti nazaj. V kvantni mehaniki se zgodi natanko to, kar je posledica valovne narave delcev. Tudi v optiki pride do delnega odboja ob prehodu svetlobe iz enega medija v drugega, ne glede na to, ali se lomni količnik poveča ali zmanjša. Odboje se lahko prepreči z antirefleksnimi premazi, ki zmanjšajo odbojnost v pasu valovnih dolžin; pogosto se uporabljajo pri daljnogledih, fotografskih objektivih in očalih.

5.10.2 Potencialna plast



Slika 5.12. Prehod delcev preko potencialne plasti.

Oglejmo si sedaj prehod delcev preko *potencialne plasti*:

$$V(x) = \begin{cases} V = 0, & x < 0, \\ V = \text{konst.}, & 0 < x < a, \\ V = 0, & x > a. \end{cases} \tag{5.60}$$

Potencial V je lahko pozitiven (*potencialna pregrada*) ali negativen (*potencialna jama*). Nastavek ima sedaj tri dele:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \\ \psi_2 &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}, \\ \psi_3 &= A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x}, \quad k_3 = k_1. \end{aligned} \tag{5.61}$$

Zahtevamo zveznost valovne funkcije in njenega prvega odvoda na obeh mejah in dobimo

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad k_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2), \tag{5.62}$$

in

$$\begin{aligned} A_3 e^{ik_3 a} + B_3 e^{-ik_3 a} &= A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a}, \\ k_1 \left(A_3 e^{ik_1 a} - B_3 e^{-ik_1 a}\right) &= k_2 \left(A_2 e^{ik_2 a} - B_2 e^{-ik_2 a}\right). \end{aligned} \tag{5.63}$$

Valovanje vpada z leve strani proti desni, zato desno od potencialne plasti (v območju 3) ni valovanja proti levi in velja $B_3 = 0$. Prepustnost plasti je

$$T = \frac{j_{3,T}}{j_{\text{vp}}} = \frac{\frac{\hbar k_1}{m}|A_3|^2}{\frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \tag{5.64}$$

V prvem koraku izrazimo B_2 in A_2 z A_3:

$$A_2 = \frac{k_1 + k_2}{2k_2} e^{ik_1 a} e^{-ik_2 a} A_3, \quad B_2 = \frac{k_2 - k_1}{2k_2} e^{ik_1 a} e^{ik_2 a} A_3. \tag{5.65}$$

Iz enačb (5.62) izrazimo A_1 z A_2 in B_2:

$$A_1 = \frac{(k_1 + k_2)A_2 + (k_1 - k_2)B_2}{2k_1}. \tag{5.66}$$

Vstavimo A_2 in B_2 in dobimo

$$A_1 = \frac{k_1 + k_2}{2k_1}\frac{k_1 + k_2}{2k_2}e^{i(k_1-k_2)a}A_3 + \frac{k_1 - k_2}{2k_1}\frac{k_2 - k_1}{2k_2}e^{i(k_1+k_2)a}A_3, \tag{5.67}$$

ali

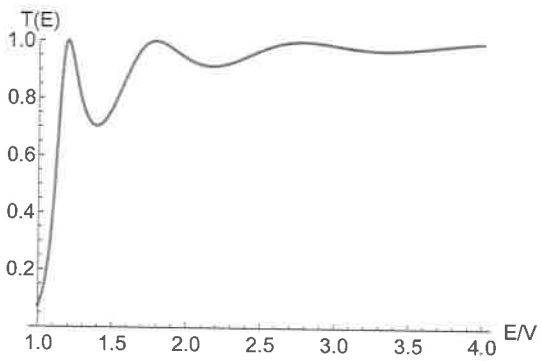
$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1 + k_2)^2e^{-ik_2a} - (k_1 - k_2)^2e^{ik_2a}}. \tag{5.68}$$

Prepustnost zapišemo kot

$$\begin{aligned} T &= \left(\frac{A_3}{A_1}\right)\left(\frac{A_3}{A_1}\right)^* \\ &= \frac{16k_1^2k_2^2}{(k_1 + k_2)^4 + (k_1 - k_2)^4 - 2(k_1 + k_2)^2(k_1 - k_2)^2\cos(2k_2a)} \\ &= \frac{16k_1^2k_2^2}{16k_1^2k_2^2 + 4(k_1 + k_2)^2(k_1 - k_2)^2\sin^2(k_2a)}, \end{aligned} \tag{5.69}$$

od koder sledi končni rezultat

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2}\right)^2\sin^2(k_2a)}. \tag{5.70}$$



Slika 5.13. Prepustnost skozi potencialno pregrado. $V > 0$, $a = \hbar/\sqrt{mV}$.

Oglejmo si primer potencialne pregrade z $V > 0$. Na sliki 5.13 je prikazana transmisivnost v odvisnosti od energije vpadnih delcev za energije, ki so nad robom pregrade, $E > V$. Pri zelo visokih energijah gre prepustnost proti 1, saj visokoenergijski delci šibke potencialne pregrade sploh ne čutijo. V vmesnem področju energij pa opazimo oscilirajočo odvisnost prepustnosti. Če je izpolnjen pogoj

$$k_2a = N\pi, \quad N = 1, 2, 3, \ldots, \tag{5.71}$$

dobimo popolno prepustnost. Z energijami ta pogoj zapišemo kot

$$E = V + \frac{N^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \tag{5.72}$$

Pojav se imenuje *resonančno sipanje.*

5.10.3 Tunelski pojav

Obravnavajmo problem potencialne pregrade za primer, ko je $E < V$. V tem primeru bi se klasični delec z gotovostjo odbil od ovire. Za kvantni delec pa obstaja možnost, da delec preide skozi plast in je transmisivnost od nič različna. To je *tunelski pojav.* Zapišemo lahko

$$T(E) = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)^2\sinh^2(\alpha d)\right]^{-1}, \tag{5.73}$$

kjer je $\alpha = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$, V višina pregrade, d pa njena širina. Če je pregrada zadosti široka ($\lambda = 2\pi/k \ll d$), sledi

$$T(E) = 16\left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)^{-2}e^{-2\alpha d}, \tag{5.74}$$

torej verjetnost za tuneliranje eksponentno upada s širino pregrade.

6

Kvantna nedoločenost

6.1 Merske napake

Uvodoma povejmo nekaj o napakah pri merjenju. Ločimo *statistične* in *sistematične* napake. Statistične napake so naključne: izmerki so razpršeni okoli prave vrednosti. Takšne napake zmanjšamo s ponavljanjem meritve in povprečevanjem. Sistematične napake so načeloma predvidljive in običajno konstantne ali sorazmerne z merjeno vrednostjo. Odpravljamo jih z boljšimi merilnimi instrumenti, bolj natančnim umerjanjem, upoštevanjem popravkov zaradi znanih težav, iskanjem virov napak, ki jih nismo upoštevali ali pričakovali, ipd.

Pri merjenju lastnosti klasičnega sistema, denimo njegovega položaja, prihaja do naključnih merskih napak. Rezultate označimo z x_i, $i = 1, \ldots, N$, kjer je N število meritev. Točne vrednosti μ ne poznamo, njena najboljša ocena pa je, kot intuitivno pričakujemo, *povprečje* meritev

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i. \tag{6.1}$$

Statistično napako (odstopanje $\bar{x}$ od μ) lahko poljubno zmanjšamo s ponavljanjem meritev, saj pada kot $1/\sqrt{N}$. Ocenimo jo z

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{1}{\sqrt{N}} s, \tag{6.2}$$

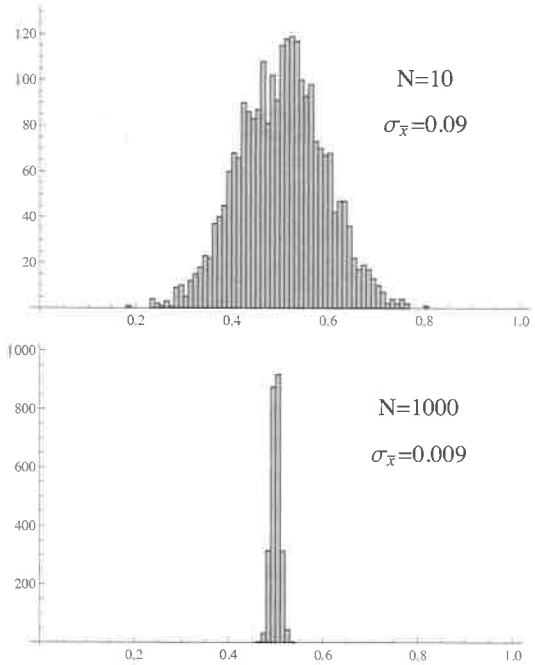
kjer je s definiran kot

$$s^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2 . \tag{6.3}$$

Količino s imenujemo *standardni odklon* izmerjenih rezultatov in meri njihovo statistično razpršenost. Rezultat meritve skupaj z oceno napake zapišemo kot

$$\mu = \bar{x} \pm \sigma_{\bar{x}}, \tag{6.4}$$

kar pomeni, da je z verjetnostjo 68 % točna vrednost μ v intervalu $[\bar{x} - \sigma_{\bar{x}} : \bar{x} + \sigma_{\bar{x}}]$. To sledi iz *centralnega limitnega izreka* (zakona o velikih številih), ki pravi, da je povprečje slučajnih spremenljivk porazdeljeno približno normalno (po Gaussovi krivulji). Odklon s^2 s povečevanjem števila meritev ostaja približno konstanten. Iz enačbe (6.2) torej sledi, da če povečamo število meritev za faktor 100, dobimo rezultat, katerega napaka je manjša za faktor 10, slika 6.1.

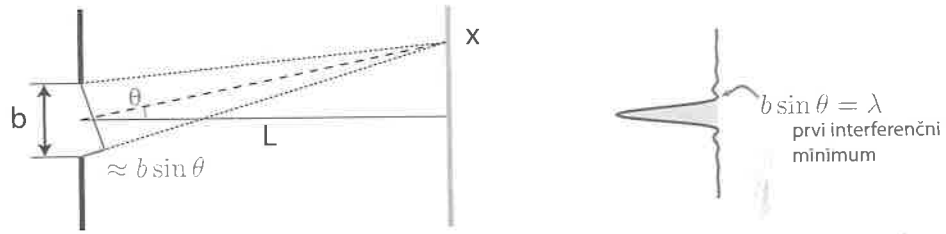


Slika 6.1. Porazdelitvi izmerjenih povprečij za različni števili meritev N.

6.2 Interferenca in uklon

Zanima nas, kakšno sliko dobimo na oddaljenem zaslonu, če svetloba z valovno dolžino λ vpada na oviro z režo končne širine b. Če je b zelo velik ($b \gg \lambda$), dobimo kot sliko svetlo progo širine b, drugje pa dobro definirano senco (*geometrijsko senco*). Če pa je b primerljiv z λ, moramo nujno upoštevati, da je svetloba valovanje in da prihaja do pojava interference, zaradi česar se svetloba širi tudi v območje geometrijske sence. Namesto ostre meje med osvetljenim delom in senco tam dobimo zapleten interferenčni vzorec z vrhovi in dolinami intenzitete. Višine stranskih vrhov so vse manjše, dlje ko gremo v območje »sence«. Pojav imenujemo *uklon na reži.*

Uklon je dobro poznan tudi iz vsakdanjega življenja, saj dobro vemo, da se lahko brez težav pogovarjamo s sogovornikom v sosednjem prostoru skozi odprta vrata, tudi če nismo v vidni črti. Prihaja namreč do uklona zvočnega valovanja na področju vrat. Izrazitost uklona zvoka je odvisna od valovne dolžine, torej od frekvence. Uklon je močnejši pri nizkih frekvencah, medtem ko so visokofrekvenčna valovanja bolj usmerjena: za ovirami bolje slišimo nizkofrekvenčne zvoke (base).



Slika 6.2. Uklon svetlobe na reži. Prvi minimum nastopi pri kotu $\theta \approx \sin\theta \approx \mathrm{tg}\,\theta \approx \frac{x}{L}$, za katerega je izpolnjen pogoj $b \sin\theta = \lambda$.

Prvi minimum v uklonskem vzorcu nastopi, ko je izpolnjen pogoj (slika 6.2)

$$b \sin\theta = \lambda. \tag{6.5}$$

Do tega rezultata pridemo tako: pas b razdelimo na dvoje. Za vsak par točk, po eno iz prvega pasu in drugo iz drugega, oddaljeni za $b/2$, velja, da destruktivna interferenca prvič nastopi, ko postanejo razlike poti $(b/2)\sin\theta$ enake $\lambda/2$.

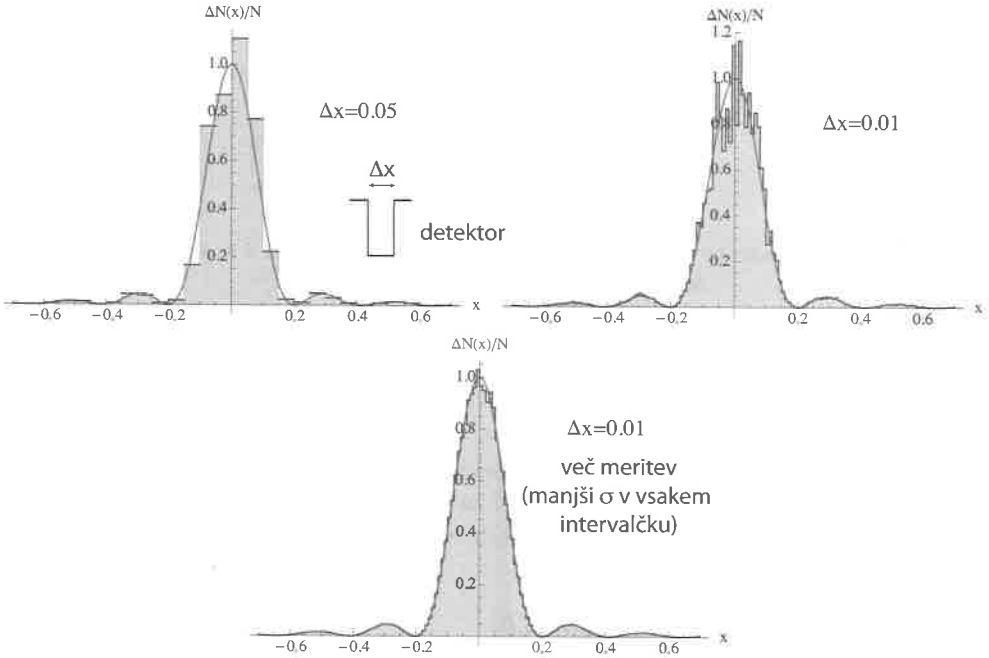
6.3 Verjetnostna gostota

Kar velja za svetlobo, velja tudi za snop elektronov, ki se obnaša kot ravni val z de Brogliejevo valovno dolžino. Če snop usmerimo na oviro z režo širine b, potem na oddaljenem zaslonu pričakujemo, da bodo elektroni padali na detektor v skladu s porazdelitvijo, ki je enaka intenziteti svetlobe pri uklonu na reži. Možna meritev bi potekala tako, da bi zelo občutljiv detektor z odprtino širine Δx postavili v točko x na mestu zaslona ter nekaj časa šteli vpadne elektrone, ΔN. Nato detektor pomaknemo za Δx in ponovimo meritev. Če je N celotno število izmerjenih elektronov, potem je v neki interval širine Δx padel delež $\Delta N/N$ vseh elektronov, ki je sorazmeren s širino Δx. Velja torej

$$\frac{\Delta N}{N} = \rho(x)\Delta x. \tag{6.6}$$

Iskana količina je *verjetnostna gostota* $\rho(x)$. Če manjšamo širino Δx ter merimo v vsakem intervalčku zadosti dolgo, dobimo vedno bolj gladko funkcijo, slika 6.3. Seveda je potrebno upoštevati, da je število dogodkov v vsakem intervalu sorazmerno s širino Δx, zato je potrebno pri manjših Δx meriti ustrezno dlje. Z dolžino meritve je povezana tudi statistična napaka, ki jo obravnavamo z običajnimi statističnimi postopki: od prej vemo, da napaka pada kot inverzni koren s številom meritev, zato bo pri meritvi verjetnostne gostote statistična napaka padala kot $1/\sqrt{t}$, kjer je t trajanje merjenja v vsakem intervalu.

Po drugi strani pa iz teorije vemo, da je verjetnostna gostota podana s kvadratom valovne funkcije elektrona v različnih točkah, $|\psi(x)|^2$, kjer je $\psi(x)$ rešitev Schrödingerjeve enačbe za problem ovire z režo širine b. Rezultati meritev se povsem skladajo s kvantno teorijo.



Slika 6.3. Meritev zvezne verjetnostne gostote $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ (krivulja) na zaslonu s pomočjo detektorja s širino vstopne zaslonke Δx (senčeni stolpci in lomljena črta).

Danes zlahka opravljamo poskuse tudi s posameznimi kvantnimi delci. Obstajajo izviri, ki oddajajo posamezne elektrone in fotone. Včasih so se v ta namen uporabljali radioaktivni izviri, kjer prihaja do naključnih razpadov, ob katerih so izsevani posamezni delci, danes pa znamo sestaviti izvire, ki izpuščajo posamezne delce na zahtevo. Prav tako obstajajo zadosti občutljivi detektorji, da lahko zaznamo posamezne delce v določenem trenutku v določeni točki.

Pri interferenčnem eksperimentu vnaprej ne moremo napovedati, kje bo posamezni delec zadel zaslon, čeprav so vsi delci opisani s povsem enako valovno funkcijo. V tem smislu posamezna izvedba poskusa ni ponovljiva. Vseeno pa po dolgem času pade na detektor zadosti delcev v različne točke, da lahko opredelimo gostoto $\rho(x)$ in ta bo v skladu z napovedano verjetnostno gostoto $|\psi(x)|^2$, ki jo dobimo kot rešitev Schrödingerjeve enačbe. Interferenčno sliko dobimo celo takrat, ko delci letijo iz izvira zadosti redko, da zagotovo vemo, da je na poti skozi napravo proti detektorju vedno le en sam delec. Ti delci so popolnoma neodvisni eden od drugega, ne učinkujejo eden na drugega, niti ne morejo imeti informacije o izidih (izmerjenih položajih trka) njihovih predhodnikov. Torej interferenčna slika ni rezultat kakšne korelacije *med različnimi delci*, temveč se vsak delec *zase* giblje tako, da porazdelitev dogodkov ustreza interferenčni sliki s temnimi in svetlimi progami.

Kvantna nedoločenost je nujna in neizogibna nedoločenost pri opisu kvantnih sistemov, ker je možen rezultat meritve opredeljen z verjetnostno porazdelitvijo. To je povsem drugače kot »nenatančnost« zaradi merskih napak, ki jo lahko zmanjšamo.

6.4 Heisenbergova neenačba

Obravnavajmo uklon na reži z vidika kvantne teorije. Na režo vpadajo elektroni z dobro določeno gibalno količino p. Os x na zaslonu leži pravokotno na smer vpadnega snopa. Nedoločenost koordinate x ob prehodu skozi režo je približno enaka širini reže,

$$\delta x \approx b. \tag{6.7}$$

Temna interferenčna proga se pojavi pri $x = L\sin\theta = L\lambda/b$, kjer je $\lambda = h/p$ de Brogliejeva valovna dolžina. Po prehodu skozi režo torej letijo elektroni tudi pod kotom glede na njihovo prvotno smer, kar pomeni, da imajo lahko od nič različno komponento x gibalne količine. Če nedoločenost komponente gibalne količine δp_x ocenimo iz

$$\frac{\delta p_x}{p} \approx \operatorname{tg}\theta \approx \sin\theta = \frac{\lambda}{b} \tag{6.8}$$

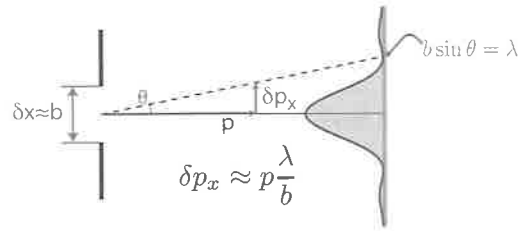
(glej sliko 6.4), torej na podlagi širine osrednjega osvetljenega območja do prvih temnih prog, za produkt nedoločenosti dobimo

$$\delta x\, \delta p_x \approx bp\frac{\lambda}{b} = bp\frac{h}{pb} = h. \tag{6.9}$$

V zmnožku se p in b pokrajšata, torej je produkt nedoločenosti neodvisen od širine reže in gibalne količine elektronov, zato v resnici velja splošno. Zgornji izraz je zgolj groba ocena. Bolj natančno zapišemo *Heisenbergovo načelo nedoločenosti* oziroma *Heisenbergovo neenačbo* kot

$$\delta x \delta p_x \geq \hbar/2 \tag{6.10}$$

kjer smo na desni strani uporabili točen izraz namesto ocene.



Slika 6.4. K izpeljavi Heisenbergove neenačbe.

Ne moremo torej povsem natančno določiti lege in hitrosti (gibalne količine) hkrati. Če je dobro določena gibalna količina, kot v valovni funkciji za ravni val prostega

delca, potem je popolnoma nedoločena lega elektrona. To nam je že dobro poznano, saj iz $\psi(x) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ takoj sledi $\rho(x) = |\psi(x)|^2 = |A|^2 =$ konst. Delec je lahko kjerkoli z enako verjetnostjo. Podobno lahko ostro določimo lego, vendar tedaj ne moremo ničesar povedati o gibalni količini. V valovnem paketu sta delno nedoločena tako gibalna količina kot lega, pri čemer nam Heisenbergova neenačba določa, kako »optimalen« valovni paket lahko sestavimo v najboljšem primeru.

Heisenbergovo načelo nedoločenosti zelo eksplicitno pove, da koncept trajektorije za kvantne delce nima smisla: ne moremo napisati $x = x(t)$, saj bi potem lahko z odvajanjem po času točno določili gibalno količino, $p = m\mathrm{d}x(t)/\mathrm{d}t$, kar pa Heisenbergova neenačba prepoveduje.

6.5 Nedoločenost za vezana stanja

Izračunajmo nedoločenost lege in gibalne količine za delec, ujet v potencialni jami. Energija osnovnega stanja delca v potencialni jami ne more biti enaka nič. To bi pomenilo, da delec miruje in bi lahko dobro določili tako njegovo lego kot hitrost, kar je v navzkrižju s Heisenbergovo neenačbo. Gibanju delca v osnovnem stanju rečemo tudi *ničelno nihanje* (angl. zero-point motion).

Kako bi ocenili nedoločenost lege, torej v kolikšni meri je porazdelitev x razpršena okoli pričakovane vrednosti $\langle x\rangle$? Odmik $x - \langle x\rangle$ ima pričakovano vrednosti nič, $\langle x - \langle x\rangle\rangle = \langle x\rangle - \langle x\rangle = 0$, in ne izvemo nič. Zato $x - \langle x\rangle$ najprej kvadriramo, izračunamo pričakovano vrednost, potem pa vzamemo kvadratni koren od rezultata. Za prvi korak velja

$$\begin{aligned}\langle (x - \langle x\rangle)^2\rangle &= \left\langle x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2\right\rangle \\ &= \langle x^2\rangle - 2\langle x\rangle\langle x\rangle + \langle x\rangle^2 \\ &= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 .\end{aligned} \tag{6.11}$$

Nedoločenost lege torej definiramo kot

$$\delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}, \tag{6.12}$$

nedoločenost gibalne količine pa kot

$$\delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}. \tag{6.13}$$

Za vezana stanja vedno velja $\langle p\rangle = 0$, ker je delec vezan na omejeno območje, zato v povprečju ne more imeti končne gibalne količine, sicer bi se po dolgem času lahko poljubno oddaljil od potencialne jame, kar pa ni mogoče. Pričakovane vrednosti $\langle p^2\rangle$ pa so od nič različne in jih moramo izračunati z integriranjem:

$$\langle p^2\rangle = \int \psi^*(x)(-i\hbar)^2\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\mathrm{d}x. \tag{6.14}$$

Za harmonično nihalo v osnovnem stanju z valovno funkcijo

$$\psi(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}} \tag{6.15}$$

dobimo $\langle x\rangle = 0$, kar sledi iz simetrije. Velja še

$$\langle x^2\rangle = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega_0}, \tag{6.16}$$

kar lahko izračunamo z integriranjem ali pa razberemo iz ugotovitve, da je v harmoničnem nihalu v povprečju pol energije v kinetični energiji, pol pa v potencialni, zato iz izraza za celotno energijo $E = \hbar\omega_0(n + 1/2)$ sledi za osnovno stanje

$$E_{\mathrm{pot}} = \left\langle \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2\right\rangle = \frac{1}{2}E = \frac{1}{4}\hbar\omega_0, \tag{6.17}$$

od koder izluščimo $\langle x^2\rangle$, ki smo ga zapisali zgoraj. Velja torej

$$\delta x = \left[\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega_0}\right]^{1/2}. \tag{6.18}$$

Podobno velja

$$E_{\mathrm{kin}} = \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle = \frac{1}{2}E = \frac{1}{4}\hbar\omega_0, \tag{6.19}$$

pa dobimo

$$\delta p = \left(\frac{1}{2}m\omega_0\hbar\right)^{1/2}. \tag{6.20}$$

Produkt nedoločenosti je torej

$$\delta x\,\delta p = \frac{\hbar}{2}, \tag{6.21}$$

kar je natanko spodnja meja v Heisenbergovi neenačbi.

6.6 Združljivost in komplementarnost

Naj bosta A in B operatorja, ki ustrezata dvema različnima opazljivkama. Sistem naj bo v stanju $|\psi\rangle$. Pomerimo najprej prvo opazljivko. Če je $A = \sum \lambda_{A,i}|i\rangle\langle i|$, potem z verjetnostjo $p_j = |\langle\psi|j\rangle|^2$ dobimo rezultat $\lambda_{A,j}$, sistem pa je takoj po meritvi v stanju $|\psi'\rangle = |j\rangle$. Če ima operator B enaka lastna stanja kot operator A, torej če lahko zapišemo $B = \sum \lambda_{B,i}|i\rangle\langle i|$, potem bo ob meritvi stanja $|\psi'\rangle$ rezultat nujno $\lambda_{B,j}$. Lahko se prepričamo, da bo izid meritve povsem enak, če najprej pomerimo B in potem A. Če imajo operatorji enaka lastna stanja, potem meritev ene izmed količin ne vpliva na meritve drugih: meritve so *združljive*. Hermitska operatorja A in B imata enaka lastna stanja natanko takrat, kadar komutirata, torej ko velja

$$AB = BA \quad \text{oziroma} \quad [A, B] = AB - BA = 0. \tag{6.22}$$

Če operatorja ne komutirata, potem opazljivk ne moremo hkrati točno pomeriti. Rečemo, da sta opazljivki *komplementarni*. Pomemben primer že poznamo: operator koordinate x in operator komponente gibalne količine $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, za katera velja

$$[x, p] = i\hbar, \tag{6.23}$$

kar sledi iz $[x, D_x] = -1$ (enačba 5.19).

Tudi Paulijeve matrike ne komutirajo. Velja namreč

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y, \tag{6.24}$$

torej

$$[S_x, S_y] = iS_z, \quad [S_y, S_z] = iS_x, \quad [S_z, S_x] = iS_y. \tag{6.25}$$

Sočasno lahko določimo zgolj eno komponento notranje vrtilne količine elektrona.

Splošna zveza za nedoločenost dveh opazljivk, je

$$\delta_A \delta_B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| . \tag{6.26}$$

Hitro se lahko prepričamo, da za $A = x$ in $B = p$, za kateri velja $[x, p] = i\hbar$, res dobimo

$$\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{6.27}$$

Za spinske operatorje S_i pa velja

$$\delta_{S_x} \delta_{S_y} \geq \frac{1}{2} |\langle S_z \rangle| . \tag{6.28}$$

Če je spin v stanju $|\uparrow\rangle$, potem je $\langle S_z \rangle = 1/2$ in sledi

$$\delta_{S_x} \delta_{S_y} \geq \frac{1}{4}. \tag{6.29}$$

To pomeni, da je v primeru dobro določene komponente z nedoločenost prečnih komponent x in y okoli $1/2$. To je enako njihovi velikosti, kar pravzaprav pomeni, da sta prečni komponenti povsem nedoločeni. To smo zatrdili že na začetku, ko smo prvič govorili o spinu, zdaj pa smo to pokazali tudi strogo matematično. Nedoločenost prečnih komponent je razvidna tudi iz dejstva, da pri meritvi S_x in S_y stanja $|\uparrow\rangle$ dobimo rezultat $1/2$ ali $-1/2$ z enako verjetnostjo, torej povsem naključno.

6.7 Kvantna radirka

Če s curkom delcev opravimo Youngov poskus (uklon na dveh režah), dobimo na oddaljenem zaslonu interferenčni vzorec tudi v primeru zelo nizke vpadne intenzitete, ko skozi napravo letijo posamezni kvantni delci. Če eksperimentalno postavitev spremenimo tako, da lahko pridobimo podatek o tem, skozi katero režo vsak delec leti, interferenčni vzorec izgine. Obstoj informacije o poti torej onemogoči, da bi kvantni delec interferiral sam s seboj. Obstajajo načini, ki temeljijo na kvantni prepletenosti, da se pridobljeno informacijo o poti delca naknadno izbriše; v tem primeru se interferenčni vzorec ponovno pojavi. Izbris informacije lahko opravimo celo po tem, ko je kvantni delec že bil zaznan v detektorju, pa bo trditev še vedno veljala: ta eksperiment se imenuje *kvantna radirka z zakasnjeno izbiro*. To namiguje, da ima odločitev o izbrisu vpliv na pretekle dogodke, a se izkaže, da takšno tolmačenje ni v skladu s kvantno teorijo. Razlog je preprosto v tem, da vrstni red meritev pravzaprav sploh ni pomemben, in da »kolapsa valovne funkcije« ne smemo razumeti kot dogodek, ki se pripeti sočasno v celotnem vesolju, temveč da se ob opravljeni meritvi spremenijo verjetnosti za rezultate drugih meritev v pogojne verjetnosti (ne glede na kraj in čas teh drugih meritev).

6.8 Bellova neenačba in njena kršitev v kvantni mehaniki

Klasični pogled na svet, da lahko predmetom pripišemo lastnosti neodvisno od meritev, je zelo všečen in intuitiven, saj to v vsakodnevnem življenju zelo dobro velja. Nekateri so zato mnenja, da obstaja temeljna teorija, bolj popolna kot kvantna mehanika, v kateri lahko stanja fizikalnih sistemov opredelimo z njihovimi lastnostmi, ki so dobro določene že pred meritvijo. Izpeljali bomo *Bellovo neenačbo*, ki temelji na predpostavkah, ki so v skladu z »zdravo pametjo«, torej z našo intuicijo, ki smo jo pridobili v svetu, kjer velja Newtonova mehanika (Bell, 1964). Nato bomo pokazali, da Bellova neenačba ne velja za kvantnomehanske sisteme, kar je bilo zelo prepričljivo potrjeno v številnih eksperimentih.

Oglejmo si naslednji miselni eksperiment. Charlie pripravi dva delca; ni pomembno kako, le večkrat mora biti sposoben ponoviti postopek. Vsakič en delec pošlje Alice, drugega Bobu (glej sliko 6.5).

Alice ima na voljo dva merilna aparata, ki merita neki fizikalni lastnosti P_Q in P_R, in se lahko vsakič, ko prejme od Charlieja nov delec, poljubno odloči (denimo z metom kocke), da bo izvedla eno izmed meritev. Za obe meritvi velja, da obstajata dva možna rezultata, ki ju označimo z $+1$ in -1. Če, denimo, Alice pomeri lastnost P_Q, bo dobila rezultat Q. Q je objektivna lastnost Alicinega delca, meritev jo le razkrije. Podobno z R označimo vrednost, ki jo razkrije meritev lastnosti P_R.

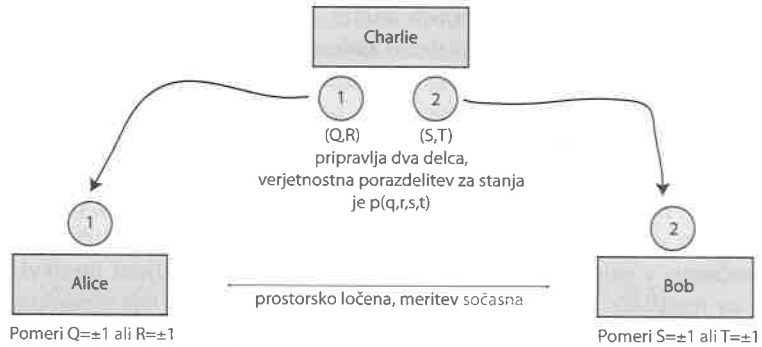
Tudi Bob lahko meri dve lastnosti, P_S in P_T, ki razkrijeta objektivni lastnosti S in T, ki sta $+1$ ali -1. Podobno kot Alice se tudi on naključno odloči, katero lastnost bo pomeril. Eksperiment je postavljen tako, da sta Alice in Bob na različnih zelo oddaljenih krajih in da opravita meritev *sočasno*. Meritev, ki jo opravi Alice torej v ničemer ne more vplivati na meritev, ki jo opravi Bob, in nasprotno.

Oglejmo si količino

$$x = QS + RS + RT - QT = (Q + R)S + (R - Q)T. \tag{6.30}$$

Ker sta $R, Q = \pm 1$, mora veljati ali $(Q + R)S = 0$ ali $(R - Q)T = 0$. V vsakem primeru pa je

$$x = QS + RS + RT - QT = \pm 2. \tag{6.31}$$



Slika 6.5. Postavitev pri Bellovem miselnim eksperimentom.

Naj bo $p(q,r,s,t)$ verjetnost, da je pred meritvijo sistem v stanju $Q=q$, $R=r$, $S=s$ in $T=t$. Funkcija p je odvisna od tega, kako je Charlie pripravil delce. Če so vsi delci, ki jih pošlje k Alice, v stanju $Q=+1$, $R=+1$, in vsi delci, ki jih pošlje k Bobu, v stanju $S=-1$, $T=-1$, potem je $p(+1,+1,-1,-1)=1$, za vse ostale argumente pa je $p=0$. Če pa Charlie vse lastnosti izbira povsem naključno, potem je $p=1/16$ za vse vrednosti argumentov, saj je vseh 16 možnih izbir enako verjetnih. Izpeljava v nadaljevanju velja povsem splošno, ne glede na to, kako Charlie pripravlja delce in kakšna je funkcija p.

Oglejmo si povprečje količine x:

$$\begin{aligned}\overline{QS+RS+RT-QT} &= \sum_{qrst} p(q,r,s,t)(qs+rs+rt-qt)\\ &\le \sum_{qrst} p(q,r,s,t)\times 2 \qquad (6.32)\\ &= 2.\end{aligned}$$

Prva vrstica je definicija povprečja. Iz prve v drugo upoštevamo zgornji izraz, da je $x=\pm 2$. Iz druge v tretjo upoštevamo, da je vsota verjetnosti p enaka 1.

Velja pa tudi

$$\begin{aligned}\overline{QS+RS+RT-QT} &= \sum_{qrst} p(q,r,s,t)qs + \sum_{qrst} p(q,r,s,t)rs +\\ &\quad + \sum_{qrst} p(q,r,s,t)rt - \sum_{qrst} p(q,r,s,t)qt \qquad (6.33)\\ &= \overline{QS}+\overline{RS}+\overline{RT}-\overline{QT}.\end{aligned}$$

$\overline{AB}$ meri korelacije med A in B. Če imata A in B pogosto enako vrednost (sta korelirani), bo $\overline{AB}$ blizu 1. Če imata A in B pogosto obratni vrednosti (sta antikorelirani), bo $\overline{AB}$ blizu -1. Če pa imata A in B med seboj neodvisne vrednosti (sta nekorelirani), bo $\overline{AB}$ enako 0.

Sledi *Bellova neenačba* (v tej obliki se imenuje tudi neenačba CHSH):

$$\overline{QS}+\overline{RS}+\overline{RT}-\overline{QT}\le 2. \qquad (6.34)$$

S ponavljanjem meritev lahko določimo količino na levi strani izraza. Po končanih meritvah pregledamo rezultate. Vzamemo, denimo, vse tiste, ko sta se Alice in Bob odločila, da bosta izmerila P_Q oz. P_S. Povprečimo produkte izmerjenih Q in S, pa dobimo $\overline{QS}$. Podobno za druge količine na levi strani izraza. To so v resnici štirje »podeksperimenti«, odvisno od izbire meritve, za katero se odločita Alice in Bob. Na koncu preverimo, če dobimo res rezultat, ki je manjši od 2.

Vprašamo se lahko, od kod pride omejitev na 2? Načeloma bi lahko izraz imel vrednost do 4. Če želimo imeti čim višji rezultat, morajo biti Q in S korelirani, S in R korelirani, ter R in T korelirani. Ker je koreliranost tranzitivna lastnost, to pomeni, da dobimo visoke prispevke, če so močno korelirane vse štiri spremenljivke. Po drugi strani pa za zadnji člen velja, da dobimo velik pozitiven prispevek, če sta Q in T maksimalno antikorelirani. To pa je v nasprotju s prvo zahtevo. Vrednost 2 je pač mejna vrednost ob največji možni meri (anti)korelacij med spremenljivkami.

Bellova neenačba temelji na dveh predpostavkah:

1. Fizikalne lastnosti P_Q, P_R, P_S in P_T imajo določene vrednosti Q, R, S in T, ki obstajajo neodvisno od meritve, saj jih je izbral in fiksiral Charlie. To je predpostavka *realizma*.

2. Meritvi, ki jih opravita Alice in Bob, sta neodvisni. To je predpostavka *lokalnosti*. Lokalnost pomeni, da so zakoni fizike takšni, da na dogajanje v neki točki prostora vpliva le neposredna okolica te točke, ne pa dogodki na drugem koncu vesolja. V zakone fizike je lastnost lokalnosti vgrajena s tem, da jih zapišemo z diferencialnimi enačbami, kjer nastopajo samo količine v dani točki in časovni ter krajevni odvodi v tej isti točki.

Ti intuitivno povsem sprejemljivi predpostavki se skupaj imenujeta predpostavka *lokalnega realizma*.

V klasični fiziki bi eksperiment lahko potekal tako: Charlie izbira med kovanci črne in bele barve, pri vsakem pa lahko izbere cifro ali grb. Po enega pošlje v zapečateni kuverti Alice in Bobu. Alice in Bob lahko vsak izbereta, ali bosta merila barvo kovanca, ali kako je obrnjen (eno ali drugo). Njuni izbiri meritve morata biti neodvisni in naključni. Ne glede na to, kako se Charlie odloča, kakšne kovance bo poslal, bo analiza končnih rezultatov pokazala, da je Bellova neenačba izpolnjena.

Poglejmo si sedaj kvantnomehanski primer, kjer Charlie pošilja par kubitov (recimo par elektronov, kjer smo kvantno informacijo zakodirali v spinu), Alice pa se odloča med meritvijo spina s Stern-Gerlachovim detektorjem v smeri Z ali X:

$$Q=Z_1, \quad R=X_1, \qquad (6.35)$$

Bob pa med meritvama s Stern-Gerlachovim aparatom, obrnjenim pod kotom 45° ali $-45°$ glede na os z, tako da meri opazljivki

$$S=\frac{-Z_2-X_2}{\sqrt{2}}, \quad T=\frac{Z_2-X_2}{\sqrt{2}}, \qquad (6.36)$$

kar naj bralec sprejme brez dokaza. S spodnjim indeksom 1 oz. 2 smo označili, na kateri kubit deluje ustrezni operator. Če Charlie vsakič pošlje kvantno prepleten par kubitov v Bellovem stanju

$$|\Psi\rangle = |\beta_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|01\rangle - |10\rangle\right), \tag{6.37}$$

potem lahko s kvantnomehanskim računom pričakovanih vrednosti dobimo

$$\begin{aligned}
\langle QS\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\langle\psi| Z_1(Z_2+X_2)|\psi\rangle \\
&= -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{2}\Big(\langle 01| Z_1(Z_2+X_2)|01\rangle - \langle 10| Z_1(Z_2+X_2)|01\rangle - \\
&\quad - \langle 01| Z_1(Z_2+X_2)|10\rangle + \langle 10| Z_1(Z_2+X_2)|10\rangle\Big) \\
&= -\frac{1}{2\sqrt{2}}\left((-1+0)-(0+0)-(0+0)+(-1+0)\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}.
\end{aligned} \tag{6.38}$$

Podobno dobimo

$$\langle RS\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle RT\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle QT\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{6.39}$$

Končno sledi

$$\langle QS\rangle + \langle RS\rangle + \langle RT\rangle - \langle QT\rangle = 2\sqrt{2} > 2. \tag{6.40}$$

Bellova neenačba je kršena! Opravljene so bile eksperimentalne meritve s fotoni, ki so pokazale brez dvoma, da ta kršitev res obstaja (A. Aspect, l. 1982). Zadnje dvomljivce so prepričali poskusi iz leta 2015, v katerih so dokončno izključili možne vrzeli v eksperimentu (»loophole-free Bell test«).

To pomeni, da lokalni realizem za naš svet ne obstaja. Ni čisto jasno, ali je težava v realizmu ali lokalnosti, gotovo pa vsaj ena izmed teh intuitivnih predpostavk ne velja. Bolj natančno, kršitev Bellove neenačbe nam pove, da ne more obstajati nobena teorija z lokalnimi skritimi spremenljivkami (ki bi opisovale objektivno realnost), ki bi lahko bila v skladu z napovedmi kvantne mehanike.

Kot zanimivost omenimo še, da so Bellova stanja maksimalno prepletena in da je vrednosti $2\sqrt{2}$ v enačbi (6.40) največja možna.

7

Kvantni računalniki

Izdelava kvantnih računalnikov je izjemno zahtevna naloga zaradi motenj iz okolice, ki povzročajo izgubo koherence med različnimi deli sistema, kar vodi v izgubo kvantne informacije. Položaj ni brezupen, saj je napake možno odpravljati tudi v kvantnih sistemih. Ogledali si bomo tudi nekaj najbolj obetavnih pristopov za izdelavo kvantnega računalnika.

7.1 Dekoherenca

Za kvantno računanje potrebujemo robusten dvonivojski sistem, kubit, ki ostane v superpoziciji stanj zadosti dolgo, da lahko opravimo zaporedne operacije kvantnega algoritma. Imeti moramo tudi možnost sistem pripraviti v poljubnem začetnem stanju ter izmeriti končno stanje. Ti pogoji niso povsem združljivi: zahteva po robustnem kubitu terja šibko sklopitev z okolico, zato pa težje opravljamo računske operacije z zunanjim delovanjem na sistem.

Pomembna količina je *dekoherenčni čas*, τ_D, ki opisuje, kako odporen je sistem proti naključnim motnjam iz okolice: če pripravimo kubit v stanju $|1\rangle$ in na njem ne opravljamo nobenih operacij, temveč ga pustimo čisto pri miru, potem po času τ_D z znatno verjetnostjo najdemo sistem v drugem stanju $|0\rangle$, po nekajkrat τ_D pa bo sistem povsem naključno v stanju $|0\rangle$ ali $|1\rangle$. Po tem času stanje ni več koherentno. Poleg napak bit-flip ($|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$) so v kvantnih računalnikih v enaki meri problematične tudi fazne napake, recimo če se stanje $|0\rangle + |1\rangle$ pokvari v $|0\rangle - |1\rangle$.

Kvantnih sistemov podvrženih dekoherenci ne moremo opisati z vektorjem stanja $|\psi\rangle$, temveč potrebujemo bolj splošen pojem *gostotne matrike* ρ. To je hermitska matrika, katere diagonalni matrični elementi $\rho_{ii} = \langle i|\rho|i\rangle$ določajo verjetnost, da sistem najdemo v kvantnem stanju $|i\rangle$. Če je sistem povsem koherenten (je v *čistem stanju*), gostotno matriko zapišemo z vektorjem stanja kot

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, \tag{7.1}$$

kar je združljivo z Bornovim pravilom $p_i = |\langle i|\psi\rangle|^2$. Če pa je sistem podvržen dekoherenci (je v *mešanem stanju*), je gostotna matrika statistično povprečje različnih kvantnih stanj $|\psi_i\rangle$

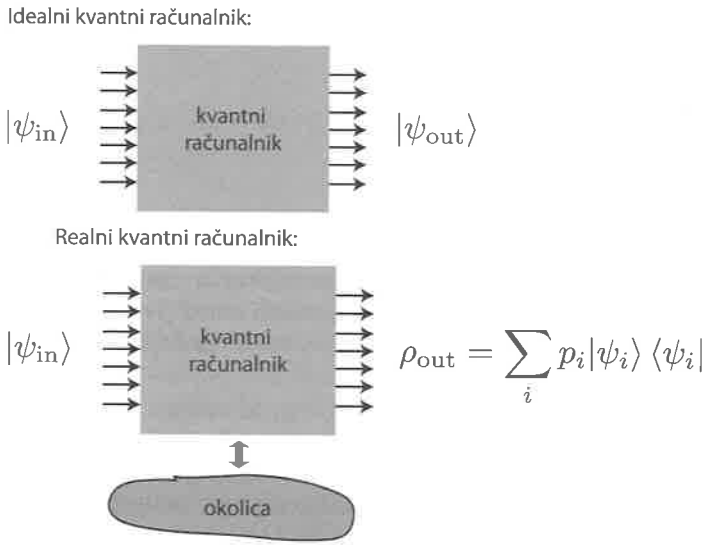
$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| . \tag{7.2}$$

Stanje je čisto natanko takrat, ko velja $\mathrm{Tr}[\rho^2] = 1$. $\mathrm{Tr}[O]$ imenujemo sled (angl. trace) matrike O. Definirana je kot vsota diagonalnih matričnih elementov matrike O.

Dekoherenčni čas τ_D določa, kako dolgo lahko sistem v dobrem približku opišemo kot čisto kvantno stanje, in podaja zgornjo mejo trajanja celotnega algoritma. Potrebno je vedeti še, koliko časa traja izvajanje vsakih kvantnih vrat oz. osnovnih unitarnih operacij, τ_OP. Količnik

$$\#\mathrm{op} = \frac{\tau_\mathrm{D}}{\tau_\mathrm{OP}}, \tag{7.3}$$

določa, kako kompleksni algoritmi so izvedljivi. Razlika med idealnim in realnim kvantnim računalnikom je ilustrirana na sliki 7.1.



Slika 7.1. Vpliv motenj iz okolice na opravljanje kvantnih algoritmov.

Potrebne pogoje za izvajanje kvantnih algoritmov formalno opredeljujejo *diVincenzovi kriteriji* za skalabilno kvantno računalništvo:

1. Obstajati morajo dobro definirani kubiti.
2. Začetno stanje je možno pripraviti na zanesljiv način. Običajno je potrebno hlajenje do zadosti nizkih temperatur, da pristane sistem v svojem osnovnem stanju.
3. Dekoherenca je zadosti šibka. Operacije kvantnih vrat lahko izvajamo na zanesljiv in natančen način.
4. Opravimo lahko meritve kvantnega stanja izbranih kubitov. Meritve morajo biti hitre in natančne.
5. Sistem je lahko poljubno velik. To pomeni, da lahko povečamo dimenzijo Hilbertovega prostora, ne da bi eksponentno narasla časovna, prostorska ali energijska zahtevnost. V najbolj ugodnem primeru bi zahteve naraščale zgolj linearno.

Dodatni zahtevi za *kvantno komuniciranje* sta:

6. Pretvarjamo lahko med mirujočimi in potujočimi kubiti.
7. Potujoče kubite lahko pošiljamo med poljubnimi mesti brez napak.

7.2 Kvantno odpravljanje napak

S postopki *kvantnega odpravljanja napak* omejimo kvarni vpliv motenj iz okolice. Od klasičnih postopkov se razlikujejo zaradi dveh temeljnjih razlogov: 1) prepovedi kloniranja kvantne informacije, 2) drugačne narave napak v kvantnih algoritmih (poleg diskretnih tudi zvezne, kar pomeni, da napaka narašča postopoma s časom, za razliko od napak bit-flip v klasičnih sistemih, ki so čisto diskretni dogodki). Pravzaprav je presenetljivo, da je korekcija napak pri kvantnem računanju sploh mogoča. Napake lahko zaznamo le tako, da opravimo meritev, kar dodatno zmoti sistem. Rešitev sta vendarle leta 1995 iznašla Shor in Steane. Cena korekcije napak je povečano število potrebnih kubitov, saj en logični kubit informacije zakodiramo v večje število fizičnih kubitov. En logični kubit lahko zapišemo s tremi fizičnimi in dosežemo varnost pred napakami bit-flip, ali s petimi fizičnimi, da dobimo varnost pred poljubnimi enokubitnimi napakami.

Uspešno odpravljanje napak je možno le pri zadosti nizki stopnji dekoherence. Prag je ocenjen na $\sim 10^{-4}$: če pride do največ ene napake na vsakih 10000 računskih operacij, lahko izvajamo poljubno zapleten kvantni algoritem, ki traja poljubno dolgo, na poljubno velikem kvantnem računalniku.

Oglejmo si preprost primer, ko so edini tip napak naključni dogodki bit-flip: občasno pride do neželene operacije NOT (operator X). Klasično lahko takšne napake zaznavamo s potrojitvijo števila bitov ($0 \to 000$, $1 \to 111$) in uporabo *pravila večinskega stanja*. Morebitno napako zaznamo tako, da pomerimo vsa tri stanja: če so enaka, do napake ni prišlo, če pa se en bit razlikuje od ostalih dveh, ga popravimo. Postopek moramo ponavljati zadosti pogosto, da ne prihaja do dvojnih in trojnih napak, ki jih ne bi mogli odpraviti.

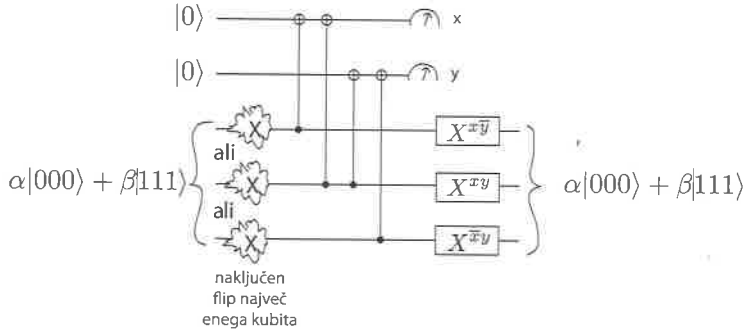
V kvantni mehaniki moramo pri potrojitvi kubitov upoštevati tudi superpozicije stanj, torej iz $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ želimo dobiti $\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle$ za poljubna α in β. To dosežemo z dvakratnim delovanjem vrat CNOT:

$$|\psi\rangle = C_{21}C_{20}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|00\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle . \tag{7.4}$$

Zapis C_{ij} pomeni, da je i kontrolni kubit, j pa ciljni kubit. Kubite oštevilčimo z desne proti levi, začenši z 0, $|i_2 j_1 k_0\rangle$, kar je enak dogovor kot pri dvojiškem zapisu navadnih bitov. Cilj kvantnega odpravljanja napak je ločiti med nepokvarjenim stanjem $|\psi\rangle$ in pokvarjenimi stanji

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= X_0\,|\psi\rangle = \alpha\,|001\rangle + \beta\,|110\rangle\,, \\ |\psi_1\rangle &= X_1\,|\psi\rangle = \alpha\,|010\rangle + \beta\,|101\rangle\,, \\ |\psi_2\rangle &= X_2\,|\psi\rangle = \alpha\,|100\rangle + \beta\,|011\rangle\,, \end{aligned} \tag{7.5}$$

na tak način, da ne pride do izgube kvantne koherence. Potreben pogoj za to je, da ne izvemo nobene informacije o vrednostih α in β. Glavna ideja je, da stanje $|\psi\rangle$ leži znotraj nekega dvodimenzionalnega podprostora v splošnem osemdimenzionalnem Hilbertovem prostoru za tri kubite. Enako velja za stanja $|\psi_0\rangle$, $|\psi_1\rangle$ in $|\psi_2\rangle$. Poleg tega so ti podprostori med seboj ortogonalni, torej jih lahko med seboj natančno ločimo! To storimo z uporabo dveh dodatnih kubitov in uporabo vrat CNOT, ki prenesejo informacijo o podprostorih na pomožna kubita (ne pa informacije o α in β), glej sliko 7.2. Ta podatek zadostuje, da potem popravimo stanje sistema, zakodirano v treh kubitih.

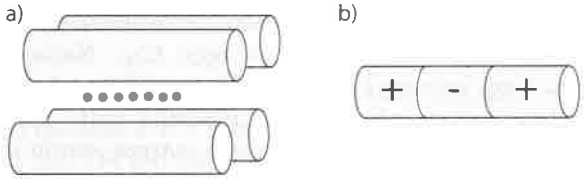


Slika 7.2. Preprost primer zaznavanja in odpravljanja enokubitnih napak v sistemu, kjer je logični kubit zakodiran v stanju treh fizičnih kubitov. $\bar{0} = 1$, $\bar{1} = 0$.

7.3 Ioni v elektromagnetni pasti

Majhno število ionov lahko ujamemo v *elektromagnetno past*, sestavljeno iz štirih vzporednih elektrod v obliki valjev, slika 7.3(a). Naj bo os z vzporedna z elektrodami. Napetost na obeh koncih elektrod je različna od napetosti na sredini, kot je prikazano na sliki 7.3(b), in nastane statični električni potencial, ki ga lahko zapišemo kot

$$\Phi_{stat} = V_0\left[z^2 - (x^2 + y^2)\right]. \tag{7.6}$$



Slika 7.3. (a) Kvadrupolna Paulova past. Ujeti ioni tvorijo verigo vzdolž simetrijske osi naprave. (b) Napetost na elektrodi.

S tem je gibanje ionov omejeno v smeri osi z, ne pa tudi v prečnih smereh x in y. Tudi drugače oblikovane elektrode ne pomagajo: nabite delce je nemogoče ujeti v statičnem električnem polju (Earnshawov izrek). Namesto tega diagonalno na dve izmed elektrod priključimo dodatno hitro nihajočo napetost, ki ustvari dinamični radiofrekvenčni električni potencial

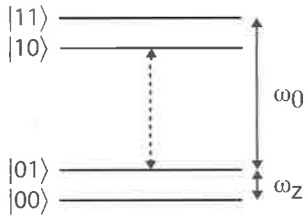
$$\Phi_{din} = [V_1 \cos(\Omega t) + V_2] \times \left[1 + \frac{x^2 - y^2}{R^2}\right], \tag{7.7}$$

kjer je R nek geometrijski faktor. Povprečevanje enačb gibanja po daljšem času pokaže, da je gibanje približno takšno, kot da bi imeli efektivni potencial, ki je privlačen v vseh smereh. Parametri so izbrani tako, da je past močnejša v prečnih smereh kot v vzdolžni, zato so ioni ujeti na osi z in zaradi medsebojnega Coulombskega odboja tvorijo enodimenzionalno verigo ionov. Če je ionov zelo veliko, se pojavijo tudi drugačni vzorci, denimo cik-cak. Ker je past v vzdolžni smeri relativno šibka, se veriga ionov kot celota obnaša kot harmonično nihalo s frekvenco ω_z. Temu gibanju rečemo tudi *fonon* in igra pomembno vlogo pri računanju z ujetimi ioni.

Ujete ione ohladimo do izjemno nizkih temperatur z *Dopplerjevim hlajenjem* z laserskimi žarki. Dopplerjev pojav pomeni, da ion, ki se giba proti viru svetlobe, občuti višjo frekvenco svetlobe, kot če bi miroval. S primerno izbiro frekvence laserja lahko zato dosežemo, da fotone absorbirajo le ioni, ki se gibljejo v nasprotni smeri kot laserski žarek. Ob absorpciji od fotona prejmejo gibalno količino in se upočasnijo. Na ta način lahko ione ohladimo le do neke spodnje meje, še niže pa pridemo z drugimi metodami, ki prav tako temeljijo na uporabi laserjev. Tako dosežemo, da je sistem po opravljenem postopku hlajenja v svojem osnovnem stanju.

Pri kvantnomehanskem opisu močno ohlajenih ionov moramo upoštevati tako spin elektronov S kot spin jedra I. Ta se skupaj seštejeta v celotni spin iona, ki ga označimo z F. Hkrati lahko dobro določimo celoten spin F in komponento vzdolž ene izmed smeri v prostoru, m_F. F je lahko celo ali polcelo število, m_F pa je vrednost med $-F$ in F s korakom 1. Na primer, če je $F = 2$, so možna stanja z $m_F = -2, -1, 0, 1, 2$. Ta stanja se imenujejo *hiperfina stanja*. Dve izmed možnih hiperfinih stanj se izbere za zapis kubita. Na primer, pri ionu $^9Be^+$ se lahko izbere $(F, m_F) = (2, 2)$ za $|0\rangle$ in $(F, m_F) = (1, 1)$ za $|1\rangle$. Ti stanji imata različni energiji, katerih razliko zapišemo kot $E_1 - E_0 = \hbar\omega_0$.

Dodatni kubit je fonon. Pri tem $|0\rangle$ ustreza osnovnemu stanju, $|1\rangle$ pa prvemu vzbujenemu stanju. Ti stanji sta ločeni za energijo $\hbar\omega_z$. Najbolj preprosti sistem z enim samim ionom torej ustreza kvantnemu računalniku z dvema kubitoma, kar je dovolj za demonstracijo izvajanja osnovnih kvantnih vrat. Stanja zapišemo kot tenzorski produkt $|ij\rangle = |i\rangle \otimes |j\rangle$, kjer prvo mesto ustreza stanju iona, drugo mesto pa stanju harmoničnega nihala.



Slika 7.4. Energijski diagram stanj ujetega iona v elektromagnetni pasti. Črtkano je označen prehod, ki ustreza izvajanju kvantnih vrat SWAP.

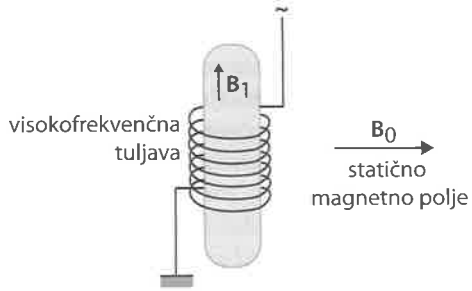
Kvantne račune izvajamo tako, da na stanjih opravljamo različne unitarne transformacije. Če vzpostavimo elektromagnetno valovanje s frekvenco ω_0, opravimo unitarno transformacijo nad stanjem iona. V praksi osnovno stanje iona rahlo razcepimo, valovanje pa vzpostavimo s parom laserskih žarkov z rahlo različnima frekvencama. Z izbiro trajanja pulza in faze med žarkoma lahko izvajamo poljubne rotacije stanja po Blochovi sferi.

S pulzi pri frekvenci $\omega_0 - \omega_z$ med seboj povežemo oba kubita in opravljamo dvokubitne operacije, denimo operacijo zamenjave, SWAP, $|01\rangle \rightarrow |10\rangle$ in obratno (slika 7.4). Ta mehanizem je zelo pomemben, saj v primeru večjega števila ionov v pasti interakcije med kubiti dosežemo ravno preko fonona. Fonon torej omogoča, da ostale kubite med seboj kvantno prepletemo.

Inicializacija sistema je vsaj načeloma zelo preprosta. S hlajenjem dosežemo osnovno stanje sistema, $|00\rangle$, kar zadostuje, saj lahko poljubno drugo stanje dobimo z unitarnimi transformacijami. Tudi odčitavanje ni težko. Uporabimo pojav *fluorescence*: to je povzročanje prehodov v neko vzbujeno stanje, ki se zlahka vrne v osnovno z izsevanjem fotona, kar povzroči močno sevanje. Z laserjem s primerno izbrano valovno dolžino dosežemo fluorescenco, katere jakost je sorazmerna z verjetnostjo, da je notranje stanje iona $(F, m_F) = (2, 2)$ oz. $|0\rangle$. Če želimo pomeriti kubit, spravljen v fononskem stanju, moramo pred tem izvesti operacijo SWAP. Fluorescenco zaznamo z občutljivim detektorjem: fotopomnoževalko ali kamero CCD. Prvi poskusi z ujetimi ioni okoli leta 1995 so potrdili uspešno delovanje osnovnih kvantnih vrat, kot je CNOT. Za to pionirsko delo je Wineland prejel Nobelovo nagrado leta 2012. Danes je možno koherentno upravljati z do 14 ioni, kar je že dovolj za izvajanje preprostih kvantnih algoritmov. Razmerje τ_D/τ_{OP} je zelo visoko. Pri večjem številu ionov pa se ti nekontrolirano premikajo in računanje ni več mogoče. Možna rešitev bi bila vzpostavitev povezav med več pastmi, nekakšne *kvantne mreže* iz kvantnih pomnilnikov in kvantnih komunikacijskih kanalov.

7.4 Magnetna resonanca

O jedrski magnetni resonanci (JMR) smo že govorili pri obravnavi dinamike spina v magnetnem polju (razdelek 3.21). Ker so jedrski spini šibko sklopljeni z okolico, imajo dolg dekoherenčni čas. Od tod izvira zamisel, da se kvantno informacijo zakodira kar v spinska stanja jeder neke molekule. Pristop je nenavaden, ker zaradi premajhne občutljivosti merilnih naprav ne opravljamo poizkusa na eni sami molekuli, temveč na veliki množini snovi, kljub temu pa lahko opravimo koherentne operacije na kvantnih stanjih.



Slika 7.5. Postavitev magnetnih polj v poskusih z jedrsko magnetno resonanco.

Obstaja določena podobnost s sistemi ujetih ionov. V obeh primerih je informacija shranjena v spinskih stanjih. V ionskih pasteh so spinska stanja sklopljena preko kvantiziranega gibanja v harmoničnem potencialu, v molekulah pa kot nosilci interakcije med jedri nastopajo elektroni. Za JMR so najbolj primerna jedra s spinom 1/2, denimo ^{1}H, ^{13}C, ^{15}N, ^{19}F in ^{31}P. Zanimive so torej molekule, ki imajo večje število jeder s tega seznama: število tovrstnih jeder je kar enako številu kubitov kvantnega računalnika. Običajno gre za tekočine. Natočimo jih v manjšo epruveto, to pa vstavimo v *spektrometer*, slika 7.5. Ker imajo jedra različne kemijske okolice, so ustrezne *resonančne (Larmorjeve) frekvence* različne, s čimer lahko naslavljamo različne kubite znotraj molekul. Ker nimamo prostorske ločljivosti, da bi lahko manipulirali s posameznimi atomi znotraj izbrane posamezne molekule, z izbiro frekvence dosežemo, da se odzove le točno določeno jedro vseh molekul.

Vzorec je izpostavljen močnemu magnetnemu polju, ki mora biti čim bolj homogeno, da se vse molekule obnašajo kar se da enako. Naprava omogoča vzpostaviti oscilirajoče elektromagnetno polje v prečnih smereh, s katerim pošiljamo pulze, ki vplivajo na spinska stanja molekul. Z izbiro frekvence izberemo kubit, ki ga naslavljamo, z izbiro dolžine pulza pa unitarno transformacijo, ki jo nad kubitom izvajamo. Na ta način lahko izvedemo poljubna enokubitna vrata. Za dvokubitna vrata pa izkoristimo naravno sklopitev med jedri znotraj molekule. To je sicer pomembna omejitev, saj struktura molekule igra vlogo fiksne strojne opreme in določa, kateri kubiti med seboj interagirajo, zaporedja pulzov pa igrajo vlogo programske opreme in so povsem poljubna.

Dodatna omejitev je težavnost vzpostavitve začetnega stanja. Jedrski spini so tako šibko sklopljeni z zunanjim svetom, da tudi v zelo močnem polju še zdaleč niso vsi poravnani v smeri magnetnega polja. Zelo težko je torej pripraviti stanje $|00\ldots0\rangle$. Prej nasprotno: le majhen presežek spinov se poravna v smeri polja. Obstajajo pa različni triki, ki omogočajo, da vseeno izluščimo signal iz natanko tistih molekul, ki so slučajno na začetku bile v stanju $|00\ldots0\rangle$. Cena za to je, da uporabni signal pada eksponentno s številom kubitov, zato metoda ni uporabna za velike molekule in zapletene kvantne algoritme. Odčitavanje stanja poteka preko meritve inducirane napetosti magnetnih momentov, ki precedirajo v konstantnem zunanjem magnetnem polju.

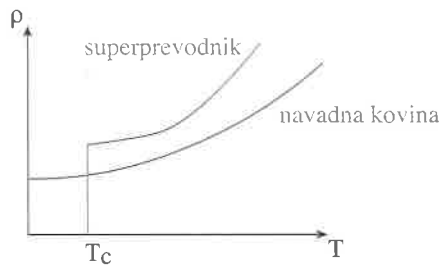
Uspeli so poskusi z do 12 kubiti. Uspešno so bili implementirani številni postopki, kot je kvantno teleportiranje, ustvarjanje prepletenih stanj, kvantno odpravljanje napak in simuliranje drugih kvantnih sistemov, ter kvantni algoritmi, kot je kvantno iskanje ter Shorov algoritem za faktorizacijo celih števil. Nekateri izmed teh postopkov so zahtevali več sto zaporednih operacij. Napredek je bil hiter, ker temelji na desetletjih razvoja tehnik za magnetno resonanco, žal pa ta pristop ne omogoča skaliranja do velikega števila kubitov.

7.5 SQUID

SQUID je kratica za angl. izraz **s**uperconducting **qu**antum **i**nterference **d**evice, torej superprevodna kvantna interferenčna naprava. SQUID služi kot izjemno občutljiv senzor za magnetna polja, ki zazna celo drobna polja v živih organizmih. Uporablja pa se tudi v kvantnem računalništvu.

7.5.1 Superprevodnost

Superprevodnost je leta 1911 odkril K. Onnes pri meritvi prevodnosti živega srebra: pod neko temperaturo (*kritično temperaturo*) upornost nenadoma pade na nič in snov postane idealen prevodnik, slika 7.6. Pozneje so odkrili še drugo ključno lastnost: superprevodnik iz svoje notranjosti izrine magnetno polje, tako da vzpostavi ustrezne površinske tokove (Meissnerjev pojav).



Slika 7.6. Temperaturna odvisnost upornosti pri navadni kovini in pri superprevodniku. T_c označuje kritično temperaturo.

Superprevodni so nekateri elementi: svinec Pb, živo srebro Hg in niobij Nb. Imajo kritične temperature pod 10 K. Malo višje imajo zlitine, denimo NbTi, Nb_3Sn, Nb_3Ge, MgB_2; prva se uporabljata za izdelavo superprevodnih tuljav. Superprevodnost je bila odkrita tudi v nekaterih eksotičnih materialih, ki vsebujejo lantanide in aktinide, ter v nekaterih organskih spojinah, vendar imajo nizke kritične temperature. Prelomno odkritje so bili *visokotemperaturni superprevodniki*, ki spadajo v družino *kupratov*, to je materialov, v katerih obstajajo plasti iz atomov bakra in kisika. Odkrila sta jih Bednorz in Müller leta 1986 (Nobelova nagrada je sledila že leto kasneje). Najbolj znan superprevodnik iz te skupine je YBCO (itrij barij bakrov oksid) s kritično temperaturo 93 K, kar je nad vreliščem tekočega dušika pri 77 K. Najvišja poznana kritična temperatura je 135 K, pri materialih pod visokim pritiskom pa je lahko še nekaj višja. Leta 2006 je bila odkrita nova družina superprevodnikov, ki temeljijo na železu, s kritičnimi temperaturami nekaj deset kelvinov.

Obstajajo različne teorije, ki opisujejo pojav superprevodnosti: fenomenološke teorije, v katerih z nekaj parametri opišemo ključne lastnosti materialov, ter mikroskopske teorije, ki opisujejo osnovne razloge za nastanek superprevodnosti. V prvo skupino sodi Ginzburg-Landauova teorija, v kateri je stanje sistema opisano z *makroskopsko valovno funkcijo* $\Psi(x)$. Superprevodnost lahko namreč razumemo kot stanje, v katerem obstaja kvantna koherenca na makroskopskih razdaljah. Za nadaljnjo obravnavo je pomembno predvsem to, da ima takšno stanje $\Psi = |\Psi|e^{i\phi}$ dobro določeno kvantno fazo ϕ. V drugo skupino teorij pa sodi teorija BCS, imenovana po Bardeenu, Cooperju in Schriefferju, ki so pokazali, da se elektroni privljačijo in tvorijo vezana stanja, ki se obnašajo kot bozonski delci, t.i. *Cooperjevi pari*. Grobo povedano, superprevodnost nastane, ker se Cooperjevi pari gibajo skozi material brez izgube energije.

7.5.2 Josephsonov pojav

Če preko šibkega stika (tanke izolatorske plasti) spojimo dva superprevodnika, lahko med njima teče električni tok tudi v odsotnosti razlike v napetosti, ker skozi stik prehajajo Cooperjevi pari. Takšnemu toku rečemo *supertok*, pojavu pa *Josephsonov pojav*.

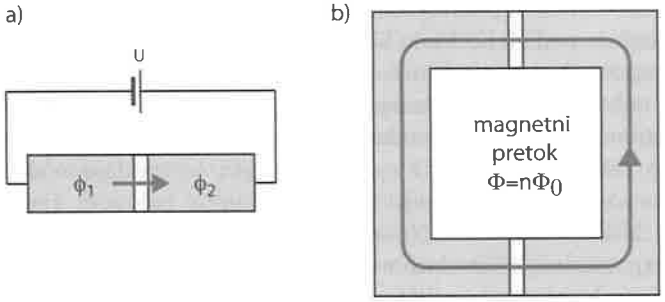
Omenili smo, da lahko superprevodnik opišemo z makroskopsko valovno funkcijo $\Psi = |\Psi|e^{i\phi}$. Superprevodnika na obeh straneh stika imata lahko različni fazi, ϕ_1 in ϕ_2, glej sliko 7.7(a). Josephson je pokazal, da je supertok povezan z razliko faz $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$:

$$I = I_c \sin[\Delta\phi]. \tag{7.8}$$

Količina I_c se imenuje *kritični tok* in je lastnost spoja. Časovna odvisnost razlike faz med superprevodnikoma je določena z enačbo

$$U(t) = \frac{\hbar}{2e}\frac{\mathrm{d}\Delta\phi(t)}{\mathrm{d}t}. \tag{7.9}$$

$U(t)$ je razlika napetosti med superprevodnikoma ob času t. Če je napetost ves čas enaka nič, se razlika faz $\Delta\phi$ s časom ne spreminja. Tudi pri $U = 0$ lahko torej teče tok, če le ni $\Delta\phi = 0$ ali $\Delta\phi = \pi$.



Slika 7.7. a) Josephsonov spoj (belo) med superprevodnikoma (senčeno) s fazama ϕ_1 in ϕ_2. Med njima teče supertok (puščica). b) SQUID.

7.5.3 SQUID in kubit na osnovi fluksa

SQUID je majhen obroček iz superprevodnega materiala mikronske velikosti z dvema Josephsonovima spojema, slika 7.7b. Izdelamo jih lahko z dobro razvitimi tehnologijami ter jih integriramo v zapletena vezja. Če vzpostavimo majhno magnetno polje pravokotno na ravnino SQUIDa, potem steče superprevodni tok, ki izniči polje, tako da je magnetni pretok skozi obroček enak nič:

$$\Phi = \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = 0. \tag{7.10}$$

Če povečujemo polje, v nekem trenutku magnetni pretok skoči na vrednost

$$\Phi = \frac{h}{2e}. \tag{7.11}$$

Količina $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$ se imenuje tudi *kvant fluksa* ali *flukson*. Izkaže se, da je to splošen pojav: magnetni pretok skozi območje, ki ga omejuje superprevodnik, je vedno celo število kvantov fluksa: $\Phi = n\Phi_0$. Najbolj zanimivo je ravno polje na meji med $\Phi = 0$ in $\Phi = \Phi_0$. Ko je polje malo manjše od mejne vrednosti, supertok kompenzira polje in dobimo pretok nič. Ko pa je polje malo večje od mejne vrednosti, supertok teče ravno v nasprotni smeri in ojača polje, zato dobimo pretok natanko enega kvanta. Ti tokovi se nikoli ne ustavijo, zato jih imenujemo tudi *persistenčni tokovi* (ker nikoli ne »odnehajo«). Ko je polje točno na meji, lahko supertok teče ali v eno ali v drugo smer, ker pa gre za kvantni sistem, so možne tudi poljubne superpozicije kvantnih stanj. To omogoča zapis enega kubita v vsak obroček SQUID. Računske operacije se opravlja s spreminjanjem magnetnega polja ter obsevanjem z mikrovalovi, ki povzročijo prehode med različnimi superpozicijami persistenčnih tokov. Odčitavanje je možno z dodatnimi obročki SQUID. Takšne kubite uporablja podjetje DWave za izdelavo svojih naprav za optimizacijo s kvantnim popuščanjem.

7.6 Kvantne pike

Obstajajo različni predlogi za uporabo »umetnih atomov« (polprevodniških kvantnih pik, glej razdelek 14.3) za kvantno računanje. Primer je spinski kubit iz majhne kvantne pike, v katero je ujet en elektron. Vsaka takšna pika se obnaša kot objekt s spinom 1/2. Stanje lahko pripravimo z močnim magnetnim poljem, s katerim določimo smer magnetizacije. Enokubitna vrata izvajamo s pulzi lokalnega magnetnega polja, možno pa je tudi optično naslavljanje posameznih kvantnih pik. Za izvedbo dvokubitnih kvantnih vrat lahko sosednji kvantni piki sklopimo preko spoja; to lahko naredimo na časovno odvisen način, tako da za kratek čas spremenimo napetost na ustrezni elektrodi na površini vzorca. Pokazati se da, da lahko takšno sklopitev opišemo kot

$$H(t) = J(t)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{J(t)}{4}\left(X_1X_2 + Y_1Y_2 + Z_1Z_2\right), \tag{7.12}$$

kjer so X_i, Y_i in Z_i Paulijeve matrike, s katerim opišemo spinsko stanje i-te kvantne pike, $J(t)$ pa je časovno odvisna jakost sklopitve med parom pik. V fiziki se tej sklopitvi reče *Heisenbergova interakcija*. Z ustrezno dolgim pulzom lahko, denimo, izvedemo operacijo

$$U = \exp(-i\pi\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2), \tag{7.13}$$

ki je enaka učinku vrat SWAP,

$$\text{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{7.14}$$

Prednost kvantnih pik je v tem, da je ta pristop načeloma zelo skalabilen, saj lahko z obstoječimi postopki za obdelavo polprevodnikov naredimo naprave z velikim številom kvantnih pik. Obstaja pa velik problem z dekoherenco zaradi sklopitve med spinom elektrona v kvantni piki ter jeder jedrskim spinom atomov, iz katerega je izdelana pika.

7.7 Drugi predlogi

Uporabni bi bili ioni redkih zemelj (lantanidov), vgrajeni kot razpršeni dopanti v sicer čist gostiteljski kristal. Redke zemlje imajo elektronske nivoje, katerih valovne funkcije so blizu jedra in se le malo prekrivajo z valovnimi funkcijami sosednjih atomov, zato je elektron v takšnih orbitalah dobro zaščiten pred okolico (dekoherenčni časi tudi do 30 sekund). Pristop je podoben tistemu z ioni v elektromagnetnih pasteh, le da so ioni tu vgrajeni v trden medij.

Možno je tudi optično računanje z linearno optiko, kjer je kubit zakodiran kot polarizacija fotona ali kot njegova pot. Fotoni potujejo skozi zaporedje optičnih elementov, ki predstavljajo izvajanje kvantnega algoritma. Največja težava je doseči sklopitev med fotoni, saj ti zelo šibko interagirajo med seboj. Razvoj je tu usmerjen

v izdelavo visokoučinkovitih izvorov in detektorjev posameznih fotonov. Dekoherence v pravem pomenu besede tu ni, se pa lahko fotoni izgubijo (absorbirajo), kar vodi k podobnim posledicam.

Najnovejši predlogi se nanašajo na nanomateriale na osnovi ogljika (fuleren, nanocevke in grafen), ter na uporabo eksotičnih kvantnih stanj, ter Majoranovih fermionov in robnih stanj v sistemih s kvantnim Hallovim pojavom. O vsem tem bo več govora v nadaljevanju.

8

Elektronska mikroskopija

Optični mikroskopi imajo zaradi uklona ločljivost omejeno z valovno dolžino svetlobe (Abbe, 1873):

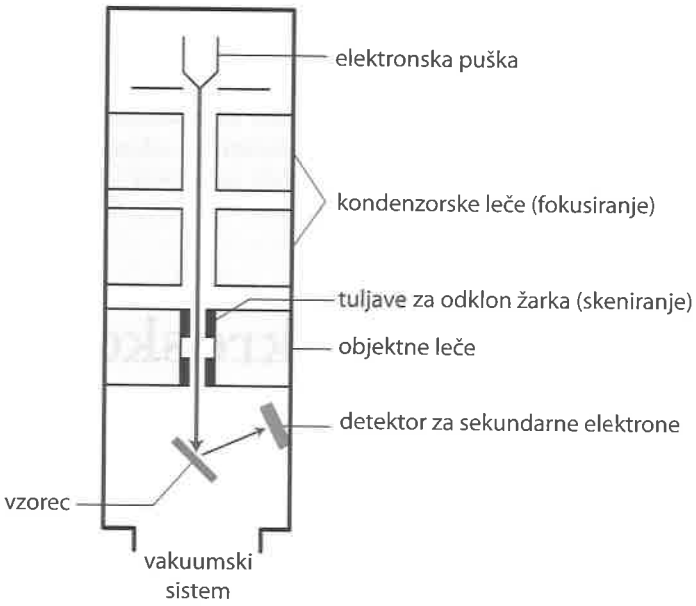
$$d = \frac{\lambda}{2n \sin\theta}, \tag{8.1}$$

kjer je d razdalja med točkama, ki ju še lahko razločimo, n je lomni količnik snovi, skozi katero se širi svetloba, θ pa polovični kot stožca svetlobe, ki gre skozi lečo. Zmnožek $n \sin\theta$ se imenuje numerična apertura in v sodobnih optičnih mikroskopih znaša okoli 1,4. V najboljšem primeru je ločljivost torej kakšnih 200 nm, oziroma povečava približno tisočkratna, saj s prostim očesom razločimo predmete velikosti nad 100 μm. Da bi razločili posamezne atome, bi potrebovali dodatni faktor 1000 povečave.

Na elektronih temelji vrsta sodobnih mikroskopskih tehnik z visoko ločljivostjo: vrstični elektronski mikroskop (SEM, scanning electron microscope) in presevni elektronski mikroskop (TEM, transmission electron microscope), ki uporabljata elektronski snop za slikanje, ter vrstični tunelski mikroskop (STM, scanning tunneling microscope), ki temelji na kvantnomehanskem tuneliranju elektronov skozi potencialno pregrado.

8.1 Vrstični elektronski mikroskop (SEM)

Pri SEM površino vzorca slikamo z uporabo izostrenega elektronskega snopa. Elektroni izvirajo iz elektronske puške. Za doseganje visoke ločljivosti so najbolj primerni izviri, kjer elektroni izhajajo iz čim manjšega območja, v idealnem primeru kar iz točke. Elektronska optika skrbi za fokusiranje curka in za njegovo usmerjanje v izbrano točko. Snop prečesuje površino vrstico za vrstico, od koder tudi ime metode (vrstičenje oz. skeniranje). Vpadni elektroni imajo relativno visoko energijo (do nekaj 10 keV), zato močno interagirajo s snovjo v območju, ki ima približno obliko kapljice (*interakcijsko območje*). Glede na to, katere izhodne delce zaznavamo, lahko sliko



Slika 8.1. Shema vrstičnega elektronskega mikroskopa (SEM).

ustvarjamo na različne načine. Dobimo lahko podatke o topografiji (višini površine v odvisnosti od lateralnega položaja, torej določanje »zemljevida« površine), pa tudi o kemijski sestavi.

Sekundarni elektroni so nizkoenergijski elektroni, ki nastanejo ob ionizaciji snovi zaradi vpadnega snopa visokoenergijskih elektronov. Imajo relativno kratko povprečno pot v snovi, zato prihaja signal samo iz površine. To je temelj za površinsko občutljivost slikanja. Slike so črno bele, saj izrisujemo intenziteto zaznanih sekundarnih elektronov v odvisnosti od mesta na površini. Odlika SEM je izjemna globinska ostrina, zato ni težav z razumevanjem slik, ker te dajejo vtis tridimenzionalnosti.

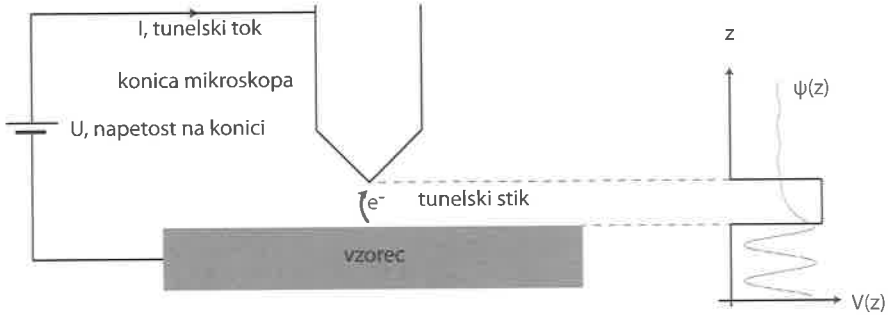
S sodobnimi vrstičnimi mikroskopi dosežemo ločljivost pod 1 nm (celo okoli 0,4 nm). Ločljivost navzdol ni omejena z valovno dolžino elektronov, temveč z velikostjo pike snopa na površini vzorca. Z istim mikroskopom je možno preklapljati od nizke povečave (nekaj 10×) do zelo visoke (500 000×). Najvišje povečave so torej nekaj stokrat večje kot pri optičnih mikroskopih.

Pri interakciji med visokoenergijskimi elektroni in snovjo nastajajo tudi *karakteristični rentgenski žarki.* Visokoenergijski vpadni elektroni namreč izbijajo močno vezane elektrone iz notranjih lupin atomov, atomi pa se potem vračajo v osnovno energijsko stanje tako, da elektroni iz zunanjih lupin zapolnjujejo prazne nivoje v notranjih, razliko energij pa atom odda v obliki fotona, ki ga zaznamo. Ker so energije lupin različne za različne vrste atomov, dobimo podatek o kemijski sestavi površine. (Več o atomih in elektronskih lupinah sledi v naslednjem poglavju.)

8.2 Transmisijski elektronski mikroskop (TEM)

Pri TEM tanek vzorec preiskujemo s snopom elektronov, ki prodrejo skozi vzorec in se pri tem sipajo. V tem je TEM podoben optični mikroskopiji, le da za slikanje namesto svetlobe uporablja elektrone, ki se po de Broglieju obnašajo kot valovanje. Interpretacija slik je zapletena, saj vsebujejo kompleksno informacijo o interakciji elektronskega valovanja s snovjo. Pri manjših povečavah in nižjih pospeševalnih napetostih lahko v prvem približku sliko razumemo kot *absorbcijsko sliko*: del elektronov se ob prehodu sipa oz. absorbira. Informacija je tedaj vsebovana v amplitudi valovne funkcije elektronov, ki padajo na detektor. Pri visokih pospeševalnih napetostih in zelo tankih vzorcih pa je informacija vsebovana v fazi valovne funkcije in potrebna je bolj natančna analiza. S TEM lahko dosežemo »atomsko ločljivost«, vendar je tu potrebno ta izraz pravilno razumeti, saj ne vidimo posameznih atomov, temveč posamezne kolone atomov. Pri sodobnih visokoločljivostnih TEM z odpravljanjem aberacij je »ločljivost« okoli 50 pm.

8.3 Vrstični tunelski mikroskop (STM)



Slika 8.2. Shema vrstičnega tunelskega mikroskopa (STM).

Vrstični tunelski mikroskop je relativno novo orodje (iznašla sta ga leta 1982 Rohrer in Binnig, Nobelova nagrada 1986), ki se je hitro uveljavilo kot izjemno močna in vsestransko uporabna analitična naprava. Omogoča slikanje z atomsko ločljivostjo, določanje elektronskih in magnetnih lastnosti površin in celo manipuliranje s posameznimi atomi in molekulami.

Osrednji del mikroskopa je izjemno ostra kovinska konica, pritrjena na cevko iz piezoelektrične keramike, ki jo lahko z električnimi napetostmi premikamo v vseh treh prostorskih smereh. Konico približamo površini na kakšno desetinko nanometra in med njima vzpostavimo razliko napetosti, tako da steče majhen *tunelski tok.* Pri tipičnih napetostih nekaj desetink volta je tunelski tok velikostnega reda 1 nA ali pa še manjši. Jakost toka je eksponentno odvisna od debeline vakuumske plasti, zato je instrument zelo občutljiv na spremembe višine. Če konico premikamo v prečni smeri,

bo tunelski tok moduliran s spremembami višine površine. V praksi slikanje izvajamo nekoliko drugače: tunelski tok ohranjamo konstanten z uporabo *povratne zanke* in v ta namen prilagajamo višino z konice nad površino, kar dosežemo s krčenjem in raztezanjem piezoelektrične cevke. Slikanje izvajamo z vrstičenjem. S kvalitetno konico in primerno čisto površino zlahka dosežemo atomsko ločljivost.

Na področju nanotehnologije se zlasti uporablja vrstične mikroskope v ultravisoko vakuumskih sistemih (tlak pod 10×10^{-8} Pa, povprečna prosta pot preostalih molekul plina je večja od velikosti vakuumskih posod) in pri zelo nizkih temperaturah (okoli 4 K za instrumente, ki uporabljajo kopel s tekočim helijem, ali celo pod 100 mK za instrumente z dilucijskim hladilnikom; rekord je 10 mK). V teh razmerah ostanejo površine izjemno čiste, saj se na njih ne adsorbirajo neželene molekule iz atmosfere, poleg tega pa je pri nizkih temperaturah manj mehanskih ter električnih šumov in zamre difuzija na površini. Takšni »mirni« pogoji so zelo primerni za poskuse s posameznimi atomi in molekulami. Vidimo lahko celo notranjo strukturo enostavnih molekul in kemične vezi.

Z STM je možno opravljati *tunelsko spektroskopijo*, ki nam veliko pove o električnih lastnostih vzorca. Ločimo lahko, ali je kovinski ali polprevoden. Merimo lahko tudi magnetne lastnosti površin ali adsorbiranih magnetnih molekul. V ta namen se uporablja magnetne spinsko občutljive konice, pri katerih je transmisivnost odvisna od spina elektronov.

S konico STM lahko tudi izdelamo nanostrukture iz posameznih atomov. S konico lahko porivamo ali za seboj vlečemo atome, lahko pa jih celo dvignemo s površine na konico in prenesemo na drugo mesto. Na ta način so, denimo, sestavili znameniti napis IBM iz posameznih atomov in *kvantne ograde*, v katere se ujamejo površinski elektroni in tvorijo interferenčne vzorce (stoječa valovanja). Uspele so tudi kemijske reakcije s posameznimi molekulami.

9

Elektroni v snovi

Električne, magnetne, optične, mehanske in kemične lastnosti snovi so odvisne od obnašanja elektronov v njihovi notranjosti. Obravnavo bomo začeli s preprostimi sistemi, atomi in molekulami, končali pa s kristali.

9.1 Bohrov model atoma

Sodobni koncept atoma se je hitro razvil po Rutherfordovem dognanju, da je pozitivni naboj zgoščen v skoraj kot točka majhnem *jedru*. *Bohrov model* iz leta 1913 opisuje atom kot nekakšen planetarni sistem: v središču miruje težko pozitivno nabito jedro, okoli njega pa krožijo lahki negativno nabiti elektroni. Vlogo gravitacijske sile prevzame Coulombska privlačna sila

$$F = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \tag{9.1}$$

kjer je $q_1 = Ze_0$ naboj jedra z Z protoni, $q_2 = -e_0$ pa naboj elektrona. Bohrov model je nastal v času *stare kvantne teorije*, torej pred razvojem sodobne kvantne mehanike, in temelji na opisu gibanja s trajektorijami; rečemo, da gre za *semiklasičen model*. Kljub njegovim pomanjkljivostim ga je vredno obravnavati, saj je preprost in pravilno opisuje nekatere pojave.

Polna energija elektrona v atomu vodika ($Z = 1$, jedro iz enega samega protona) je

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \tag{9.2}$$

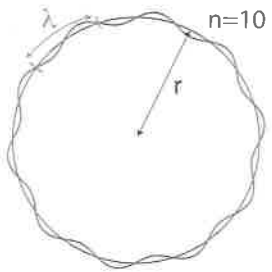
kjer je m masa elektrona, r polmer krožne trajektorije, v pa hitrost kroženja. Po Newtonovi enačbi je radialni pospešek enak sili na elektron:

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}. \tag{9.3}$$

Ker se elektron obnaša kot valovanje, mora biti obseg krožne trajektorije enak celemu številu n de Brogliejevih valovnih dolžin $\lambda = h/p$, glej sliko 9.1, sicer rešitev zaradi desktruktivne interference ne obstaja. Dobimo dodatno enačbo:

$$2\pi r = n\lambda = n\frac{h}{mv}. \tag{9.4}$$

Ta dodatni *kvantizacijski pogoj* je ključna novost. Bohr ga je v teorijo vključil iz empiričnih razlogov, da je dobil ujemanje rezultatov z eksperimentom. Bohrov model je namreč nastal desetletje pred de Brogliejevo hipotezo, iz katere sledi enačba (9.4).



Slika 9.1. »Valovna funkcija« za $n = 10$ v Bohrovem modelu.

Različne krožne orbite torej oštevilčimo s *kvantnim številom* n. Iz enačbe (9.4) izrazimo r in ga vstavimo v (9.3). Dobimo

$$v = \frac{1}{n}\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}. \tag{9.5}$$

Iz enačbe (9.4) nato izrazimo r:

$$r = n^2\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e_0^2 m}. \tag{9.6}$$

r in v vstavimo v enačbo (9.2) in dobimo še

$$E = -\frac{1}{n^2}\frac{e_0^4 m}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2}. \tag{9.7}$$

Rezultata za energijo in polmer krožne orbite končno zapišemo v obliki

$$E_n = -\frac{1}{n^2}E_I, \quad r_n = n^2 a_0. \tag{9.8}$$

E_I je *ionizacijska energija* vodika (energija, ki jo moramo dovesti atomu vodika, da iz njega izbijemo elektron v osnovnem stanju),

$$E_I = \frac{me_0^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} = 13{,}6\,\mathrm{eV}, \tag{9.9}$$

ki jo včasih imenujeno tudi Rydberg, $1\,\mathrm{Ry} = 13{,}6\,\mathrm{eV}$. a_0 je *Bohrov polmer*, ki je značilna razdalja v atomski fiziki:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me_0^2} = 0{,}052\,\mathrm{nm}. \tag{9.10}$$

Izmerjena ionizacijska energija vodika je enaka rezultatu iz Bohrovega modela, kar je velik uspeh te teorije.

Energija izsevanih ali absorbiranih fotonov je podana z razliko lastnih energij atoma. Dovoljeni so prehodi elektrona med poljubnima stanjema n in n'. Dobimo

$$h\nu = E_{n'} - E_n = E_I\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right). \tag{9.11}$$

Spektralne črte vodika uredimo v serije glede na stanje n: Lymanova ($n = 1$), Balmerjeva ($n = 2$), Paschenova ($n = 3$). Lymanova serija je predvsem v ultravijoličnem delu svetlobnega spektra, Balmerjeva v vidnem, Paschenova pa v infrardečem. V sončnem spektru so pomerili okoli 40 črt Balmerjeve serije. Ujemanje s preprosto Bohrovo teorijo je odlično.

9.2 Atomske orbitale

Oglejmo si sedaj atom vodika v okviru sodobne kvantne mehanike. Rešiti moramo stacionarno Schrödingerjevo enačbo za elektron v Coulombskem potencialu jedra, ki miruje v izhodišču koordinatnega sistema,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \tag{9.12}$$

in določiti vezana stanja. Enačba je krogelno simetrična, saj potencial ni odvisen od kotov, temveč zgolj od razdalje iz izhodišča r. Nalogo zato rešujemo z uporabo *krogelnega koordinatnega sistema*, kjer položaj elektrona opišemo z *radialno razdaljo* r, *azimutom* ϕ in *polarnim kotom* θ. Izkaže se, da lahko uporabimo nastavek

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi). \tag{9.13}$$

Prvi faktor se imenuje *radialni del* in opisuje odvisnost od razdalje od jedra, drugi faktor pa je *krogelna funkcija*, ki opisuje kotno odvisnost. n je *glavno kvantno število*, l *tirno* (ali *obhodno*) *kvantno število*, m pa *magnetno kvantno število*. Njihov pomen bomo razložili v nadaljevanju.

Radialni del $R_{n,l}$ je zmnožek eksponentno pojemajočega člena in polinoma z $n - l - 1$ koreni. Pri večjih n funkcija doseže maksimum pri večji razdalji r. Lastne energije za atom vodika so, zanimivo, enake kot v Bohrovem modelu in so odvisne zgolj od n:

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}. \tag{9.14}$$

V limiti $n \to \infty$ je polna energija enaka nič. To pomeni, da elektron ni več vezan na jedro. Pozitivne energije torej ustrezajo kontinuumu stanj ioniziranega atoma, negativne pa diskretnemu delu spektra, torej vezanim stanjem.

Krogelne funkcije so lastne funkcije operatorja $\mathbf{l}^2$, pri čemer je operator vrtilne količine $\mathbf{l}$ definiran kot

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \tag{9.15}$$

kjer je $\mathbf{p}$ operator gibalne količine. Komponente vrtilne količine med seboj ne komutirajo:

$$[l_x, l_y] = i\hbar l_z, \tag{9.16}$$

podobno kot pri spinu. Velja pa $[\mathbf{l}^2, l_z] = 0$, torej lahko hkrati pomerimo $\mathbf{l}^2$ in l_z, zato je vrtilna količina povsem opredeljena s kvadratom velikosti in eno komponento. Velja

$$\mathbf{l}^2 Y_{l,m} = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}, \quad l_z Y_{l,m} = \hbar m Y_{l,m}. \tag{9.17}$$

Vidimo torej, da tirno kvantno število l določa velikost vrtilne količine elektrona, magnetno kvantno število m pa njeno komponento vzdolž osi z. l je celo število, pri danem l pa teče m od $-l$ do l s korakom 1.

Kvantni števili l in n sta povezani: pri danem glavnem kvantnem številu n ima obhodno kvantno število l lahko vrednosti $l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$. Ker je energija atoma vodika določena le z vrednostjo n, so stanja močno degenerirana. Celotno število stanj pri danem n dobimo kot vsoto

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{n\,[1 + 2(n-1) + 1]}{2} = n^2, \tag{9.18}$$

saj pri vsakem l število m zavzame $(2l+1)$ različnih vrednosti. Če upoštevamo še, da ima elektron spin, je različnih stanj v resnici $2n^2$. Spin označimo s *spinskim kvantnim številom* m_s, ki ima lahko vrednosti $\pm 1/2$.

Ni naključje, da obstajajo tri kvantna števila povezana s položajem elektrona. To je enako številu krajevnih prostostnih stopenj elektrona (x, y in z). Ugotovitev je zelo splošna: za vsako prostostno stopnjo moramo uvesti po eno kvantno število. V atomu vodika so torej tri (n, l, m) povezana s tirnim gibanjem elektrona v prostoru (koordinate x, y, z), eno (m_s) pa z notranjo vrtilno količino elektrona.

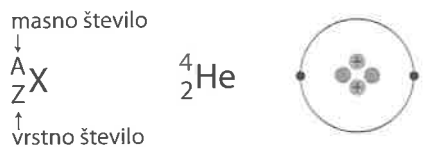
Verjetnostna gostota $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 = R_{nl}^2(r)|Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2$ se razteza v prostoru in ni podobna Bohrovim krožnim trajektorijam. Čeprav shematsko pogosto rišemo elektrone na krožnih tirih okoli jedra, je ta slika v bistvu zgrešena. Gostota je bolj podobna nekakšnemu *elektronskemu oblaku* oziroma *ovojnici*, ki obdaja jedro in je sestavljena iz *lupin*, skupin nivojev z istim n. Lupina je sestavljena iz več *podlupin* (skupin nivojev z istim n in l). Za atomske orbitale se po dogovoru uporablja *spektroskopske oznake*. Glede na glavno kvantno število velja: $n = 1$ je lupina K, $n = 2$ je L, $n = 3$ je M in tako dalje. Glede na obhodno kvantno število ustrezno podlupino $l = 0$ označimo z s, podlupino $l = 1$ z p, podlupino $l = 2$ z d in podlupino $l = 3$ z f. To je prikazano tudi v tabeli 9.1.

n	oznaka	l	oznaka
1	K	0	s
2	L	1	p
3	M	2	d
4	N	3	f

Tabela 9.1. Spektroskopske oznake za atomske orbitale. Izvor imen je zgodovinski (s=sharp, p=principal, d=diffuse).

9.3 Periodni sistem

Atomi različnih elementov se ločijo po številu protonov v jedru in elektronov v ovojnici (*vrstno atomsko število* Z), glej sliko 9.2. Schrödingerjeva enačba za več kot en elektron ni točno rešljiva, vendar lahko uporabimo spoznanja iz prejšnjega razdelka, predvsem koncept podlupin. Vsak elektron obravnavamo neodvisno od preostalih in predpostavimo, da se giblje v potencialu jedra in povprečnem potencialu vseh ostalih elektronov, kar imenujemo *približek povprečnega polja*. Rešitve takšnega efektivnega modela so *enoelektronska stanja*, ki jih lahko ponovno oštevilčimo s kvantnimi števili n, l, m in m_s. Energije so sedaj odvisne ne le od n, temveč tudi od l, torej vsaki podlupini pripada drugačna energija, še vedno pa obstaja degeneracija po m in m_s: v vsaki podlupini je $2(2l+1)$ stanj z isto energijo.



Slika 9.2. Zapis simbola kemijskega elementa z masnim in vrstnim številom ter primer atoma helija.

V približku povprečnega polja je stanje atoma povsem določeno, če navedemo, katera enoelektronska stanja so zasedena. Podlupine zapolnjujemo začenši z najnižjimi energijami in upoštevamo Paulijevo izključitveno načelo: v vsakem kvantnem stanju se lahko nahaja kvečjemu en fermion. Drugače povedano: dva elektrona sta vedno v stanjih, ki se razlikujeta v vrednosti vsaj enega izmed kvantnih števil n, l, m in m_s. V večini atomov si podlupine po energijah sledijo v zaporedju iz tabele 9.2.

V osnovnem stanju atoma vodika je elektron v stanju 1s (to pomeni $n = 1$, $l = 0$). Zapišemo, da ima H elektronsko *konfiguracijo* $1s^1$. Vrednost v eksponentu (tu 1) pomeni število elektronov v dani podlupini. V atomu helija sta dva elektrona, ki se morata razlikovati v spinskem kvantnem številu: eden ima $m_s = -1/2$, drugi pa $m_s = 1/2$. Zapišemo torej, da je He v konfiguraciji $1s^2$. S tem je podlupina 1s zapolnjena.

perioda	podlupina	degeneracija
	5p	6
5	4d	10
	5s	2
	4p	6
4	3d	10
	4s	2
	3p	6
3		
	3s	2
	2p	6
2		
	2s	2
1	1s	2

Tabela 9.2. Zaporedje polnjenja atomskih podlupin.

Litij ima v primerjavi s helijem en dodaten elektron. Podlupina 1s je z dvema elektronoma povsem zapolnjena, zato začnemo polniti 2s. Torej Li: $1s^2 2s^1$. Sledi še Be: $1s^2 2s^2$. S tem je zapolnjena podlupina 2s in začnemo polniti podlupino 2p: B: $1s^2 2s^2 2p^1$, C: $1s^2 2s^2 2p^2$, N: $1s^2 2s^2 2p^3$, O: $1s^2 2s^2 2p^4$, F: $1s^2 2s^2 2p^5$, Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$. S tem je zapolnjena podlupina 2p. Podlupini 2s in 2p imata podobno energijo, zato navedene elemente združimo v drugo vrstico (*periodo*) periodnega sistema. Potem sledijo v tretji periodi Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, Mg: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$, Al: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$, itd.

Za kemijske lastnosti elementa so pomembni predvsem elektroni v *zunanji* (*valenčni*) podlupini, ker imajo najmanjšo vezavno energijo in lahko sodelujejo pri tvorbi kemijskih vezi. Elektroni v notranjih podlupinah pa so močno vezani, tvorijo *sredico*, in so kemijsko zelo inertni.

Podlupine z enakim l, a različnim n, imajo določene skupne lastnosti, ker imajo podobno konfiguracijo valenčnih elektronov. Sorodni elementi z analogno zunanjo podlupino tvorijo *skupine elementov*. To je razlog, da se lastnosti elementov z naraščajočim vrstnim številom spreminjajo približno periodično in da jih lahko razvrstimo v *periodni sistem elementov*, kot je leta 1870 predlagal Mendeleev. Skupine tvorijo stolpce periodnega sistema.

Nekatere skupine elementov nosijo posebna imena. Elementi z zasedenimi skupinami podlupin z vrstnimi števili 2, 10, 18, 36 so *žlahtni plini*: helij, neon, argon, kripton. So kemijsko skoraj povsem inertni in imajo visoke ionizacijske energije. Elementi, ki imajo en elektron v novi skupini podlupin, se imenujejo *alkalijske kovine*: litij, natrij, kalij, rubidij. So kemijsko zelo reaktivne in imajo nizke ionizacijske energije: zlahka oddajo svoj valenčni elektron. Elementi, ki jim manjka en elektron do zasedene lupine, pa so *halogeni elementi*: fluor, klor, brom, jod. Tudi ti elementi so zelo reaktivni, saj zlahka pritegnejo dodatni elektron. Čudovit pregled periodnega sistema (`http://www.periodictable.com/`) je pripravil Theodore Gray, eden izmed soustvarjalcev Wolframove Mathematice in avtor knjige *Mad Science: Experiments You Can Do At Home – But Probably Shouldn't.*

9.4 Kemijske vezi

Molekule so stabilne gruče atomov, ki jih spajajo *kemijske vezi*. O molekuli je smiselno govoriti le v primeru zadostne vezavne energije, sicer »molekula« takoj po nastanku že razpade. Kemijske vezi skupaj držijo tudi atome v večjih tvorbah, kot so *skupki* (gruče enakih atomov nekako od 3 do nekaj 10^6 ali 10^7 atomov) in *kristali*. Ogledali si bomo dva najpomembnejša primera kemijskih vezi, ionsko in kovalentno vez, ki sta najmočnejši.

9.4.1 Ionska vez

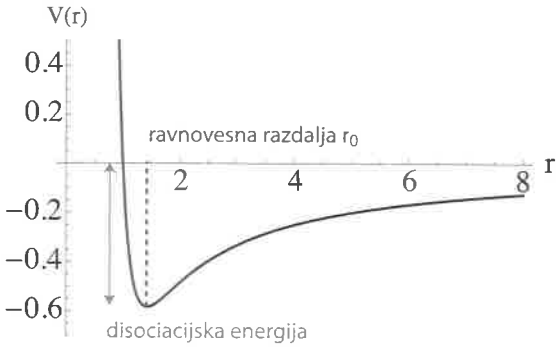
Ionska vez nastane zaradi Coulombskega privlaka med nasprotno nabitima ionoma. Tipičen primer so tvorbe iz pozitivno nabitega iona alkalijske kovine (*kationa*) in negativno nabitega iona halogenega elementa (*aniona*), kot v primeru NaCl (natrijev klorid oziroma kuhinjska sol). Atomi alkalijskih kovin imajo en šibko vezan zunanji elektron, torej nizko *ionizacijsko energijo* E_i. Atomom halogenih elementov manjka en elektron v podlupini p do zapolnjene skupine podlupin. Halogeni elementi imajo zato veliko *elektronsko afiniteto* E_a, ki meri, koliko energije je treba dovesti negativno nabitemu ionu, da mu iztrgamo elektron. Če je ta energija pozitivna, je ion stabilen. Če atomu alkalijske kovine iztrgamo elektron in ga obesimo na atom halogenega elementa, je energijska bilanca $E_i - E_a$. Ta je sicer pozitivna, kar pomeni da moramo energijo dovesti (sistem ni stabilen), vendar je vrednost majhna. Upoštevati pa moramo še, da med ionoma deluje tudi privlačna Coulombska interakcija:

$$V(r) = -\frac{C}{r}, \qquad C = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1{,}44\,\mathrm{eV}\cdot\mathrm{nm}, \tag{9.19}$$

kjer je R razdalja med ionoma. Ta sila je privlačna, zato iona težita k manjši medsebojni oddaljenosti. Če se jedri zelo približata, začne delovati močna odbojna sila med elektroni, ki je v veliki meri posledica Paulijevega izključitvenega načela. Če skupaj seštejemo $E_i - E_a$ in oba prispevka k potencialni energiji, dobimo skupno *interakcijsko energijo*, ki ima minimum pri neki razdalji r_0, globina potencialne jame $|E_{\min}|$ pa se imenuje *disociacijska energija*, saj pove, koliko energije moramo dovesti, da razdremo molekulo.

Oglejmo si primer molekule NaCl. $E_i(\mathrm{Na}) = 5{,}1\,\mathrm{eV}$ in $E_a(\mathrm{Cl}) = 3{,}6\,\mathrm{eV}$. Na razdalji $r_0 = 0{,}28\,\mathrm{nm}$ (razdalja med ionoma Na in Cl v kristalu kuhinjske soli) je potencialna energija $V(r_0) = -5{,}1\,\mathrm{eV}$. Vsota je

$$E_{\min} = E_i(\mathrm{Na}) - E_a(\mathrm{Cl}) + E_e = -3{,}6\,\mathrm{eV}. \tag{9.20}$$



Slika 9.3. Potencialna energija med ionoma.

Energija je negativna, torej je sistem vezan. (V izračunu sicer nismo upoštevali odbojne sile.) V trdni fazi soli posamezne molekule NaCl sicer ne obstajajo. Ionsko vezane spojine namreč tvorijo kristale.

Ionska vez nima orientacije v prostoru, ker ion čuti Coulombski privlak vseh drugih ionov v okolici, neodvisno od njihovih smeri, pomembne so le medsebojne razdalje.

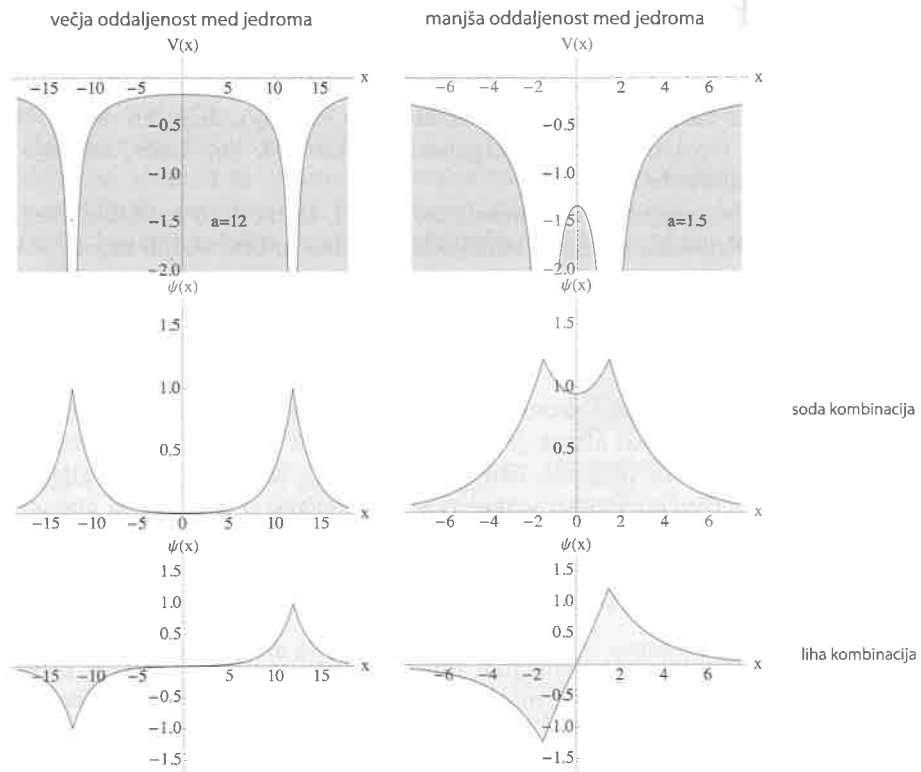
9.4.2 Kovalentna vez

Kovalentna vez nastane, ko si dva atoma delita elektrone. Kemiki takšne vezi rišejo s črticami. V molekulo lahko kovalentna vez združi dva različna ali enaka atoma, na primer atoma vodika v molekulo H_2.

Oglejmo si kvantni opis kovalentne vezi na preprostem primeru molekule H_2^+, torej enkrat ionizirane molekule vodika, ki ima zgolj en elektron, ujet v potencialno jamo, ki jo tvorita dve jedri. Ker sta jedri veliko težji od elektrona, v prvem približku privzamemo, da sta nepremični. Rešiti moramo stacionarno Schrödingerjevo enačbo za takšno dvojno potencialno jamo. Pri veliki oddaljenosti med jedroma je elektron v stanju, ki je zelo podobno atomskemu osnovnemu stanju. Označimo ga z $\psi(\mathbf{r}-\mathbf{r}_A)$, če je elektron blizu prvega jedra, ali z $\psi(\mathbf{r}-\mathbf{r}_B)$, če je blizu drugega. Iz teh valovnih funkcij tvorimo kombinaciji

$$\begin{aligned}\psi_{\text{soda}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi(\mathbf{r}-\mathbf{r}_A)+\psi(\mathbf{r}-\mathbf{r}_B)\right],\\ \psi_{\text{liha}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi(\mathbf{r}-\mathbf{r}_A)-\psi(\mathbf{r}-\mathbf{r}_B)\right],\end{aligned} \tag{9.21}$$

ki sta dober približek za lastni stanji dvojne potencialne jame. Pri tem smo upoštevali simetrijo glede na točko na pol poti med jedroma (izbrano kot izhodišče koordinatnega sistema) in lastni funkciji opredelili kot sodo in liho glede na inverzijo, $(x,y,z)\to(-x,-y,-z)$. Če sta jedri močno oddaljeni, je energija sistema za obe valovni funkciji kar enaka in sicer ima isto vrednost kot za atom vodika. Rečemo, da sta sodo in liho stanje energijsko *degenerirani*. Ko pa zmanjšujemo razdaljo med atomoma, je degeneracija odpravljena in dobimo *razcep energij*. Do razcepa pride, ker je na področju med jedroma pri majhni razdalji med atomoma Coulombski potencial v bližini izhodišča bolj negativen, kot bi bil sicer. Za sodo valovno funkcijo je verjetnostna gostota, da se elektron nahaja v energijsko ugodnem področju, večja kot sicer, zato je lastna energija manjša kot pri veliki oddaljenosti med jedroma. Nasprotno pa je za liho funkcijo verjetnostna gostota v energijsko ugodnem področju manjša kot sicer in energija stanja naraste. Čisto splošno velja, da je najbolj stabilna konfiguracija tista, pri kateri elektroni več časa preživijo med jedroma kot drugod v prostoru. Kovalentna vez je močna, ko sta jedri zadosti blizu in se atomske orbitale delno prekrivajo.



Slika 9.4. K razlagi nastanka kovalentne kemijske vezi.

Ravnovesno razdaljo med jedroma v H_2^+ določimo, če upoštevamo še odbojno silo med pozitivno nabitima jedroma. Z natančnim računom bi dobili za razdaljo $r_0 = 0{,}106\,\text{nm}$, za disociacijsko energijo pa $E_d = 2{,}65\,\text{eV}$. To je energija, ki jo moramo dovesti, da molekulo H_2^+ razbijemo na atom vodika in ion vodika.

Ko podoben račun ponovimo za dva elektrona v molekuli H_2, ravno tako ugotovimo, da elektrona izkoristita energijsko ugodno območje med atomoma. Ravnovesni razmik med jedroma je nekoliko manjši kot v H_2^+, $r_0 = 0{,}074\,\text{nm}$, disociacijska energija pa je $4{,}48\,\text{eV}$. To je manj kot dvakratna disociacijska energija za H_2^+, saj se

elektrona med seboj motita, pa tudi odbojna sila med protonoma je večja pri manjši medsebojni razdalji.

Kovalentno so vezane molekule N_2 in O_2, ter večina organskih spojin. Kovalentne vezi so lahko večkratne, ko si atoma delita več parov elektronov. V O_2 je, na primer, vez dvojna, v N_2 pa trojna: O=O, N≡N. Kovalentna vez je usmerjena, saj povezuje točno določen par atomov. Zato lahko pare tudi rišemo shematsko s črticami. Zaradi usmerjenosti kovalentne vezi imajo molekule točno določeno in pogosto dokaj kompleksno tridimenzionalno strukturo.

9.5 Kristali

Kristal je urejena tridimenzionalna periodična razporeditev atomov. Nastane, ker ima snov pri takšni razporeditvi atomov minimalno energijo. Ključen dokaz, da so kristali periodična tvorba, je uklon rentgenskih žarkov (M. von Laue, odkritje leta 1912, Nobelova nagrada leta 1914).

Atomi so pravilno razporejeni v prostorsko mrežo, imenovano *kristalna mreža* ali *kristalna rešetka*. Kristalna mreža je lahko zelo pravilna in brez večjih napak pokriva celoten kristal (*monokristal*), lahko pa je snov sestavljena iz množice drobnih kristalčkov (*polikristalinična snov*). Če trdna snov ni urejena, jo imenujemo *amorfna*, primer sta steklo in nekateri polimeri. Lastnosti snovi so močno odvisne od stopnje njene urejenosti.

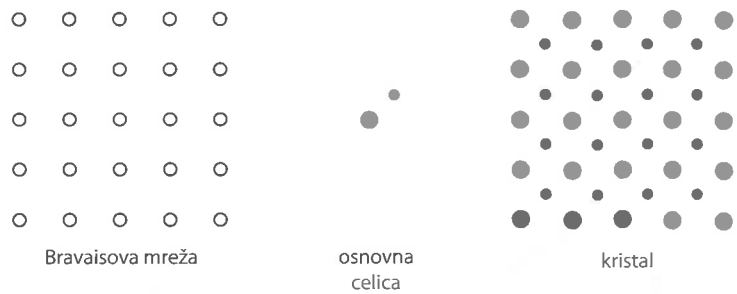
Če so kemijske vezi v dani snovi neusmerjene kot pri ionski vezi, torej če moč vezi ni odvisna od kotov med atomi, je struktura kristala takšna, da je prostor, ki ga zapolnjujejo ioni različnih velikosti, čim bolj zapolnjen, saj je tedaj energija zaradi privlaka med ioni največja. Ionsko vezani kristali torej težijo k čim večji gostoti. Če pa so kemijske vezi usmerjene kot pri kovalentni vezi, potem je struktura določena s kemijskimi lastnostmi gradnikov, predvsem z valenco. Ogljik, denimo, lahko tvori štiri kemijske vezi s sosedi in teži k tetraedrični razporeditvi atomov, kot na primer v diamantu.

Idealen kristal dobimo z neskončnim ponavljanjem enakega vzorca v prostoru. V preprostih kristalih je osnovna enota ponavljanja en sam atom, kot denimo pri bakru, srebru in zlatu. Lahko pa je enota tudi bolj kompleksna, večatomna, kot pri kuhinjski soli (NaCl), ali pa je kristal sestavljen celo iz kompleksnih molekul (molekularni kristali, fulereni). Strukturo kristala podamo z osnovno mrežo in s skupino atomov (*bazo*), ki jo pripnemo v vsako točko osnovne mreže, glej sliko 9.5. Mrežo opišemo s tremi *osnovnimi vektorji* $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$, katerih dolžine imenujemo tudi *mrežne konstante*. Osnovni vektorji povejo, kako lahko premaknemo kristal, pa se ne bo čisto nič spremenilo. Vse točke osnovne mreže torej dobimo kot linearno kombinacijo

$$\mathbf{R} = u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3, \tag{9.22}$$

kjer so u_1, u_2, u_3 poljubna cela števila. To mrežo imenujemo tudi *Bravaisova mreža*. Točke v bazi podamo z

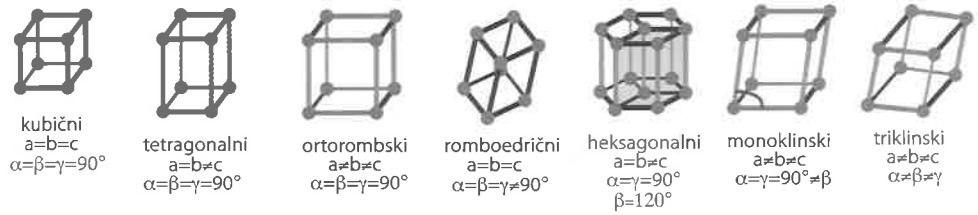
$$\mathbf{r}_j = x_j\mathbf{a}_1 + y_j\mathbf{a}_2 + z_j\mathbf{a}_3. \tag{9.23}$$



Slika 9.5. Kristalna mreža = Bravaisova mreža + baza (atomi v osnovni celici).

Veljati mora $0 \leq x_j, y_j, z_j < 1$, saj so atomi baze znotraj *enotske celice*. j teče od 1 do s, kjer je s število atomov v bazi.

Glede na simetrijske lastnosti kristalne mreže ločimo sedem sistemov: triklinski, monoklinski, ortorombski, tetragonalni, kubični, trigonalni in heksagonalni, glej sliko 9.6. Najbolj splošna mreža je triklinska, ostale pa imajo dodatne simetrijske lastnosti.



Slika 9.6. Kristalni sistemi.

Kristali rastejo tako, da se v začetni kristal (seme) urejeno vgrajujejo novi atomi. Kristale polprevodnikov, kovin in soli se goji po postopku Czochralskega. Čisto izhodiščno snov se raztali. V talino se namoči začetni kristal pritrjen na palico, ki se jo nato vleče iz taline in sočasno vrti okoli osi. Tako zrastejo veliki monokristali v obliki palic premera nekaj deset centimetrov, ki so lahko dolge več metrov. Palico se potem razreže na tanke rezine (waferje) in zbrusi do visokega sijaja. Danes se v polprevodniški industriji uporablja silicijeve rezine s premerom do 300 mm, pojavljajo pa se že 450 mm rezine.

9.6 Računska kemija

Strukturo molekul in kristalov se danes v veliki meri določa računsko: iščemo rešitve za valovne funkcije posameznih kvantnih stanj ob uporabi efektivnega potenciala, ki je tudi sam odvisen od valovnih funkcij zasedenih stanj. Enačbe rešujemo »samousklajeno«, torej s ponavljanjem, dokler se rešitve več ne spreminjajo. V praksi se

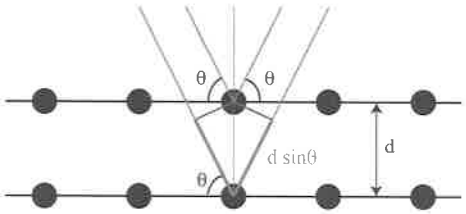
uporabljajo programski paketi, pri katerih kot vhodni podatek podamo osnovne vektorje kristalne mreže in položaje vseh atomov v osnovni celici, kot rezultat pa dobimo valovne funkcije in pripadajoče energije, verjetnostno gostoto za elektrone, sile med atomi in različne merljive fizikalne lastnosti. Za preproste primere se lahko račune poganja na osebnih računalnikih, za bolj zapletene pa na računalniških gručah in superračunalnikih.

9.7 Določanje kristalne strukture

Kristalno strukturo določamo z *uklonom rentgenskih žarkov*. Kristal v mislih razdelimo na vzporedne ravnine atomov. Ker ima rentgenska svetloba valovno dolžino primerljivo z medatomskimi razdaljami, pride pri sipanju na ravninah do uklonskih pojavov, torej do močne ojačitve v točno določenih smereh. Pogoj za ojačitev dobimo iz zahteve, da je razlika poti za dve sosednji vzporedni kristalni ravnini enaka celoštevilskemu večkratniku valovnih dolžin:

$$n\lambda = 2d\sin\theta, \tag{9.24}$$

kjer je d razdalja med ravninama, θ pa kot, označen na sliki 9.7. To pravilo se imenuje *Braggov zakon* (opisan leta 1912, Nobelova leta 1915, skupaj oče W. Bragg in sin W. L. Bragg, ki je imel tedaj 25 let).



Slika 9.7. K izpeljavi Braggove enačbe. Kot odklona žarka (*sipalni kot*) je 2θ.

Bolj splošno enačbo, zapisano z vektorji iz *recipročnega prostora*, je iznašel Laue. Glasi se

$$\mathbf{k}_{\text{ven}} - \mathbf{k}_{\text{noter}} = \mathbf{G}, \tag{9.25}$$

kjer je $\mathbf{k}_{\text{ven}}$ valovni vektor izhodnega valovanja, $\mathbf{k}_{\text{noter}}$ valovni vektor vhodnega valovanja, $\mathbf{G}$ pa vektor

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3, \tag{9.26}$$

kjer so $\mathbf{b}_i$ osnovni vektorji *recipročne mreže*:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi\frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi\frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi\frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \end{aligned} \tag{9.27}$$

Cela števila h, k in l so *Millerjevi indeksi*, ki določajo družino kristalnih ravnin, na katerih se sipa rentgensko valovanje, ko pride do ojačitve. Razdalja med sosednjimi ravninami je kar

$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|}, \tag{9.28}$$

smer vektorja $\mathbf{G}$ pa je pravokotna na kristalne ravnine. Iz teh dveh dejstev se iz Lauejeve enačbe izpelje Braggova.

9.8 Struktura elektronskih pasov

Pri obravnavi kovalentne vezi smo opisali razcep degeneriranih atomskih stanj ob združitvi dveh atomov v molekulo. To velja splošno tudi za veliko število atomov, ki jih združimo v kristal. Atomsko stanje se razcepi na zelo veliko število stanj, med katerimi so tako majhni razmiki, da jih ne moremo razločiti v nobenem eksperimentu, zato gre praktično za kontinuum stanj, ki ga poimenujemo *elektronski pas*. Širina pasu je povezana z razdaljo med atomi in prekrivanjem njihovih atomskih orbital: če so atomi neskončno ločeni, je širina kar nič, pri tipičnih medatomskih razdaljah v kristalih pa so širine pasov nekaj eV. To velja za zunanje elektrone, ki so v valenčnih orbitalah, ki so najbolj oddaljene od jedra in imajo največje prekrivanje z orbitalami na sosednjih mestih. Elektroni v sredici so blizu jedra in tvorijo izjemno ozke pasove, ki pa nimajo pomembne vloge pri kemijskih in fizikalnih lastnostih pri običajnih temperaturah.

Oglejmo si preprost enodimenzionalni model verige atomov. Vsak atom ima atomsko orbitalo z energijo ϵ. Kvantno stanje, ko je elektron v orbitali na j-tem atomu, označimo z $|j\rangle$. Elektron lahko preskoči v orbitalo na levem ali desnem sosedu. Hamiltonov operator se glasi

$$H = \sum_j \epsilon\,|j\rangle\langle j| - t\left(|j\rangle\langle j+1| + |j\rangle\langle j-1|\right), \tag{9.29}$$

kjer parameter t opisuje prekrivanje orbital med sosednjimi atomi in določa pogostost preskokov. Poskusimo rešiti z nastavkom za ravni val

$$|\psi_k\rangle = \sum_j e^{ikja}\,|j\rangle\,. \tag{9.30}$$

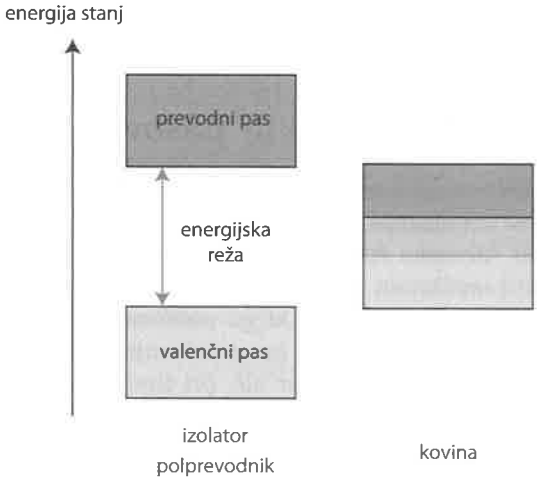
Dobimo

$$\begin{aligned} H\,|\psi_k\rangle &= \sum_j e^{ikja}\epsilon\,|j\rangle - te^{ikja}\left(e^{ika}\,|j\rangle + e^{-ika}\,|j\rangle\right) \\ &= \sum_j \left[\epsilon - 2t\cos(ka)\right] e^{ikja}\,|j\rangle \\ &= \left[\epsilon - 2t\cos(ka)\right]|\psi_k\rangle\,. \end{aligned} \tag{9.31}$$

Torej so $|\psi_k\rangle$ res lastna stanja za atome v 1D kristalu, lastne energije pa so

$$E(k) = \epsilon - 2t\cos(ka). \tag{9.32}$$

Izraz, ki povezuje energijo E in valovno število k, se imenuje *disperzijska zveza*. Pas sega od $\epsilon - 2t$ do $\epsilon + 2t$. Za atom z več atomskimi orbitalami dobimo večje število takšnih pasov. Odvisno od parametrov so lahko pasovi ločeni ali pa se delno prekrivajo. Množici lastnih stanj kristala rečemo *pasovna struktura*.



Slika 9.8. Pasovna struktura izolatorja, polprevodnika in kovine.

Če imajo atomi v vsaki celici skupaj n elektronov, moramo zapolniti n najnižje ležečih pasov. Glede na to, kako se pasovi prekrivajo in koliko elektronov imamo na celico, je možno, da z elektroni ravno povsem zapolnimo en pas, naslednji pa je pri višji energiji. To se zgodi pri *polprevodnikih* in *izolatorjih*, slika 9.8. Najvišji zapolnjen pas se imenuje *valenčni pas*, najnižji nezapolnjeni pas pa je *prevodni pas*. Polprevodniki in izolatorji se v grobem ločijo po velikosti *energijske reže*; meja je postavljena pri nekaj eV. Če pa se valenčni in prevodni pas prekrivata, ali če je število elektronov v osnovni celici liho, potem je kristal običajno *kovina*. Teorijo električnih pasov je razvil Bloch leta 1928, kar je bil eden največjih zgodnjih uspehov kvantne mehanike.

Pasovno strukturo snovi lahko raziščemo z metodo, ki se imenuje *spektroskopija fotoelektronov*. Snov obsevamo z elektromagnetnim valovanjem: uporablja se ultravijolična svetloba ali dolgovalovna rentgenska svetloba. Foton iz snovi izbije elektron (fotoefekt), katerega kinetično energijo pomerimo. Spreminjamo lahko vpadni kot fotonov in kot, pri katerem merimo energije izhodnih elektronov. Na ta način lahko izmerimo energije vseh zasedenih stanj vzorca, torej disperzijsko zvezo. Manjša pomanjkljivost je površinska občutljivost metode: merjeni signal izvira iz zgornjih nekaj plasti atomov kristala. Ti imajo lahko drugačne lastnosti kot atomi globoko iz notranjosti kristala, ki nas zares zanimajo.

10

Kovine

Kovine so snovi z delno zapolnjenim pasom elektronskih stanj in so zato dobri električni prevodniki. Značilno je, da njihova upornost z naraščajočo temperaturo raste.

10.1 Model prostih elektronov

Preprost model kovine dobimo, če obravnavamo valenčne elektrone kot proste delce in zanemarimo tako vpliv ionov v kristalu kot odbojno silo med elektroni. Kos kovine naj ima obliko kocke s stranico l. Rešitev stacionarne Schrödingerjeve enačbe za proste elektrone so ravni valovi:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{10.1}$$

kjer je $V = l^3$. Lastne energije so odvisne le od velikosti valovnega vektorja $\mathbf{k}$:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m_e}. \tag{10.2}$$

Ker je sistem končno velik, so komponente valovnega vektorja kvantizirane, podobno kot v potencialnih jamah. Račune poenostavimo z uporabo *periodičnih robnih pogojev*: če gre delec preko mejne ploskve $x = l$, se pojavi na nasprotni mejni ploskvi $x = 0$, zato velja $\psi(x, y, z) = \psi(x+l, y, z)$. Podobno velja v smereh y in z. Tako se izognemo zapletom pri obravnavi pojavov na površini, saj ob periodičnih robnih pogojih sistem površine sploh nima. Iz robnega pogoja sledi $e^{ik_x x} = e^{ik_x(x+l)}$, od tod pa

$$k_x = \frac{2\pi}{l} n_x, \tag{10.3}$$

in podobno za k_y in k_z; kvantna števila n_x, n_y, n_z so poljubna cela števila. Dovoljeni valovni vektorji tvorijo mrežo točk v recipročnem prostoru. Zaradi Paulijevega izključitvenega načela se v stanju z nekimi n_x, n_y, n_z lahko nahajata le dva elektrona z različnim spinom. Za dva elektrona torej potrebujemo prostornino $(2\pi/l)^3 = (2\pi)^3/V$ recipročnega prostora, saj so sosednje dovoljene vrednosti valovnih števil k_x, k_y in k_z

zamaknjene za $2\pi/l$. Elektroni zasedajo energijske nivoje od najnižjega naprej. Ker je energija odvisna samo od dolžine vektorja $\mathbf{k}$, se zapolnjujejo zaporedne krogelne lupine v recipročnem prostoru. Prostornina krogle s polmerom k_F, ki obsega vsa zasedena stanja, je

$$\frac{4\pi}{3}k_F^3 = \frac{N}{2}\frac{(2\pi)^3}{V}, \tag{10.4}$$

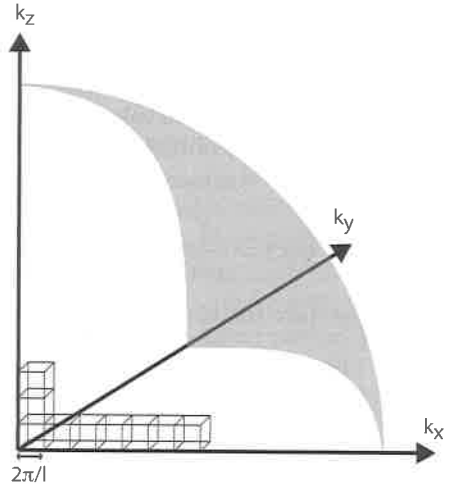
od koder dobimo

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \tag{10.5}$$

kjer je $n = N/V$ gostota valenčnih elektronov. Krogla zasedenih stanj v recipročnem prostoru se imenuje *Fermijeva krogla*, njena površina pa *Fermijeva površina* (glej sliko 10.1). Energija najvišjih zasedenih stanj je *Fermijeva energija*:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}. \tag{10.6}$$

Pri *absolutni ničli* (temperaturi nič, $T = 0\,\mathrm{K}$), torej v osnovnem stanju kovine, so zasedena vsa stanja pod Fermijevo energijo, prosta pa vsa stanja nad njo.



Slika 10.1. Sestavljanje Fermijeve krogle iz osnovnih kubičnih celic s prostornino $(2\pi/l)^3$.

Hitrost elektronov na Fermijevi površini je enaka

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m_e} = \frac{\hbar}{m_e}(3\pi^2 n)^{1/3}. \tag{10.7}$$

Za baker je $n = 8{,}5 \times 10^{28}\,\mathrm{m}^{-3}$, od koder sledi $E_F = 7{,}0\,\mathrm{eV}$ in

$$v_F = 1{,}6 \times 10^6\,\mathrm{m/s} \approx 0{,}005c. \tag{10.8}$$

Ugotovitev je presenetljiva: celo pri absolutni ničli elektroni v kovini švigajo naokoli z velikanskimi hitrostmi. Zato rečemo, da se elektroni obnašajo kot *Fermijev* ali *degeneriran plin*.

10.2 Gostota stanj

Gostota stanj je število kvantnih stanj preračunano na enoto energije. Enačbo (10.6) zapišemo kot $E \propto N^{2/3}$, izrazimo N kot funkcijo E, $N \propto E^{3/2}$, ter odvajamo

$$g(E) = \frac{\mathrm{d}N(E)}{\mathrm{d}E} \propto E^{1/2}. \tag{10.9}$$

Korenska odvisnost ne velja zgolj za model prostih elektronov, temveč splošno za tridimenzionalne kristale na robovih energijskih pasov.

Pri absolutni ničli je število vseh elektronov enako integralu gostote stanj od energije 0 do Fermijeve energije:

$$N = \int_0^{E_F} g(E)\mathrm{d}E. \tag{10.10}$$

Z uporabo gostote stanj tako poenostavimo računanje: namesto seštevanja po valovnih vektorjih opravimo integriranje po energijah.

10.3 Fermi-Diracova porazdelitev

V začetku 20. stoletja so rezultati meritev lastnosti kovin veljali za zelo zagonetne. Nekatere vrednosti so se razlikovale za faktor 100 od pričakovanih. Težava je tičala v tem, da še niso poznali koncepta fermionov in Paulijeve prepovedi. Leta 1926 sta Fermi in Dirac neodvisno odkrila, da je *porazdelitev* fermionov po energijah podana z izrazom

$$f(E) = \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{\frac{E-\mu}{k_B T}}}, \tag{10.11}$$

kjer je $k_B = 1{,}38 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K}$ Boltzmannova konstanta, količina μ pa je *kemijski potencial* ali *Fermijev nivo*. *Zasedbeno število* $f(E)$ podaja verjetnost, da je stanje pri energiji E zasedeno; za fermione velja $0 \leq f(E) \leq 1$, ker je v enem stanju lahko največ en delec. Pri absolutni ničli je Fermijev nivo enak Fermijevi energiji:

$$\mu(T = 0) = E_F \tag{10.12}$$

in

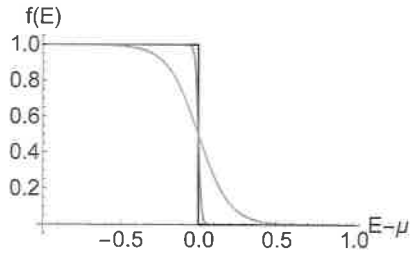
$$f(E) = 1 \quad \text{za} \quad E \leq E_F, \qquad f(E) = 0 \quad \text{za} \quad E > E_F, \tag{10.13}$$

sicer pa se $\mu(T)$ razlikuje od E_F. Fermi-Diracova porazdelitev je prikazana na sliki 10.2 za nekaj različnih vrednosti temperature. Zgoraj omenjeni faktor velikostnega reda 100 dobimo kot razmerje $k_B T/E_F$, kjer je T sobna temperatura, E_F pa tipična Fermijeva energija za običajne kovine. To pomeni, da pri nekaterih pojavih sodelujejo le *termično vzbujeni* elektroni v bližini Fermijeve površine, ne pa vsi valenčni elektroni.

Pri končnih temperaturah velja posplošitev enačbe (10.10):

$$N = \int_0^{\infty} g(E)f(E)\mathrm{d}E. \tag{10.14}$$

Od tod bi lahko izračunali, kako se μ spreminja s temperaturo, saj je število elektronov N konstantno.



Slika 10.2. Fermi-Diracova porazdelitev za $T = 0$ (črna), $T = 0{,}01$ (temno siva) in $T = 0{,}1$ (svetlo siva)

10.4 Gibanje elektrona v zunanjem polju

Če postavimo kristal v električno ali magnetno polje, na gibanje elektrona v snovi poleg notranjih sil vpliva tudi zunanje polje. Elektron opišemo kot kvantnomehansko valovanje (valovni paket). Hitrost valovnega paketa je podana z njegovo grupno hitrostjo $c_g = \mathrm{d}\omega/\mathrm{d}k$, kar je posplošitev enačbe (1.74) iz prvega poglavja. (Ker pri tej obravnavi malo pomešamo kvantne in klasične pojme, rečemo, da gre za *kvaziklasični približek.*) Frekvenco povežemo z energijo elektrona pri danem valovnem vektorju (disperzijsko zvezo), $\omega = E(k)/\hbar$, in sledi

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E(k)}{\mathrm{d}k}. \tag{10.15}$$

Od tod dobimo za pospešek

$$a = \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}^2E(k)}{\mathrm{d}k^2}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t}, \tag{10.16}$$

pri čemer smo uporabili pravilo za posredno odvajanje. To zapišemo kot

$$a = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}^2E(k)}{\mathrm{d}k^2}\frac{\mathrm{d}(\hbar k)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m^*}\frac{\mathrm{d}p_{\mathrm{kristal}}}{\mathrm{d}t}, \tag{10.17}$$

kjer smo uvedli *efektivno maso*

$$m^*(k) = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}^2E(k)}{\mathrm{d}k^2}\right)^{-1} \tag{10.18}$$

in *kristalno gibalno količino*

$$p_{\mathrm{kristal}} = \hbar k. \tag{10.19}$$

Časovni odvod kristalne gibalne količine je določen z zunanjo silo F:

$$\frac{\mathrm{d}p_{\mathrm{kristal}}}{\mathrm{d}t} = \hbar\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t} = F. \tag{10.20}$$

Končno dobimo enačbo gibanja

$$\mathbf{F} = m^*\mathbf{a}, \tag{10.21}$$

ki ima obliko efektivne Newtonove enačbe, v kateri namesto mase elektrona m_e nastopa njegova efektivna masa m^*, namesto vseh sil pa samo zunanje, $\mathbf{F} = q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})$, kjer sta $\mathbf{E}$ in $\mathbf{B}$ zunanje električno in zunanje magnetno polje. V tem je ravno ključ: vpliv notranjega potenciala zaradi ionov in preostalih elektronov smo povsem upoštevali z uporabo efektivne mase.

Primer: V modelu prostih elektronov je $E(k) = \hbar^2k^2/2m_e$. Hitrost je

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E(k)}{\mathrm{d}k} = \frac{\hbar k}{m_e}. \tag{10.22}$$

V tem primeru sta mehanska gibalna količina $p = m_e v$ in kristalna gibalna količina $p_{\mathrm{kristal}} = \hbar k$ kar enaki. Za efektivno maso dobimo

$$m^*(k) = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\hbar^2}{m_e}\right)^{-1} = m_e, \tag{10.23}$$

kar je pričakovan rezultat, saj v tem preprostem modelu povsem zanemarimo vpliv ionov in preostalih elektronov na obravnavani elektron. V običajnih kovinah je m^*/m_e blizu 1: v bakru je 1,0, natriju 1,2 in kaliju 1,0. V teh snoveh približek prostih elektronov dobro deluje.

Primer: V modelu verige atomov iz prejšnjega poglavja velja $E(k) = \epsilon - 2t\cos(ka)$. Hitrost je

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E(k)}{\mathrm{d}k} = \frac{2ta}{\hbar}\sin(ka). \tag{10.24}$$

Zveza med mehansko gibalno količimo $m_e v$ in kristalno gibalno količino $\hbar k$ je zapletena: količini se lahko razlikujeta celo v predznaku! To preprosto pomeni, da na gibanje elektronov bolj kot zunanji potencial vpliva notranje polje ionov. Za efektivno maso dobimo

$$m^*(k) = \left(\frac{1}{\hbar^2}2ta^2\cos(ka)\right)^{-1} = \frac{\hbar^2}{2ta^2}\frac{1}{\cos(ka)}. \tag{10.25}$$

Pri majhnih k, torej na dnu pasu, velja $\cos(ka) \approx 1$, in sledi

$$m^*(k) \approx \frac{\hbar^2}{2ta^2}, \tag{10.26}$$

Če je koeficient t majhen, se pod vplivom polja elektron le stežka odtrga od iona in preskoči na sosednjega. To je podobno, kot če bi bil elektron zelo masiven. Dejansko obstajajo snovi, v katerih znaša m^* tudi $1000\,m_e$ in več.

10.5 Transportni pojavi, susceptibilnost

Procese, pri katerih se premika snov (delci), naboj, toplota, ipd., v fiziki imenujemo *transportni pojavi.* Do gibanja pride zaradi neravnovesja v sistemu. Če imamo, denimo, dve posodi s plinom, ki sta med seboj povezani s cevjo, in v eni posodi povečamo tlak, bo nekaj plina steklo skozi cev v drugo posodo in tlak se bo izenačil. Če kanemo

kapljico barvila v vodo, se bo barvilo počasi razlezlo po celotni prostornini tekočine, dokler ne bo njegova koncentracija povsod enaka; ta pojav se imenuje *difuzija*. Če imamo na električnem vodniku razliko električnih potencialov med obema koncema, bo stekel električni tok. Če vtaknemo konec kovinske palice v ogenj, bo nastala razlika temperatur med obema krajiščema in stekel bo toplotni tok, ki bo težil k izenačitvi temperature. Skupno vsem tem primerom je, da sistem teži k ponovni vzpostavitvi ravnovesja. Hitrost približevanja k ravnovesju je specifična lastnost materiala.

Če je motnja majhna, je odziv sorazmeren z njeno velikostjo. Zapišemo

$$x = \chi h. \tag{10.27}$$

S h smo označili velikost motnje, z x odziv, sorazmernostni koeficient χ pa se imenuje (statična) *susceptibilnost*, ki meri dovzetnost sistema, da se odzove na zunanjo motnjo. V primeru vzmetnega nihala je h sila, ki deluje na telo, x odmik telesa, susceptibilnost pa znaša $1/k$, kjer je k konstanta vzmeti. Toga vzmet (velik k) ustreza majhni susceptibilnosti.

Če se zunanji vpliv s časom spreminja, velja

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t-t')h(t')\mathrm{d}t'. \tag{10.28}$$

V matematiki se takšen integral imenuje *konvolucija*. *Dinamična susceptibilnost* $\chi(t-t')$ je funkcija razlike časov t in t', pri čemer mora veljati $\chi(\Delta t) = 0$ za $\Delta t = t - t' < 0$, ker so vsi fizikalni sistemi *kavzalni*: posledica sledi vzroku in nikdar obratno. Stanje sistema ob času t je določeno z zunanjim vplivom ob vseh preteklih časih $t' \leq t$.

Če je zunanja motnja močna in gre sistem daleč od ravnovesja, je odziv sistema v splošnem nelinearen.

10.6 Ohmov zakon

Oglejmo si prevajanje električnega toka po kovinskem vodniku. Ko je električni krog sklenjen, steče električni tok I. Dogovor za smer toka je takšen, da tok teče od pozitivnega priključka vira k negativnemu. Ker so elektroni negativno nabiti delci, v resnici potujejo v obratni smeri kot tok, torej od negativnega priključka k pozitivnemu. Tok je količina pretočenega naboja q na enoto časa:

$$I = \frac{q}{t}. \tag{10.29}$$

Naboj merimo v enotah ampersekunda As ali coulomb C (danes, v dobi vseprisotnih prenosnih digitalnih naprav, pa je zelo priljubljena enota mAh). Napetost vpeljemo kot količnik med električnim delom A, ki ga odda vir, in pretočenim nabojem q:

$$U = \frac{A}{q}. \tag{10.30}$$

Napetost merimo v enotah volt, $1\,\mathrm{V} = 1\,\mathrm{J/As}$. Meritve pokažejo, da je v zelo dobrem približku električni tok skozi vodnik sorazmeren z napetostjo (*Ohmov zakon*):

$$U = RI. \tag{10.31}$$

Upor ali *upornost* R merimo z enoto ohm $1\,\Omega = 1\,\mathrm{V/A}$. Upor je sorazmeren z dolžino vodnika l in obratno sorazmeren s presekom S:

$$R = \zeta \frac{l}{S}. \tag{10.32}$$

Koeficient ζ se imenuje *specifični upor* in se ga meri z enoto $\Omega\mathrm{m}$. Je specifična lastnost snovi, iz katere je vodnik. Ohmov zakon lahko zapišemo tudi drugače. Vpeljemo gostoto toka kot

$$j = \frac{I}{S}, \tag{10.33}$$

specifično prevodnost σ kot obratno vrednost specifičnega upora, torej

$$\sigma = \frac{1}{\zeta}, \tag{10.34}$$

ter električno polje kot

$$E = \frac{U}{l}, \tag{10.35}$$

in dobimo

$$j = \sigma E. \tag{10.36}$$

V tej *lokalni obliki* Ohmovega zakona je lepo razvidno, da električni tok nastane kot posledica električnega polja, ki deluje na elektrone, specifična električna prevodnost σ pa meri jakost odziva na polje in je torej primer statične susceptibilnosti. Za baker pri sobni temperaturi je $\rho = 1{,}7\,\mu\Omega\mathrm{cm}$ in $\sigma = 6 \times 10^7\,(\Omega\mathrm{m})^{-1}$.

10.7 Difuzijsko prevajanje

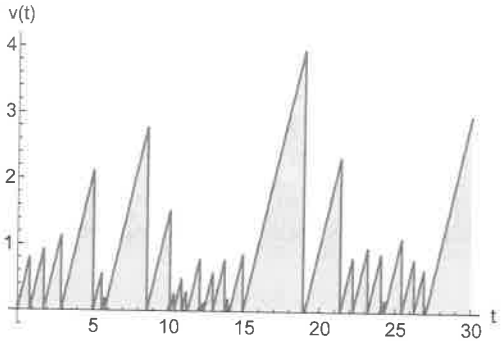
Prevajanje električnega toka si lahko predstavljamo kot naključen proces, pri katerem se elektroni kot kroglice gibajo po kristalu in se naključno odbijajo od ovir. Proces je podoben difuziji z dodatnim »gonilnim« členom, zaradi katerega dobimo neto tok. Prevajanje, pri katerem igra pomembno vlogo sipanje, imenujemo *difuzijsko prevajanje*. Ob trkih elektron delno izgubi spomin, ker se mu naključno spremeni faza, zato se elektroni med difuzijskim prevajanjem obnašajo kot klasična tekočina in kvantnomehanski pojavi, kot je interferenca, niso pomembni. Kvantna mehanika igra vlogo le pri verjetnosti za trke.

Gostoto električnega toka zapišemo kot

$$j = nqv, \tag{10.37}$$

kjer je n gostota gibljivih nosilcev naboja, q njihov naboj in v njihova povprečna potovalna hitrost. V električnem polju bi hitrost nabojev naraščala v skladu z enačbo

$$m^* \dot{v} = qE \tag{10.38}$$



Slika 10.3. Trenutna hitrost elektrona v Drudejevi teoriji: elektron se giblje enakomerno pospešeno, do naslednjega naključnega trka, ki se zgodi v povprečju po času τ.

torej čez vse meje. V resnici pa elektroni trkajo z nečistočami in z ioni, ki termično nihajo, zato se po *relaksacijskem času* τ pospeševanje ustavi. Za baker pri sobni temperaturi ta znaša približno 30 fs. Za povprečno potovalno hitrost tako dobimo

$$v = \frac{qE\tau}{m^*}, \tag{10.39}$$

in sledi $j = \frac{nq^2\tau E}{m^*}$, oziroma

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m^*}. \tag{10.40}$$

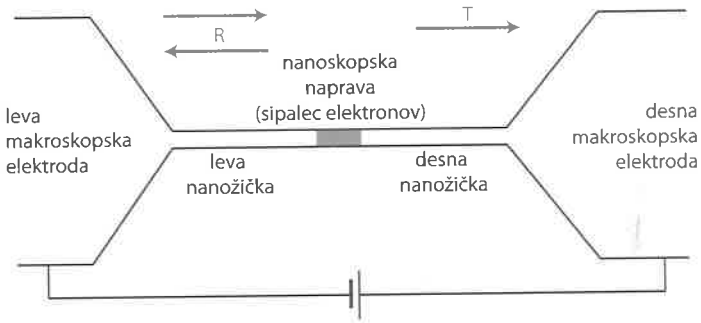
Ta fenomenološka obravnava prevodnosti se imenuje *Drudejeva teorija*. Simulirana časovna odvisnost hitrosti elektrona pri takšnem načinu prevajanja toka je prikazana na sliki 10.3. Povprečna razdalja, ki jo elektroni med zaporednimi trki prepotujejo, se imenuje *povprečna prosta pot* in znaša

$$l = v_F\tau, \tag{10.41}$$

kjer je v_F Fermijeva hitrost. Pri sobni temperaturi se elektroni zaletijo vsakih nekaj 100 medatomskih razdalj celo v izjemno čistih kovinah, v zelo nečistih kovinah pa pride do trka vsakih nekaj medatomskih razdalj neodvisno od temperature. Obstajajo tudi *slabe kovine*, spojine, ki imajo vse značilnosti kovin, vendar tako visoko upornost, da je ustrezna povprečna prosta pot krajša od mrežne konstante. Te snovi zahtevajo drugačen teoretični opis.

Primer: Pri sobni temperaturi je povprečna prosta pot v čistem bakru 39 nm. V kablu debeline 1 mm, po katerem teče tok 3 A, je povprečna potovalna hitrost elektronov $v = 0{,}3$ mm/s, torej bistveno manj od Fermijeve hitrosti, ki znaša $v_F = 1{,}6 \times 10^6$ m/s, tudi ta pa je bistveno manjša od hitrosti, s katero se po kablu širijo signali, ki je reda svetlobne hitrosti $c = 3 \times 10^8$ m/s.

10.8 Kvantno koherentno prevajanje



Slika 10.4. Postavitev pri obravnavi koherentnega elektronskega transporta skozi nanoskopske naprave.

V majhnih elektronskih napravah je lahko povprečna prosta pot elektrona večja od velikosti naprave, zato moramo prevajanje obravnavati povsem drugače. Ker ni sipanja, elektroni ohranijo kvantno koherenco in lahko pride do interferenčnih pojavov, značilnih za kvantni svet. Takšen tip prevajanja imenujemo *kvantno koherentno prevajanje* in ga najdemo predvsem v elektronskih napravah nanoskopskih dimenzij, kot so nanožičke, ogljikove nanocevke in kvantne pike. Landauer je pokazal (1957), da lahko električni tok skozi takšno napravo zapišemo kot

$$I = \frac{2e_0^2}{h}TU, \tag{10.42}$$

kjer je T je *transmisivnost* (*prepustnost*), torej verjetnost za prehod elektrona skozi napravo, U pa je napetostna razlika na priključkih naprave (slika 10.4). Če je prepustnost popolna, $T = 1$, elektron leti nemoteno skozi napravo kot izstrelek, zato ta mejni primer imenujemo tudi *balistično prevajanje*. V splošnem je transmisivnost manjša, saj se elektron z neko verjetnostjo $R = 1 - T$ v napravi odbije nazaj v izhodiščni električni priključek. Prevodnost skozi napravo je

$$G = \frac{I}{U} = G_0T, \tag{10.43}$$

kjer smo uvedli količino

$$G_0 = \frac{2e_0^2}{h} = 77{,}5\,\mu\text{S}, \tag{10.44}$$

ki se imenuje *kvant električne prevodnosti* in ustreza električni upornosti 12,9 kΩ.

Še terminološka opomba. Paziti je treba na razliko med angleškima izrazoma *conductivity* in *conductance*. Prvi je specifična električna prevodnost σ in je lastnost materiala. Drugi je električna prevodnost (konduktanca) G in je lastnost naprave. Pri difuzijskem transportu sta povezani kot

$$G = \sigma S/l. \tag{10.45}$$

Pri kvantno koherentnem transportu lahko govorimo zgolj o prevodnosti G, specifična prevodnost σ pa ni definirana. Več o tem v poglavju 14.

11

Polprevodniki in izolatorji

Polprevodniki so snovi, ki imajo pri absolutni ničli povsem zapolnjen valenčni pas in povsem prazen prevodni pas, med njima pa je energijska reža E_g, ki običajno ni večja od 3 ali 4 eV. Materiale z večjo režo imenujemo *izolatorji*. Mejna vrednost in tudi poimenovanje sta do neke mere poljubna, saj obstajajo *polprevodniki s široko režo*, kot je aluminijev nitrid (AlN), ki ima $E_g = 6{,}2$ eV. Še najboljša je pragmatična definicija, po kateri smemo med polprevodnike šteti vse tiste izolatorske snovi, ki jim lahko dodamo primesi (jih *dopiramo*) in tako dosežemo zanimive in uporabne prevodniške lastnosti, o čemer bo veliko govora v nadaljevanju. Bolj poljudno pa lahko rečemo, da so polprevodniki tisti materiali, katerih prevodnost je nekje med kovinsko in izolatorsko (pri čemer imamo v mislih dobre kovine, kot je baker, in dobre izolatorje, kot je steklo).

snov	energijska reža E_g [eV]
indijev antimonid, InSb	0,17
svinčev sulfid, PbS	0,37
germanij, Ge	0,67
silicij, Si	1,11
galijev arzenid, GaAs	1,43
bakrov oksid, Cu_2O	2,17
kadmijev sulfid, CdS	2,42
silicijev karbid, SiC	3,3
aluminijev arzenid, AlAs	2,16
galijev nitrid, GaN	3,4
diamant, C	5,5
aluminijev nitrid, AlN	6,2

Tabela 11.1. Širina energijske reže E_g pri različnih polprevodnikih in izolatorjih.

Med pomembne polprevodnike in izolatorje spadajo čisti elementi iz IV. skupine (C, Si, Ge), binarne spojine elementov iz III. in V. skupine, kot je GaAs, II. in VI., kot je CdS, ter IV. in VI., kot je PbS. Omenimo še različne okside, kot je Cu_2O, plastne materiale, kot je Bi_2Te_3, ter bolj kompleksne spojine iz treh ali štirih elementov. Obstajajo tudi *organski polprevodniki*, ki so organske spojine, katerih prevodniške lastnosti jih uvrščajo med polprevodnike; najbolj znan je polimer *poliacetilen*, ki ima linearno hrbtenico iz konjugiranih vezi med ogljikovimi atomi. Obstoj takšnih materialov je presenetljiv, saj je večina organskih spojin v trdnem stanju izolatorskih. Iz organskih polprevodnikov se izdeluje organske svetleče diode (OLED), sončne celice ter različne senzorje.

Danes se še vedno največ uporablja silicij, katerega izjemna prednost je nizka cena, mehanska robustnost, enostavnost obdelave in dobro razvita procesna tehnologija. Sodobni proizvodni obrat za izdelavo integriranih vezij je investicija velikostnega reda milijarde EUR. Potrebna je *čista soba* z nizko koncentracijo prašnih delcev, kontrolirano atmosfero (temperatura in vlažnost) in majhnim tresenjem tal. Potrebna oprema je izjemno natančna in zelo draga. Polprevodniška industrija je dokaj konservativna, zato nerada eksperimentira z novimi materiali in raje optimizira obstoječe proizvodne procese do skrajnih meja mogočega.

Drugi najbolj uporabljan polprevodnik je galijev arzenid, GaAs, ki ima številne prednosti pred Si: večjo gibljivost elektronov, širšo energijsko režo, ki jo lahko celo spreminjamo (zlitina $Ga_xAl_{1-x}As$, kjer je x poljubno število med 0 in 1), in boljše optoelektronske lastnosti. Je pa krhek in drag. Uporablja se za zelo hitro elektroniko, svetleče diode z dolgo valovno dolžino (infrardeče območje) in za sončne celice.

11.1 Intrinzični polprevodniki, vrzeli

Lastnosti polprevodnikov so močno odvisne od *nečistoč*. Noben kristal ni popolnoma čist in popolnoma pravilno kristalno urejen. Zaradi tega so bili zgodnji poskusi s polprevodniki težavni in neponovljivi. Šele v 30. letih je uspelo vzgojiti kristale z 99,999 % čistostjo, kar je omogočilo izdelavo zanesljivih polprevodniških naprav. Danes je v najčistejših kristalih na $\sim 10^{10}$ atomov kakšen tuj atom. Nečistoče imenujemo tudi *primesi* ali *dopanti*, kadar jih v relativno čist material vnesemo namenoma, da spremenimo njegove lastnosti.

Nedopirane polprevodnike imenujemo tudi *intrinzični polprevodniki*. Pri absolutni ničli je valenčni pas povsem zapolnjen, prevodni pa povsem prazen. Zunanje polje zato nima vpliva na elektrone, saj se njihov valovni vektor $\mathbf{k}$ ne more spreminjati v skladu z enačbo gibanja $\hbar \mathrm{d}\mathbf{k}/\mathrm{d}t = \mathbf{F}$, ker so energijsko bližnja stanja vsakega elektrona povsem zapolnjena. Takšen material ne more prevajati električnega toka. Tok bi lahko prenašali elektroni v prevodnem pasu, vendar je ta pri absolutni ničli povsem prazen. Izolatorske lastnosti pri $T = 0$ so torej posledica Paulijevega izključitvenega načela in prisotnosti energijske reže.

Pri končnih temperaturah prihaja do *termičnih fluktuacij*: nihajoči ion lahko preda del kinetične energije elektronu in s tem povzroči njegov prehod iz valenčnega v prevodni pas. V prevodni pas lahko valenčni elektron preide tudi pri obsevanju, če absorbira foton z zadosti energije (glej razdelek 12.2).

Za elektronom po njegovem prehodu v prevodni pas ostane nezasedeno stanje v valenčnem pasu. To lahko opišemo tudi kot iztrganje elektrona iz kovalentne kemijske vezi, pri čemer nastane primanjkljaj elektrona v vezi. Vpeljemo pojem *vrzeli*, manjkajočega elektrona, ki se obnaša kot efektivni delec ali *kvazidelec*. Prevodniški elektron in vrzel vedno nastaneta v *paru elektron-vrzel*. Tako elektron v prevodnem pasu kot vrzel v valenčnem sta gibljiva, zato lahko prenašata električni tok: imenujemo ju *prosta nosilca naboja*. Če neko vrzel zapolni elektron iz prevodnega pasu, pa oba izgineta; rečemo, da je prišlo do *rekombinacije* para elektron-vrzel. Rekombinacija ustreza zajetju prostega elektrona nazaj v kemijsko vez, ki ji manjka en elektron.

Vrzel je podobna mehurčku v tekočini, ki ga obravnavamo kot odsotnost tekočine. Ko se mehurček premakne, se prostornina na prejšnjem položaju zapolni s tekočino, ki je pritekla iz predela, kjer je mehurček sedaj. Podobno velja za vrzeli: prazno stanje zapolni elektron s sosednjega mesta in tako se vrzel premakne.

V električnem polju potujejo elektroni v nasprotni smeri polja, saj je $\mathbf{F} = -e_0\mathbf{E}$. To velja tudi za elektrone v valenčnem pasu, kadar lahko skočijo na sosednje nezasedeno mesto in zapolnijo stanje vrzeli. V realnem prostoru je to videti kot potovanje vrzeli v nasprotni smeri od elektronov, torej v smeri polja. To pomeni, da smemo vrzeli pripisati pozitiven električni naboj. (To je podobno, kot če mehurčku v tekočini pripišemo negativno maso, ker se dviga v težnostnem polju.)

11.2 Temperaturna odvisnost gostote nosilcev naboja

Verjetnost, da pri neki temperaturi najdemo elektrone v prevodnem pasu in vrzeli v valenčnem, je podana s Fermi-Diracovo funkcijo, enačba (10.11). Zasedbeno število elektronov v prevodnem pasu je

$$f(E) = \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{\frac{E-\mu}{k_BT}}} \approx \mathrm{e}^{-(E-\mu)/k_BT}. \tag{11.1}$$

Tu smo upoštevali, da pri sobni temperaturi, 25 °C ≈ 298 K, velja $k_BT \approx 1/40\,\mathrm{eV}$, medtem ko je μ od roba pasu oddaljen več desetin eV, zato je $E - \mu \gg k_BT$ in smemo 1 zanemariti v primerjavi z vrednostjo eksponentne funkcije. Gostoto elektronov v prevodnem pasu izračunamo kot

$$\begin{aligned} \frac{N_e}{V} &= \int_{E_{\mathrm{dno}}}^{\infty} g(E) f(E) \mathrm{d}E \\ &= \int_{E_{\mathrm{dno}}}^{\infty} C\sqrt{E - E_{\mathrm{dno}}}\,\mathrm{e}^{-(E-\mu)/k_BT} \mathrm{d}E. \end{aligned} \tag{11.2}$$

Upoštevali smo, da ima gostota stanj na dnu pasu korensko odvisnost od energije, C pa je konstanta. E_{dno} je energija dna prevodnega pasu. Končni rezultat je

$$n_e = \frac{N_e}{V} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \mathrm{e}^{-(E_{\mathrm{dno}}-\mu)/k_BT}. \tag{11.3}$$

Podobno izračunamo gostoto vrzeli v valenčnem pasu:

$$n_v = \frac{N_v}{V} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \mathrm{e}^{-(\mu - E_{\mathrm{vrh}})/k_B T}. \tag{11.4}$$

Tu je E_{vrh} energija vrha valenčnega pasu. Upoštevajoč, da je $N = N_v = N_e$, ker elektroni in vrzel nastajajo v parih in jih je v intrinzičnem polprevodniku enako mnogo, dobimo

$$\mathrm{e}^{-(E_{\mathrm{dno}} - \mu)/k_B T} = \mathrm{e}^{-(\mu - E_{\mathrm{vrh}})/k_B T}, \tag{11.5}$$

od koder sledi

$$\mu = \frac{E_{\mathrm{dno}} + E_{\mathrm{vrh}}}{2}. \tag{11.6}$$

V intrinzičnem polprevodniku torej leži kemijski potencial točno v sredini prepovedanega pasu. Končni izraz za gostoto nosilcev naboja je

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \mathrm{e}^{-E_g/2k_B T}, \tag{11.7}$$

kjer je $N = N_v = N_e$ in $E_g = E_{\mathrm{dno}} - E_{\mathrm{vrh}}$ širina energijske reže. Za čist silicij z $E_g = 1{,}1\,\mathrm{eV}$ pri sobni temperaturi dobimo

$$n = 1{,}08 \times 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-3}. \tag{11.8}$$

Za primerjavo, $\rho(\mathrm{Si}) = 5 \times 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$. Obstaja torej samo en nosilec naboja na vsak bilijon atomov silicija. Če je E_g večji, je prostih nosilcev naboja še (eksponentno) manj. Čisti polprevodniki zato tudi pri sobni temperaturi zelo slabo prevajajo električni tok.

11.3 Gibljivost in prevodnost

Gibljivost (mobilnost) prostih nosilcev naboja v polprevodniku je koeficient med povprečno hitrostjo delcev in jakostjo vzpostavljenega zunanjega električnega polja:

$$v_e = \beta_e E, \quad v_v = \beta_v E. \tag{11.9}$$

Gostota električnega toka je

$$j = e_0 n_e v_e + e_0 n_v v_v = (e_0 n_e \beta_e + e_0 n_v \beta_v)\, E = \sigma E. \tag{11.10}$$

Za intrinzični polprevodnik dobimo

$$\sigma = e_0 (\beta_e + \beta_v) c(T) \mathrm{e}^{-E_g/2k_B T}. \tag{11.11}$$

Konstanta $c(T)$ je šibko odvisna od temperature in pri sobni temperaturi znaša $2{,}5 \times 10^{25}\,\mathrm{m}^{-3}$, bolj pomemben pa je eksponentni člen $\exp(-E_g/2k_B T)$. Prevodnost močno narašča s temperaturo, ker narašča število termično vzbujenih prostih delcev, ki omogočajo prevajanje. V tem se polprevodniki razlikujejo od kovin, katerih prevodnost z naraščajočo temperaturo pada zaradi večjega sipanja prevodniških elektronov na termičnem migetanju ionov.

Gibljivost je odvisna od čistoče materiala (koncentracije primesi), števila nosilcev naboja, efektivne mase in temperature. Gre za zapleteno odvisnost, ki jo določimo z meritvami; vrednosti najdemo v tabelah. Običajno so izražene v enotah $\mathrm{cm}^2/(\mathrm{Vs})$. Za aplikacije v polprevodniških napravah je koristno imeti čim večjo gibljivost. Gibljivost elektronov v Si pri sobni temperaturi je, denimo, $1400\,\mathrm{cm}^2/(\mathrm{Vs})$, gibljivost vrzeli pa $450\,\mathrm{cm}^2/(\mathrm{Vs})$. V polprevodniških heterostrukturah se da ujeti elektrone v dvodimenzionalno ravnino, ki je izjemno čista. Nastane *dvodimenzionalni elektronski plin* z izjemno visoko gibljivostjo, tudi do $3 \times 10^6\,\mathrm{cm}^2/(\mathrm{Vs})$ pri nizkih temperaturah.

11.4 Dopirani polprevodniki

Prevodnost polprevodnika močno naraste, če ga dopiramo s primesmi z drugačno *valenco* (številom elektronov v zunanji podlupini), kot jo imajo atomi čistega materiala. V primeru Si (element IV. skupine) dopiramo s primesmi iz III. skupine (tipično B) ali iz V. skupine (tipično P in As). Tako dobljeni material se imenuje *ekstrinzični polprevodnik*. Dopanti zasedajo mesta, ki bi jih sicer atomi Si. Primesi v material dodamo z obstreljevanjem substrata z močno pospešenimi ioni (*ionska implantacija*) ali pa z difuzijo dopantov v močno segret substrat (*difuzijsko dopiranje*).

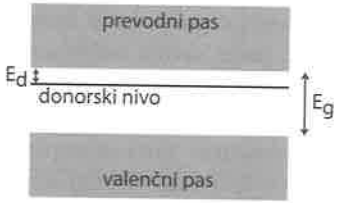
Energijska stanja dopiranega polprevodnika so kombinacija stanj čistega polprevodnika (širokih pasov) ter atomskih nivojev dopantov (diskretnih stanj). Dopanti so razporejeni naključno ter daleč vsaksebi, zato se vsak atom primesi obnaša neodvisno od ostalih.

11.4.1 Polprevodnik n

Petvalentni dopant ima pet zunanjih elektronov. S štirimi tvori kovalentne vezi, kot bi jih sicer atom Si. Peti elektron je šibko vezan in se giblje v privlačnem potencialu pozitivno nabitega dopantskega iona, podobno kot elektron v vodikovem atomu, le da moramo upoštevati njegovo efektivno maso m^* in dielektrično konstanto materiala ϵ. Energije stanj in polmere trajektorij v Bohrovem modelu zapišemo kot

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m^* e_0^4}{2(4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar^2)^2}, \quad r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar^2}{e_0^2 m^*}. \tag{11.12}$$

Od nivojev vodikovega atoma se energijski nivoji primesi ločijo za faktor $(m^*/m_e)/\epsilon^2$, polmeri orbital pa za faktor $\epsilon(m_e/m^*)$. Silicij ima dielektričnost 12, efektivna masa pa je $0{,}2 m_e$, torej je faktor za radij okoli 60, za energijske nivoje pa okoli 1/720. Ionizacijska energija znaša zgolj $E_d = 0{,}02\,\mathrm{eV}$. Dodatni elektron je torej zelo šibko vezan. Če atom primesi izgubi elektron, bo ta pristal na dnu prevodnega pasu. To pomeni, da leži energijski nivo dopantov za E_d pod spodnjim robom prevodnega pasu (slika 11.1).



Slika 11.1. Polprevodnik tipa n.

Pri absolutni ničli je valenčni pas zapolnjen, prevodni čisto prazen in zasedeni so vsi dopantski nivoji. Pri sobni temperaturi pa je energija termičnih vzbuditev primerljiva z E_d. Elektroni v dopantskem nivoju tedaj z lahkoto zapustijo ion in preidejo v prevodni pas, postanejo gibljivi in prispevajo k prevodnosti. Atomi primesi, ki izgubijo svoj elektron, ostanejo v kristalu kot pozitivno nabiti ioni. Atomi petvalentnih primesi se imenujejo *donorji* (ker oddajo elektron), nivoji pod dnom prevodnega pasu pa *donorski nivoji*.

Nekaj elektronov pri končni temperature preide v prevodni pas tudi iz valenčnega, vendar je njihovo število zaradi znatno večje energijske prepreke (in eksponentne odvisnosti!) veliko manjše od tistih, ki jih prispevajo primesi. *Večinski* nosilci naboja v tako dopiranem polprevodniku (imenujemo ga tip n) so torej elektroni, vrzeli pa so *manjšinske*. K električnem toku prispevajo predvsem večinski nosilci nabojev, manjšinske lahko kar zanemarimo. V dobrem približku so ionizirani vsi atomi primesi, zato je gostota prostih elektronov kar enaka gostoti dopantov n_d in sledi

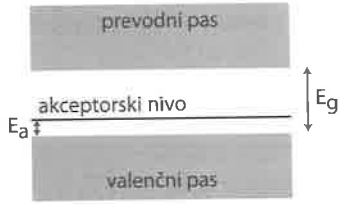
$$\sigma = e_0 n_d \beta_e. \tag{11.13}$$

Prevodnost je torej v zelo dobrem približku sorazmerna s koncentracijo primesi, kar pomeni, da lahko prevodniške lastnosti materiala spreminjamo poljubno v zelo širokem intervalu, ki pokriva več velikostnih redov. Običajno se dopira s koncentracijami v razponu od $1 \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-3}$ do $1 \times 10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3}$. Pri še višjih koncentracijah je prevodnost že praktično kovinska in rečemo, da je polprevodnik *degeneriran*.

Kemijski potencial μ je v dopiranem polprevodniku premaknjen proti dnu prevodnega pasu. To dejstvo so bo izkazalo kot zelo pomembno v nadaljevanju pri obravnavi spoja p-n.

11.4.2 Polprevodnik p

Pri trivalentnih dopantih je zgodba podobna. Vsak atom primesi zasede mesto atoma silicija. Ima tri zunanje elektrone, za polno zasičene kemijske vezi pa bi potreboval štiri. Zato atom dopanta pri absolutni ničli opišemo kot negativno nabit ion, na katerega je vezana pozitivno nabita vrzel (primanjkljaj elektrona). Za gibanje vrzeli okoli iona velja enaka enačba kot za elektron in dobimo podoben faktor zmanjšanja vezavne energije, ki jo tu označimo z E_a. Če vrzel zapusti atom, bo pristala na vrhu valenčnega pasu, kar je zanjo energijsko najbolj ugodna lega. (Analogija z mehurčkom je tu čisto na mestu.) To pomeni, da leži energijski nivo dopanta malo



Slika 11.2. Polprevodnik tipa p.

nad vrhom valenčnega pasu (slika 11.2). Trivalentni dopanti se imenujejo *akceptorji* (ker sprejmejo elektron, ko ustvarijo vrzel), nivoje primesi nad valenčnim pasom pa imenujemo *akceptorski nivoji*.

Pri absolutni ničli so nivoji primesi povsem nezasedeni, valenčni pas pa povsem zaseden. To razumemo tako: z vrha valenčnega pasu se v primerjavi s pasovno strukturo čistega Si za energijo E_a navzgor premakne en nivo za vsak atom primesi. Hkrati pa ima atom primesi ravno en elektron manj kot Si, zato ostane nivo pri E_a nezaseden. Pri sobni temperaturi pa vrzeli zapustijo atome in gredo v valenčni pas. Po kristalu se lahko prosto gibljejo in prispevajo k prevodnosti. Za seboj pustijo negativno nabite ione, saj na nivo primesi preide elektron iz valenčnega pasu. Večinski nosilci naboja so torej pozitivno nabite vrzeli. Rečemo, da je to polprevodnik tipa p. Vrzeli v valenčnem pasu je veliko več kot elektronov v prevodnem, zato lahko slednje zanemarimo. Če so zasedene vse vrzeli akceptorskih atomov, je gostota vrzeli enaka koncentraciji dopantov n_a. Za specifično prevodnost tako dobimo

$$\sigma = e_0 n_a \beta_v. \tag{11.14}$$

Kemijski potencial μ je v polprevodniku tipa p premaknjen proti vrhu valenčnega pasu.

11.5 Magnetni polprevodniki

Magnetne polprevodnike dobimo, če z atomi prehodnih kovin (denimo Mn) dopiramo polprevodnike (denimo GaAs); potrebno je zelo močno dopiranje, tudi do več procentne koncentracije dopantov. Ti materiali prevajajo električni tok podobno kot polprevodniki, hkrati pa so magnetno urejeni, a žal le pri temperaturah veliko pod sobno temperaturo. V takšnih materialih bi lahko informacijo zapisali tudi s pomočjo spina elektronov namesto z nabojem. Hranjenju in obdelavi informacij na ta način rečemo tudi *spintronika*. O *spinskem tranzistorju* bo govora v nadaljevanju (razdelek 15.8). Področje magnetnih polprevodnikov je sicer še v povojih.

11.6 Izolatorji

Izolatorji so materiali, v katerih električni tok praktično ne teče. Idealnih izolatorjev ni: vsi materiali vsaj malo prevajajo. Vseeno pa je razlika med dobrimi kovinami

in dobrimi izolatorji velikanska (tabela 11.2): med bakrom in teflonom kar za 30 velikostnih redov!

material	prevodnost
baker	$6{,}3 \times 10^7$ S/m
močno dopiran GaAs	10^3 S/m
čist Si	10^{-3} S/m
jod	10^{-7} S/m
steklo	10^{-13} S/m
kvarčno steklo	10^{-18} S/m
teflon (PTFE)	10^{-24} S/m

Tabela 11.2. Prevodnosti nekaterih materialov pri sobni temperaturi. Siemens S je enota za prevodnost, enaka je Ω^{-1}. Prevodnost iz ene vrstice v naslednjo pade za več velikostnih redov.

Snovi so lahko izolatorji iz različnih razlogov. Iz pasovne teorije in zgornje obravnave lastnosti elektronov v polprevodnikih sledi, da so kristalni materiali s sodim številom elektronov in velikim razmikom med valenčnim in prevodnim pasom izolatorji. Takšne izolatorje imenujemo *pasovni izolatorji*. To je najbolj običajna vrsta izolatorjev med snovmi, ki tvorijo kristale.

Kristalni materiali z lihim številom elektronov na osnovno celico so običajno kovinski, a ne vedno, ker je potrebno upoštevati tudi interakcije med elektroni. V materialih z zelo močnim odbojem med elektroni lahko dobimo izolatorsko obnašanje tudi takrat, ko valenčni pas ni povsem zapolnjen. To so *Mottovi izolatorji*. Pri teh snoveh lahko pride v odvisnosti od temperature do faznih prehodov med kovinskim in izolatorskim stanjem, v katerih se prevodnost nenadoma spremeni za več velikostnih redov. To zelo aktivno področje raziskav se imenuje fizika *močno koreliranih elektronskih sistemov*. Obravnava materiale, ki imajo zaradi svojih nenavadnih električnih, magnetnih in optičnih lastnosti potencialno veliko uporabno vrednost.

Izolatorji so tudi različni nekristalni (amorfni) materiali, ali kristali, ki smo jim z močnim dopiranjem ali obsevanjem porušili ureditev kristalne mreže. V takšnih primerih so elektroni ujeti v lokalne energijske minimume in ne morejo potovati po kristalu. Ujetju elektronov zaradi nereda rečemo *Andersonova lokalizacija*, materialom pa *Andersonovi izolatorji*.

V zelo močnem električnem polju lahko v izolatorjih pride do *dielektričnega preboja*: v močnem polju atomi ionizirajo in material nenadoma postane prevoden. To je poleg pregrevanja, učinkov ionizirajočega sevanja in mehanskih udarcev eden poglavitnih mehanizmov nastanka okvar v elektronskih napravah.

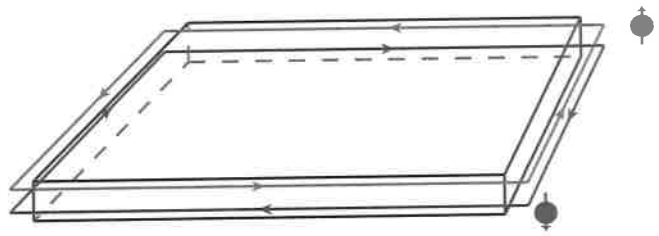
Med pasovnimi izolatorji je tehnološko najpomembnejši silicijev dioksid, SiO_2. Ima zelo veliko energijsko režo $E_g = 9\,\mathrm{eV}$, zelo visoko upornost pri sobni temperaturi in je dobro odporen proti dielektričnemu preboju (preživi električno polje nad 1×10^9 V/m). Dobi se ga preprosto z izpostavitvijo segrete silicijeve rezine kisikovi atmosferi, zato se uporablja pri izdelavi integriranih vezij.

11.7 Topološki izolatorji

Pasovni izolatorji so do nedavnega veljali za dokaj nezanimivo področje fizike. To se je nenadoma in povsem nepričakovano spremenilo z odkritjem nove družine materialov, *topoloških izolatorjev*, ki so električni izolatorji v svoji notranjosti, na površini pa so prevodni. Njihova pasovna struktura se na prvi pogled ne loči od tiste pri običajnih pasovnih izolatorjih: valenčni in prevodni pas sta ločena z energijsko režo, v kateri leži Fermijev nivo, zato je valenčni pas povsem poln, prevodni pa čisto prazen. Na površini pa obstajajo dodatna stanja, katerih energija leži v energijski reži. Ta stanja so zasedena do Fermijevega nivoja, nad njim pa so prazna, podobno kot v kovinah.

Posebna lastnost površinskih prevodnih stanj topoloških izolatorjev je tesna zveza med smerjo gibanja elektrona in njegovim spinom. Za gibanje v neki smeri ima elektron spin gor, stanja s spinom dol pa v tej smeri sploh ni. Za gibanje v nasprotni smeri pa ima elektron nujno spin dol, ustreznega stanja s spinom gor pa v tej smeri ponovno ni. Rečemo, da sta spin in gibalna količina *zaklenjeni*. To ima pomembne posledice za prevodnost. Omenili smo, da pride do upornosti zaradi sipanja: material ima končno upornost, ker se lahko elektron ob trku odbije v smeri nazaj. V topoloških izolatorjih pa se elektron na površini sploh ne more odbiti nazaj. Pri sipanju se namreč v večini primerov spin ne spremeni. Če potuje, denimo, elektron s spinom gor v desno, se ne more odbiti nazaj proti levi, ker stanje za gibanje v levo s spinom gor sploh ne obstaja! Če bi na podlagi takšnih prevodnih stanj na površinah izdelali elektronske naprave, bi se elektroni gibali balistično in pričakovali bi kvantizirano prevodnost.

Prve dvodimenzionalne topološke izolatorje so izdelali leta 2007 iz tankih plasti živosrebrovega telurida (HgTe) med plastema kadmijevega telurida (CdTe) v obliki kvantne jame (razdelek 13.4). Imajo enodimenzionalna *robna prevodna stanja*, slika 11.3. (Meje d dimenzionalnega objekta so $d-1$ dimenzionalne.)



Slika 11.3. Dvodimenzionalni topološki izolator. Vzorec je v obliki tanke plasti. V notranjosti je izolator, po njegovem robu pa se lahko gibajo prevodniški elektroni in teče tok. Elektroni s spinom dol lahko tečejo le v smeri urinega kazalca, elektroni s spinom gor pa le v obratni smeri.

Tridimenzionalne topološke izolatorje, kot sta Bi_2Se_3 in Bi_2Te_3, so odkrili leto pozneje. Poglavitna težava teh materialov je, da v resnici niso pravi izolatorji v notranjosti, ker Fermijev nivo leži znotraj valenčnega pasu. Topološki izolatorji postanejo šele z dopiranjem, s čimer pa so še vedno številne tehnične težave. Leta 2012 je bilo ugotovljeno, da je samarijev heksaborid (SmB_6) topološki izolator tudi čist.

Če se skupaj stakne topološki izolator in superprevodnik ter vzpostavi ravno pravo magnetno polje, na stiku dobimo zelo eksotične kvazidelce, *Majoranove fermione*, ki so sami sebi antidelci. To je trenutno eno izmed najbolj »vročih« področij raziskav v fiziki trdne snovi. Navdušenje izvira tudi iz možnosti, da bi se takšni kvazidelci uporabili v kvantnem računalništvu za izdelavo *topoloških kvantnih računalnikov*, ki bi bili v veliki meri imuni na motnje iz okolice, kar bi rešilo velike težave z dekoherenco. Leta 2012 so poročali o prvem možnem eksperimentalnem opažanju tovrstnih Majoranovih fermionov.

Poskusimo ob koncu vsaj približno pojasniti, zakaj so nekateri materiali topološki izolatorji ter od kod pravzaprav izvira takšno ime. Topologija je matematična disciplina, ki se ukvarja z lastnostmi matematičnih objektov, ki se ne spreminjajo ob gladkih transformacijah. Preprost primer so telesa v tridimenzionalnem prostoru, gladke transformacije pa so spremembe oblike, pri katerih telesa nikdar ne prelomimo ali prerežemo, lahko ga le pregnetemo (kot plastelin). Topološko torej ni razlike med kocko, kroglo, valjem in krožnikom, saj lahko iz kepe gline vsako izmed navedenih oblik dobimo iz poljubne druge z gnetenjem. Po drugi strani pa ne moremo iz krožnika zgolj z gnetenjem narediti skodelice z ročajem: očitno bi morali dodati luknjo, kar pa ni gladka transformacija. Obstaja torej druga družina, v katero bi poleg skodelice z ročajem lahko prišteli še torus (svitek, torej ameriški krof z luknjo), lopar za tenis, ipd., torej telesa z eno luknjo. Izkaže se, da je število lukenj topološka lastnost, ki jo topologi imenujejo *rod*. Rodu ne moremo spremeniti z gladko transformacijo. Takšna števila imenujemo *topološke invariante*. Na dosti bolj abstrakten način lahko obravnavamo tudi topološke lastnosti pasovne strukture materialov. Objekt, ki ga obravnavamo, so kar zasedena (valenčna) stanja materiala, gladke transformacije pa so vse spremembe lastnosti materiala, pri katerih material ostane izolator (torej ima od nič različno energijsko režo E_g). Gladke transformacije so lahko spremembe sestave vzorca, spremembe pritiska, vzpostavitev različnih zunanjih polj, ipd. Ob tem se spreminja pasovna struktura, tako stanja znotraj posameznih pasov, kot tudi razmiki med različnimi pasovi. Edini pogoj za gladke transformacije je, da ob spremembah ves čas velja $E_g > 0$. Korak, pri katerem postane $E_g = 0$ in se energijska reža zapre ter material postane kovinski, je ekvivalenten rezanju in ni dovoljen. Matematiki so že pred desetletji izdelali topološko klasifikacijo takšnih abstraktnih objektov. V najbolj preprostem primeru dvodimenzionalnih topoloških izolatorjev se izkaže, da obstajata natanko dve družini z različno topološko invarianto: $+1$ pri trivialnih izolatorjih (večina izolatorjev in polprevodnikov) in -1 pri topoloških izolatorjih. Med trivialne izolatorje prištevamo tudi prazen prostor (vakuum). Sedaj pa nastopi bistven razmislek: na robu topološkega izolatorja imamo prehod med območjem s topološkim številom -1 v območje s topološkim številom $+1$. Videli smo, da se topološke invariante lahko spremenijo samo z negladko transformacijo. V našem primeru to pomeni, da mora nekje na območju prehoda veljati $E_g = 0$, torej tam material ni izolator, temveč mora (nujno!) imeti prevodno stanje.

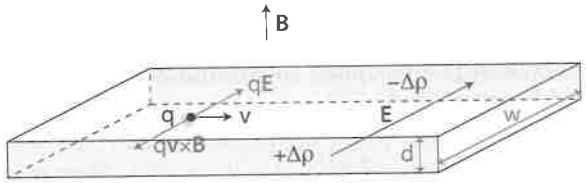
Za pionirske raziskave o topoloških pojavih v fiziki so leta 2016 Nobelovo nagrado za fiziko prejeli Kosterlitz, Haldane in Thouless.

12

Polprevodniške naprave

Naprave izdelane iz dopiranih polprevodniških materialov se uporabljajo kot pasivne in aktivne komponente v elektronskih vezjih, kot občutljivi senzorji ter kot optični elementi.

12.1 Hallova sonda



Slika 12.1. Hallov pojav za nosilce naboja q.

Električni tok opišemo kot gibanje nosilcev naboja q s povprečno potovalno hitrostjo $\mathbf{v}$. Nabiti delci v magnetnem polju $\mathbf{B}$, usmerjenim prečno na smer toka, čutijo Lorentzevo silo $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, ki je pravokotna na smer toka in na smer polja. Trajektorije nabojev so zato ukrivljene. Ker je prečna velikost vodnika omejena, in ker nosilci naboja materiala ne morejo zapustiti, se naboj nabere na robu vodnika: na eni strani nastane presežek nabojev, na drugi strani pa primanjkljaj, torej naboj z nasprotnim predznakom. Podobno kot v kondenzatorju zato nastane električno polje. Orientirano je v prečni smeri, tako kot Lorentzeva sila, vendar deluje v nasprotno smer. V stacionarnem stanju se sili izenačita:

$$qvB = qE, \quad \text{torej} \quad vB = E. \tag{12.1}$$

Gostoto toka zapišemo kot $j = qvn$, kjer je n gostota nosilcev naboja. Tok je

$$I = jwd, \tag{12.2}$$

kjer sta w in d prečni dimenziji vodnika (d v smeri zunanjega magnetnega polja, w v smeri notranjega električnega). Električno polje zapišemo kot $E = V_H/w$, če je V_H napetostna razlika med obema roboma vodnika. Dobimo zvezo

$$V_H = wE = wvB = w\frac{j}{qn}B = \frac{I}{d}\frac{B}{qn}. \tag{12.3}$$

V_H se imenuje Hallova napetost (Hall, 1879). Običajno se navaja *Hallov koeficient* R_H, definiran z

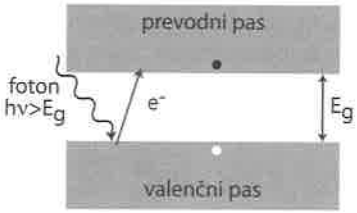
$$R_H = \frac{E}{jB} = \frac{1}{qn}, \tag{12.4}$$

ki je specifična lastnost materiala. V izrazu za R_H nastopa q, torej predznak nosilcev naboja. S to metodo lahko ločimo med polprevodniki p, kjer so poglavitni nosilci naboja vrzeli v valenčnem pasu in je $q = +e_0$ ter R_H pozitiven, ter polprevodniki n, kjer so poglavitni nosilci naboja elektroni v prevodnem pasu in je $q = -e_0$ ter R_H negativen. Zgolj na podlagi meritev prevodnosti med elektroni in vrzelmi namreč ne moremo ločiti, saj se v izrazu za specifično prevodnost $\sigma = e_0(n_e\beta_e + n_v\beta_v)$ oba prispevka pojavita z enakim predznakom.

Hallov pojav se uporablja v senzorjih magnetnega polja. Sodobne *Hallove sonde* so drobne polprevodniške naprave, ki v istem ohišju združujejo tako sam senzor kot tudi ustrezne ojačevalce ter analogno-digitalne pretvornike, tako da je izhodni signal že kar digitalna vrednost. Poleg očitne uporabe za merjenje gostote magnetnega polja se jih uporablja za zaznavanje bližine (v kombinaciji z magnetom), merjenje položaja in hitrosti ter zaznavanje električnega toka. Najdemo jih v trdih diskih (nadzor hitrosti vrtenja plošč), avtomobilih (sistem proti blokiranju koles pri zaviranju), pametnih telefonih (elektronski kompas), ipd.

12.2 Fotoprevodnik

Prevodnost polprevodnika lahko spreminjamo z osvetlitvijo. Če ima foton dovolj energije, lahko vzbudi elektron iz valenčnega pasu v prevodnega: nastane par elektron-vrzel, slika 12.2. Ta proces se imenuje tudi *notranji fotoefekt*, saj elektron ni izbit iz materiala kot pri pravem fotoefektu, temveč je le premeščen iz enega pasu v drugega. Oba nastala kvazidelca, tako elektron kot vrzel, prispevata k prevodnosti. Pojav



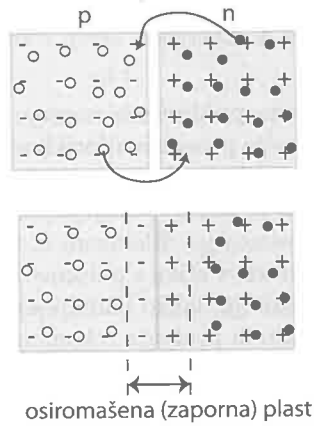
Slika 12.2. Absorpcija fotona vodi k tvorbi para elektron-vrzel: večja gostota nosilcev naboja v osvetljenem polprevodniku poveča prevodnost.

se imenuje *fotoprevodnost* (Smith, 1873). Upornost fotoprevodnika pada z intenziteto osvetlitve: tipične neosvetljene naprave imajo upornost okoli 1 MΩ, osvetljene pa okoli 100 Ω. Pri intrinzičnih fotoprevodnikih vzbujamo elektrone preko celotne energijske reže iz valenčnega v prevodni pas, pri ekstrinzičnih fotoprevodnikih pa uporabimo vzbujanje iz dopantskih nivojev v valenčni ali prevodni pas; ta tip fotoprevodnikov je bolj primeren za sevanja z nizkoenergijskimi fotoni, vendar moramo detektor ohladiti na nizke temperature, da preprečimo termično vzbujanje nosilcev naboja. Fotouporniki so zelo poceni, preprosti in robustni, zato se veliko uporabljajo (merilniki svetlobe v fotoaparatih, alarmne naprave, senzorji toplote v izstrelkih, starejši fotokopirni stroji, itd.). Najbolj uporabni materiali so Si, Ge, PbS, CdS, Sn. V PbS je $E_g = 2{,}42\,\mathrm{eV}$, kar je v vidnem spektru, v CdS pa je $E_g = 0{,}41\,\mathrm{eV}$, kar je v infrardečem delu spektra. So pa relativno počasni: odzivni čas pri vklopu je okoli 10 ms, pri izklopu pa okoli sekunde.

12.3 Dioda

Polprevodniške diode so *usmerniški elementi*, torej elektronske komponente z dvema priključkoma, ki imajo v eni smeri bistveno večjo električno prevodnost kot v drugi smeri. Sestavljene so iz polprevodnika, ki ima območji z različnim dopiranjem: eno tipa p, drugo tipa n. Mejna plast med območjema se imenuje *stik* ali *spoj p-n*.

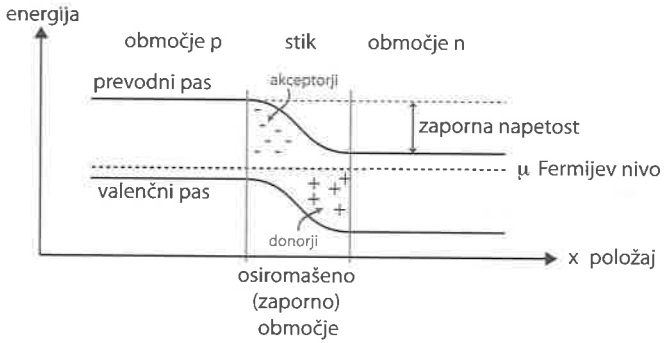
Oglejmo si lastnosti stika. Predstavljajmo si, da staknemo različno dopirana polprevodnika (slika 12.3). V polprevodniku n so večinski nosilci naboja elektroni v prevodnem pasu, medtem ko je elektronov v prevodnem pasu na strani p zelo malo. Zaradi razlike v gostoti bo del elektronov iz območja n oddifundiral v območje p. Tam srečajo vrzeli, s katerimi se rekombinirajo. Nasprotno velja, da so v polprevodniku p večinski nosilci naboja vzeli v valenčnem pasu, medtem ko je vrzeli v valenčnem pasu na strani n zelo malo. Del vrzeli zato oddifundira v polprevodnik n, kjer srečajo



Slika 12.3. Nastanek osiromašene plasti v bližini stika p-n. Polni črni krogci predstavljajo elektrone, prazni vrzeli, plusi in minusi pa so ioni dopantov.

elektrone, s katerimi se rekombinirajo. Posledica tega je, da je v bližini stika na strani n primanjkljaj elektronov v prevodnem pasu, ostane pa presežek pozitivno nabitih donorskih ionov, ki ustvarijo prostorski naboj. Na strani p pa je, nasprotno, primanjkljaj vrzeli v valenčnem pasu in presežek negativno nabitih akceptorskih ionov, ki ustvarijo nasprotno predznačen prostorski naboj. Nastane električno polje imenovano *notranje* ali *vgrajeno polje*, ki deluje v takšni smeri, da preprečuje nadaljnjo difuzijo elektronov iz n v p stran, ter vrzeli iz p v n stran. Difuzija nosilcev naboja zaradi gradienta njihove koncentracije, ter tok, ki ga poganja notranje električno polje, se izenačita in vzpostavi se stacionarno stanje. Mejno območje v bližini stika se imenuje *osiromašena* ali *zaporna plast*, ki je tipično debela kakšen mikron. Zaporna napetost (potencialna razlika, ki ustreza notranjemu polju) je približno enaka energijski reži E_g, ki je okoli 1 V za silicij.

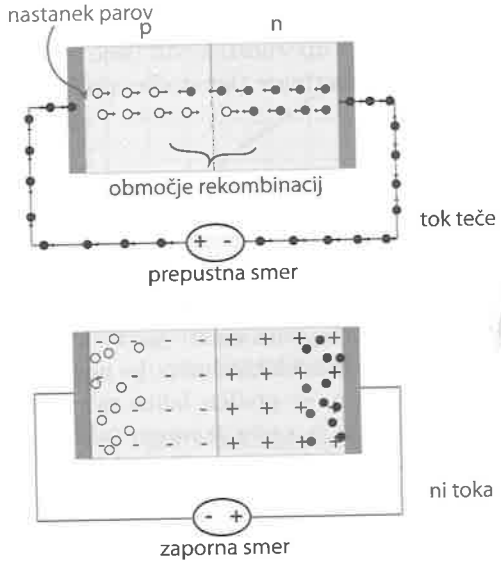
Pasovno strukturo v stiku p-n po vzpostavitvi ravnovesnega stanja prikažemo shematsko z energijskim diagramom, slika 12.4. Daleč od stika imata polprevodnika povsem enak pasovni diagram, kot kadar sta ločena. V območju stika so nivoji ukrivljeni zaradi prostorskega naboja in vgrajenega električnega polja. Kemijski potencial je v ravnovesju povsod enak.



Slika 12.4. Energijski nivoji v stiku p-n.

Dioda je asimetrična glede na priključeno zunanjo napetost. Oglejmo si najprej primer, ko priključimo na območje p pozitivni priključek napajalnika. Na stiku med kovinsko elektrodo in polprevodnikom tipa p nastajajo pari elektron-vrzel. Vrzeli, večinski nosilci naboja na strani p, zlahka potujejo proti stiku, elektroni pa tečejo po žici na pozitivni priključek generatorja. Elektroni iz negativnega priključka generatorja potujejo na kovinsko elektrodo v stiku s polprevodnikom tipa n. Ker so elektroni na območju n večinski nosilci naboja, lahko nadaljujejo pot proti stiku. Na območju stika se vrzeli in elektroni srečajo in pride do rekombinacije. S tem je električni krog sklenjen: teče lahko znaten tok (slika 12.5, zgoraj).

Ko pa priključimo na območje p negativni priključek napajalnika, je situacija drugačna. Iz mejnega območja oddifundirajo še dodatni nosilci naboja in zaporna plast se poveča. Ker je gostota nosilcev naboja v tem primeru zelo majhna, skozi stik teče zelo majhen tok (slika 12.5, spodaj).

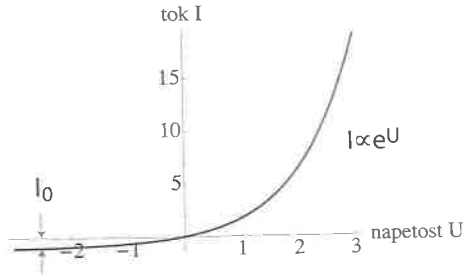


Slika 12.5. Usmerniške lastnosti diode so posledica asimetrije stika p-n.

Karakteristika diode se imenuje *Shockleyeva enačba diode* in se zapiše kot

$$I = I_0 \left(e^{\frac{eU}{k_B T}} - 1 \right). \tag{12.5}$$

Tok I_0 se imenuje *tok nasičenja diode* ali *zaporni tok diode*. Eksponentna odvisnost se pojavi, ker z zunanjo napetostjo premikamo pasove na strani p glede na stran n, zato se v skladu s Fermi-Diracovo porazdelitveno funkcijo ustrezno spremenijo gostote. Pogosto se uporablja grob približek, pri katerem privzamemo, da ima dioda v eni smeri upornost nič, v drugi pa neskončno upornost.



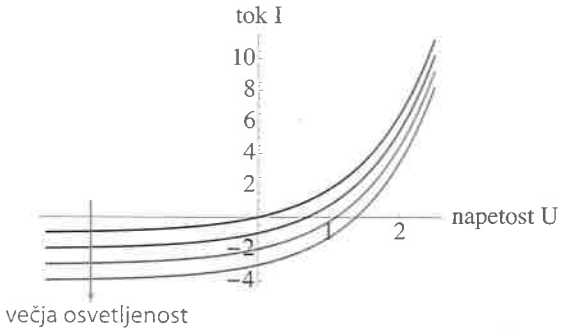
Slika 12.6. Idealizirana karakteristika $I(U)$ diode po Shockleyu.

Pri konstantni zunanji napetosti U je tok I močno odvisen od temperature, zato lahko na ta način merimo temperaturo. Drugi pogosti elementi za merjenje temperature so *termočleni*, kjer izkoristimo spremembe kontaktne napetosti med kovinami v

odvisnosti od temperature na mestu stikov, *uporovni termometri* in *termistorji*, kjer izkoristimo temperaturno odvisnost upornosti kovin (zelo fino navitje iz platine, niklja ali bakra) oziroma nekovinskih materialov (keramike, polimeri).

12.4 Fotodioda

Fotodioda je dioda, pri kateri lahko skozi prepustno okno osvetlimo stik p-n. Običajno jo priključimo v zaporni smeri in merimo zaporni tok diode. Ta je odvisen od osvetljenosti približno linearno. Teoretičen opis je podoben kot pri fotoupornikih: vpadni fotoni z energijo $\hbar\omega$ povzročijo tvorbo para elektron-vrzel, če je $\hbar\omega > E_g$. Če par nastane v osiromašeni plasti, bo vgrajeno električno polje nosilce naboja potegnilo stran od stika proti zunanjim elektrodam, še preden lahko pride do rekombinacije. Tako nastane *fototok*. Celotni zaporni tok je vsota *temnega toka*, ki teče skozi neosvetljeno diodo zaradi termičnih fluktuacij, ter fototoka, slika 12.7.

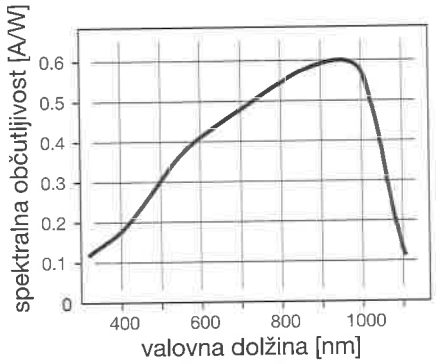


Slika 12.7. Karakteristika $I(U)$ fotodiode pri različni osvetljenostih: večja osvetljenost povzroči večji tok v zaporni smeri.

Če je potrebna visoka hitrost delovanja, se uporabljajo nekoliko bolj zapletene *diode PIN*, v katerih je med območjema tipa p in n še debela plast intrinzičnega (i) polprevodnika. Svetloba se absorbira predvsem v intrinzični plasti, ki je debela tudi do 10 mm, če želimo doseči popolno absorpcijo. Pri diodah PIN je temni tok zelo majhen.

Občutljivost diode opišemo s *kvantnim izkoristkom*, razmerjem med pretočenim nabojem (izraženim v osnovnih nabojih) in številom absorbiranih fotonov. Izkoristek je pogosto zelo velik, tudi do 90 %. Pogosto se navaja tudi *spektralna občutljivost*, to je razmerje med električnim tokom skozi fotodiodo in močjo vpadne svetlobe, izraženo v enotah A/W, v odvisnosti od valovne dolžine vpadne svetlobe. Primer za silicij je na sliki 12.8.

Silicije fotodiode omogočajo meritev svetlobe v območju valovnih dolžin približno od 200 nm do 1100 nm. Zgornjo mejo določa energijska reža, ki znaša 1,1 eV pri Si. Spodnja meja pa je posledica dejstva, da se visokoenergijski fotoni absorbirajo še preden pridejo do občutljivega območja.



Slika 12.8. Spektralna občutljivost Si fotodiode.

Fotodiode se uporabljajo kot senzorji svetlobe v pogonih CD, DVD in BD, sprejemnikih za infrardeče daljinske upravljalnike in sprejemno-oddajnih modulih (transceiverjih) za optične komunikacije. Drugi pogosto uporabljeni senzorji svetlobe poleg fotoprevodnikov in fotodiod so še *fotopomnoževalke*, ki so izjemno občutljive in se jih lahko uporablja za štetje posameznih fotonov, in *senzorji CCD*.

12.5 Svetleča dioda

V *svetleči diodi* (angl. light-emitting diode, LED), ki jo na vir priključimo v prevodni smeri, se elektroni in vrzeli rekombinirajo na stiku p-n, presežek energije pa izhaja iz naprave v obliki fotonov, torej svetlobe. *Kvantni izkoristek* sodobnih svetlečih diod je izjemno visok: večina rekombiniranih parov ustvari foton namesto toplote.

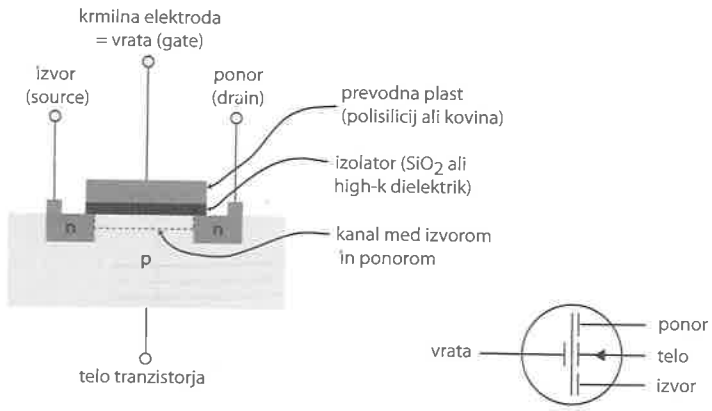
Prve praktično uporabne diode v vidnem delu spektra (rdeče) je izdelal Holonyak iz GaAs leta 1962. Prve modre svetleče diode z visoko svetilnostjo so bile narejene iz InGaN (1994). Bele LED, ki svetijo z mešanico barv, ki daje vtis bele barve, so se pojavile malo za tem. Na tem področju obstaja ekvivalent Moorovega zakona, imenovan Haitzev zakon, po katerem svetilnost LED narašča za faktor dva vsaka tri leta, torej eksponentno, ta trend pa traja že od 60. let. Za razvoj modrih LED je bila podeljena Nobelova nagrada za fiziko leta 2014.

Svetlobna učinkovitost je razmerje med svetlobnim tokom in električno močjo, ki se troši na svetilu. Meri se v enotah lm/W. Volframove žarnice imajo okoli 15 lm/W, fluorescentne cevi pa okoli 100 lm/W. Na področju svetlečih diod je bil razvoj v zadnjem desetletju zelo hiter: od 20 lm/W leta 2000, do okoli 200 lm/W v letu 2012. Za primerjavo: maksimalna teoretično možna vrednost za idealno belo svetlobo je 251 lm/W.

12.6 Tranzistor na učinek polja

Tranzistor je polprevodniška naprava z vsaj tremi priključki, ki lahko ojača in preklaplja električne signale, zato je ključna aktivna komponenta vseh sodobnih elektronskih naprav. Napetost (ali tok) na enem izmed priključkov krmili tok skozi par drugih priključkov. Krmilna napetost (ali tok) je veliko manjša od krmiljene, torej transitor deluje kot *ojačevalnik*. Tranzistor so iznašli leta 1948 Bardeen, Brattain in Shockley, za kar so leta 1954 prejeli Nobelovo nagrado.

Danes se v glavnem uporablja *tranzistorje na učinek polja* (angl. field-effect transistor, FET). Ti povsem prevladujejo v digitalni elektroniki za izdelavo tranzistorskih logičnih vrat v integriranih vezjih. Pogosto so izdelani s tehnologijo MOS (metal-oxide-semiconductor), zato se imenujejo tudi MOSFET. Ta izraz ni najbolj ustrezen, saj danes M ni vedno kovina in O ni vedno oksid. Včasih zato srečamo izraz IGFET (angl. insulated-gate FET), torej FET z električno izoliranimi vrati.



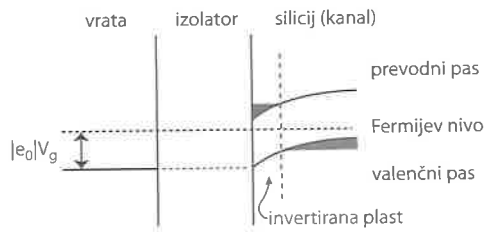
Slika 12.9. n-kanalni FET. Levo: zgradba, desno: elektrotehniški simbol.

Elektrode FET se imenujejo *izvor* (source), *ponor* (drain) in *krmilna elektroda* ali *vrata* (gate), slika 12.9. Poleg tega je na napetost potrebno priključiti tudi telo (substrat) tranzistorja; v večini FET je telo priključeno na izvor v napravi sami.

Telo tranzistorja je, denimo, tipa p, izvor in ponor pa sta področji tipa n. Tako dobimo dve zaporedni p-n diodi, ki sta priključeni v nasprotnih smereh, zato po preprosti teoriji idealiziranih diod skozi takšno napravo električni tok sploh ne more teči: ne glede na polarizacijo izvor in ponora je ena izmed diod priključena v zaporni smeri. Krmilna elektroda je priključena na prevodno plast, ki je od območja p ločena z zelo tanko izolatorsko plastjo.

Za izdelavo FET se kot substrat še vedno največ uporablja silicij. Izbira izolatorskega materiala je zelo pomembna. Nekoč se je uporabljal silicijev dioksid SiO_2, ki je naravna izbira, saj lahko takšno plast izdelamo z oksidacijo substrata samega. Za nadaljnjo miniaturizacijo pa SiO_2 ni bil primeren, saj ima nizko dielektrično konstanto ($\epsilon = 3{,}9$), zato je bilo potrebno stanjšati debelino plasti, kar pa vodi k neželenemu toku elektronov zaradi kvantnomehanskega tunelskega pojava (to postane težava pri debelinah pod 2 nm). Intel od leta 2007 v svojih procesorjih kot dielektrik uporablja material »high-k« na osnovi hafnija, ki ima večjo dielektrično konstanto. Kot prevodna plast vrat se je na začetku uporabljal Al, kasneje največ *polikristaliničen silicij* (polisilicij), danes pa znova kovine.

Krmilna elektroda in telo tranzistorja tvorita kondenzator, zato napetost na vratih ustvari električno polje, ki prodre v polprevodnik in preuredi nosilce naboja. Območje tranzistorja pod elektrodo med izvorom in ponorom se imenuje *kanal*. Če je napetost na vratih negativna, elektroda pritegne pozitivne nosilce naboja, torej se le poveča gostota vrzeli v kanalu. Kanal ostane neprevoden. Če pa je napetost na vratih pozitivna, elektroda pritegne negativne nosilce naboja, in pri zadosti veliki napetosti postanejo v kanalu elektroni večinski nosilci: rečemo, da pride do spremembe (*inverzije*) tipa polprevodnika iz tipa p v n, slika 12.10. P-n spojev tedaj ni več (ni dveh diod), imamo le tri območja tipa n in skozi kanal lahko steče znaten električni tok. Kanal je tedaj prevoden. Z napetostjo na vratih torej krmilimo prevodnost med izvorom in ponorom skozi kanal. Opisani tranzistor se imenuje n-kanalni FET, ker je v prevodnem stanju kanal tipa n. Obstajajo tudi p-kanalni FET, ker so vloge območij p in n zamenjane; ti tranzistorji prevajajo, če je na vratih negativna napetost.

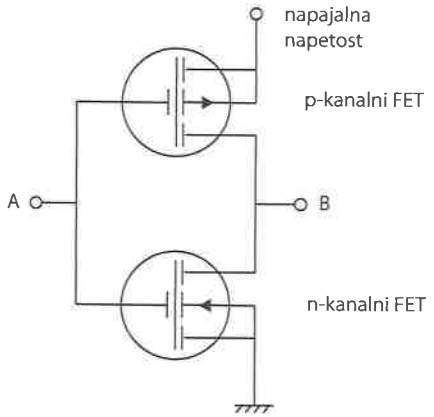


Slika 12.10. Nastanek invertirane plasti večinskih negativnih nosilcev naboja (kanal n) v polprevodniku tipa p zaradi napetosti na krmilni elektrodi (vratih).

Razvoj gre trenutno v smeri FET z večjim številom vrat (angl. multiple gate FET ali MuGFET), kar je ena izmed strategij za doseganje čedalje večje stopnje integracije vezij. Pri MuGFET je kanal obdan z večjim številom vrat, zato je kanal lahko krajši in neželeni tokovi v neprevodnem stanju so zmanjšani, hkrati pa so možni večji tokovi v prevodnem stanju. To omogoča manjšo porabo energije ter hitrejše delovanje. Najbolj poznani izvedbi MuGFET sta FinFET in tri-gate, kjer tranzistorji niso ravninski temveč trorazsežni.

12.7 Tehnologija CMOS

CMOS (angl. complementary MOS) je poglavitna tehnologija izdelave vseh vrst digitalnih logičnih integriranih vezij, ki se uporabljajo v računalnikih in drugih digitalnih elektronskih napravah. Ime izvira iz uporabe komplementarnih parov p-kanalnih in n-kanalnih tranzistorjev MOSFET za izdelavo logičnih vrat. Primer vrat NE v tehniki CMOS je prikazan na sliki 12.11. Ko je na vhodu A napetost, ki ustreza logični 1,



Slika 12.11. Vrata NE v tehniki CMOS.

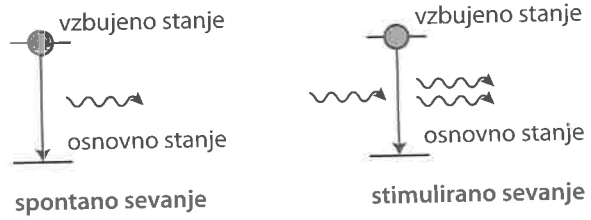
je n-kanalni tranzistor odprt, p-kanalni pa zaprt. Izhod B je zato na potencialu zemlje, ki ustreza logični 0. Obratno, ko je na vhodu A napetost, ki ustreza logični 0, je odprt p-kanalni tranzistor, n-kanalni pa je zaprt. Izhod B je tedaj na potencialu napajalne napetosti, ki ustreza logični 1. Tako torej dosežemo inverzijo logične vrednosti, $B = \bar{A}$. V obeh stanjih je eden izmed tranzistorjev v zaprtem stanju, zato med napajalnim priključkom in zemljo v idealnem primeru ne teče električni tok in ni nobene disipacije. Majhna poraba energije je poglavitna prednost logike CMOS v primerjavi z drugimi tranzistorskimi implementacijami digitalne logike. Dodatna odlika je še možnost zelo visoke gostote tranzistorjev na integriranem vezju.

Do disipacije pride le kratek čas med preklapljanjem. Čas preklopa je okoli nanosekunde, kratkostični tok pa teče le del tega časa, tedaj ko je napetost na vhodu A ravno na pol poti med logičnima vrednostima 0 in 1, torej ko sta odprta oba tranzistorja. Nekaj toka steče med preklapljanjem tudi na prevodno plast vrat, saj imamo opravka s kondenzatorjem, ki ga moramo napolniti ali izprazniti. Tudi to je vir disipacije. Poraba je sorazmerna s frekvenco delovanja. Zaradi visokih hitrosti preklapljanja in velikega števila tranzistorjev v sodobnih zmogljivih procesorjih je njihova poraba energije razmeroma visoka. Izboljševanje zmogljivosti s čedalje višjimi frekvencami ni več smotrno in vrednosti so se v veliki meri ustalile že pred desetletjem. Zaradi tega se danes izdeluje večjedrne procesorje s čedalje več jedri.

12.8 Laser

12.8.1 Stimulirano sevanje

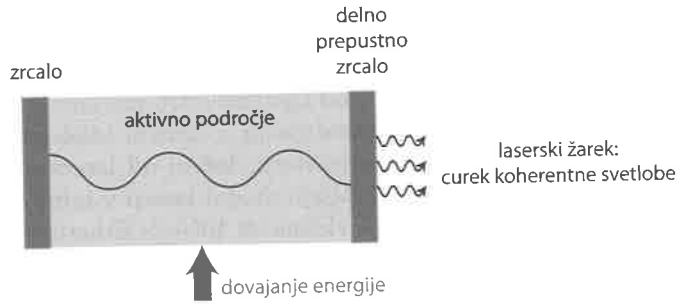
Laser je naprava, v kateri se svetloba ojači v procesu imenovanem *stimulirano sevanje*. Od tod tudi ime: laser je kratica za angleški izraz »light amplification by stimulated emission of radiation«, torej ojačanje svetlobe s stimuliranim sevanjem. Stimulirano sevanje je kvantnomehanski pojav, ki ga je odkril Einstein leta 1917 med teoretičnim



Slika 12.12. Spontano in stimulirano sevanje ob prehodu kvantnega sistema iz vzbujenega v osnovno stanje. Pri stimuliranem sevanju ima dodatni izsevani foton isto fazo, polarizacijo in smer kot začetni foton, s katerim je kvantni sistem interagiral.

proučevanjem interakcij med atomi in sevanjem (fotoni). Do njega pride, ker so fotoni bozonski delci in jih je lahko večje število v istem kvantnem stanju. Če je atom v vzbujenem stanju in interagira s fotonom, katerega energija je natanko enaka razliki energij med vzbujenim in osnovnim stanjem ($h\nu = E_2 - E_1$), potem lahko sistem preide v osnovno stanje in pri tem izseva dodatni foton, katerega energija, faza, polarizacija in smer potovanja so povsem enaki staremu. Stari in novi foton sta namreč v istem kvantnem stanju, katerega zasedenost se zgolj spremeni z N na $N+1$. To se razlikuje od procesa *spontanega sevanja*, pri katerem atom sam od sebe preide v osnovno stanje ter izseva foton, ki ima sicer enako energijo $h\nu$, vendar povsem poljubno fazo, polarizacijo in smer potovanja. Do optičnega ojačanja pride, če imamo veliko število atomov v višjem stanju, tako da prisotnost fotonov povzroča nastanek še dodatnih fotonov, namesto da bi se fotoni pretežno absorbirali z vzbujanjem atomov iz osnovnega v vzbujeno stanje. Rečemo, da je potrebna *inverzija zasedbe*. Takšno stanje je močno neravnovesno in v napravo moramo dovajati energijo.

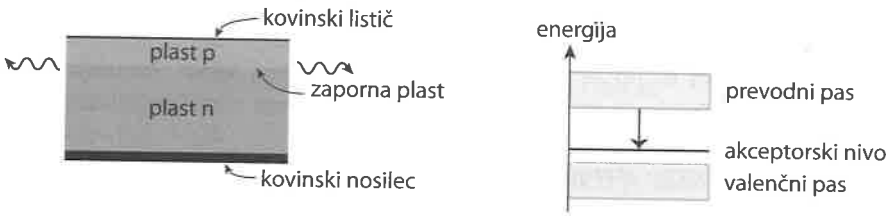
Potrebno je tudi, da izsevani fotoni ostanejo v laserju zadosti dolgo, da povzročijo stimulirano sevanje dodatnih fotonov, preden zapustijo napravo. To dosežemo z optičnim resonatorjem iz vzporednih zrcal, med katerima se svetloba odbija in nastane stoječe valovanje, slika 12.13. Eno izmed zrcal je šibko prepustno: tam izvira laserski žarek. Svetloba, ki nastane v laserju, je zelo *koherentna* v času, kar tudi pomeni, da je svetloba zelo enobarvna (torej ima zelo ostro določeno frekvenco). Posledica



Slika 12.13. Shematski prikaz zgradbe laserja.

koherence v času je tudi velika koherenca v prostoru, zato z laserji zlahka opravljamo interferenčne poskuse v valovni optiki (glej razdelek 1.15 o Youngovem eksperimentu in 6.2 o uklonu svetlobe). Pomembno je omeniti tudi zelo visoko vzporednost laserskega žarka. Laserji lahko delujejo *zvezno* (svetijo ves čas) ali *pulzno* (delujejo intervalno, po vsakem blisku pa se mora naprava ohladiti).

12.8.2 Polprevodniški laser



Slika 12.14. Polprevodniška laserska dioda s homospojem p-n, ki predstavlja aktivni medij. Levo: shematski prikaz zgradbe laserja. Desno: energijski diagram z označenim prehodom, ki je ojačan.

Diodni laser (ali *laserska dioda*) je sestavljen iz n dopiranega kristala GaAs na kovinskem nosilcu, slika 12.14. Na površini se izdela zelo tanko področje p. Energijo se dovaja z električnim tokom, ki se ga poganja v prevodni smeri. S tem nastane obrnjena zasedba v zaporni plasti. Sevanje nastane s stimuliranimi prehodi elektronov z dna prevodnega pasu na akceptorske nivoje v p plasti. Kot optični resonator se uporabita kar sprednja in zadnja stran kristala, ki sta fino zbrušeni in polirani, tako da sta vzporedni. Dodatna zrcala niso potrebna, ker je na meji kristala sprememba lomnega količnika takšna, da se odbije skoraj vsa svetloba nazaj v kristal. Če spontano sevanje ni zadosti intenzivno za nastanek laserskega ojačanja, se diodni laser obnaša podobno kot svetleča dioda. Poglavitna razlika je torej v tem, da LED temelji na spontanem sevanju, laser pa na stimuliranem sevanju. Ena izmed pomembnih prednosti diodnih laserjev pred ostalimi vrstami laserjev je, da ne potrebujejo visokih napajalnih napetosti.

Ker lahko svetlobni tok iz laserskih diod izjemno hitro moduliramo z električnim tokom (tja do 2 GHz), jih s pridom uporabljamo v optični telekomunikaciji. Nad 2 GHz se uporabljajo elektro-optični modulatorji, ločeni od laserske diode. Za optične računalniške mreže se največ uporabljajo diodni laserji v infrardečem območju (denimo 850 nm in 1310 nm za svetlobna vlakna za 10Gb/s Ethernet), in sicer površinsko sevajoči laserji VCSEL (iz angl. vertical-cavity surface-emitting laser, izgovarja se »viksel«). Diodni laserji se uporabljajo tudi kot laserska kazala, v napravah CD, DVD in BD (glej razdelek 16.3), laserskih tiskalnikih, merilnikih razdalj, itd. Sodobne močnostne laserske diode so primerne celo za industrijsko rezanje materialov.

12.8.3 Koherenca

Merilniki svetlobe merijo njeno intenziteto, ki je sorazmerna s kvadratom električnega polja E^2. Pri interferenčnih poskusih na merilnik padata dve valovanji, katerih polji se seštevata. Merimo torej količino, sorazmerno z

$$|E_1 + E_2|^2 = (E_1^* + E_2^*)(E_1 + E_2) = |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2|E_1||E_2|\cos(\phi_1 - \phi_2), \quad (12.6)$$

če velja $E_1 = |E_1|e^{i\phi_1}$ in $E_2 = |E_2|e^{i\phi_2}$. Če se ϕ_1 in ϕ_2 hitro naključno spreminjata, bo časovno povprečje kosinusnega člena enako nič. Tedaj je izmerjena intenziteta kar enaka vsoti intenzitet posameznih valovanj:

$$I = I_1 + I_2. \quad (12.7)$$

Takšna valovanja imenujemo *nekoherentna*, interference ni. Če pa je fazna razlika $\phi_1 - \phi_2$ konstantna v času (v trajanju meritve oz. v času, ki ustreza *odzivnemu času* instrumenta), potem velja

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\cos(\phi_1 - \phi_2). \quad (12.8)$$

Takšna valovanja imenujemo *koherentna*: seštevajo se amplitude in interferenca je možna.

Eksperimentalno določamo, v kolikšni meri sta neki valovanji koherentni, ravno preko tega, v kolikšni meri je viden interferenčni člen $2\sqrt{I_1 I_2}\cos(\phi_1 - \phi_2)$, saj lahko I_1 in I_2 izmerimo neodvisno, potem pa preverimo *vidnost* interferenčnega člena. Svetloba iz žarnice z žarilno nitko iz volframa (termična sijalka) je zelo nekoherentna. Svetloba iz laserjev pa je izjemno koherentna in je zelo primerna za interferenčne meritve.

13

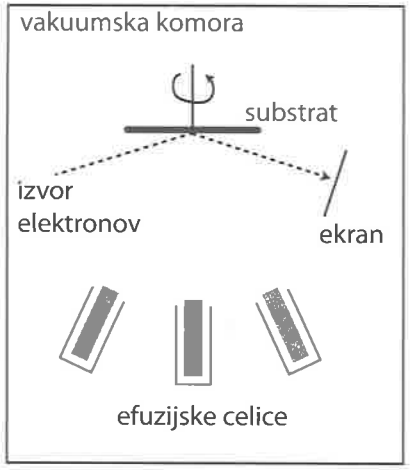
Heterostrukture

Heterostruktura je naprava, izdelana iz različnih polprevodniških materialov. Stik med različnima polprevodnikoma, *heterospoj*, nudi številne možnosti uporabe v elektroniki in optiki, saj se za razliko od stika med različno dopiranima območjema istega polprevodnika, *homospoja*, v heterospoju srečata polprevodnika z različnima energijskima režama in različnima dielektričnima konstantama. Možno je neodvisno nadzorovati elektrone in vrzeli: v heterospoju je lahko, denimo, energijska pregrada za elektrone bistveno nižja kot za vrzeli in na drugo stran prednostno prehajajo elektroni. Stik materialov z različno dielektrično konstantno pa lahko služi kot optični element, na primer kot zrcalo.

13.1 Izdelava heterostruktur

Heterostrukture gojimo z *epitaksijo*, to je postopkom, pri katerem nadzorovano rastejo kristalne plasti ena nad drugo, pri čemer se atomi nove plasti pokrivajo z atomi predhodne. Ime pride iz grščine: epi (nad), taxis (na urejen način). Gojenje poteka preko kemijskih reakcij z izhodiščnim materialom v tekoči ali plinski fazi (chemical vapor deposition, CVD) ali pa z uporabo usmerjenega snopa molekul (molecular beam epitaxy, MBE). Z epitaksijo se lahko goji tanke kristalne plasti materialov, ki sicer sploh ne tvorijo kristalov.

Pri izdelavi heterostruktur je zaželeno, da imata oba materiala podobno mrežno konstanto (velikost kristalne celice), sicer na območju stika nastane veliko defektov, ki imajo kvaren vpliv na delovanje naprave. Ker se elektronske naprave med delovanjem segrevajo, morajo biti usklajene tudi termične lastnosti, kot je temperaturni raztezek materiala. Raziskanih je bilo ogromno kombinacij materialov, primerne pa so le nekatere, denimo GaAs in AlAs. Atomi Ga se lahko v poljubnem razmerju nadomestijo z atomi Al, kar omogoča nastavljanje energijske reže v zlitini $Al_xGa_{1-x}As$ med 1,4 eV in 2,2 eV. Največ fleksibilnosti nudijo zlitine iz štirih elementov, kot je $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$, v katerih lahko neodvisno določamo mrežno konstanto in energijsko režo.



Slika 13.1. Shematski prikaz naprave za epitaksijo s snopom molekul. Iz efuzijskih celic lahko sočasno naparevamo različne materiale. Substrat je segret in se suka, kar omogoča enakomerno in homogeno rast. Med naparevanjem lahko rast plasti natančno nadzorujemo z napravo, ki meri uklon elektronov.

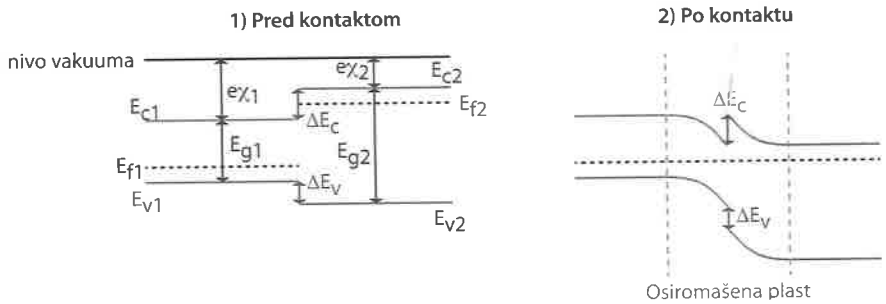
MBE, slika 13.1, omogoča izdelavo poljubnih zaporedij različno debelih plasti, ki so izjemno čiste. Prehodi med plastmi so lahko atomsko ostri: kemijska sestava se lahko spremeni iz ene atomske plasti v drugo. Možno je tudi zvezno spreminjanje parametrov: dosežemo lahko, da energijska reža narašča linearno znotraj debelejše plasti. Za MBE je potreben ultravisoki vakuum. Izvorni material raztalimo v efuzijski celici. Efuzija je proces izhajanja plina skozi zelo majhno luknjico. Nastali curek atomov ali molekul usmerimo proti segretemu substratu, na površini katerega se uredijo v novo kristalno plast. Celice imajo lopute, s katerimi lahko tok atomov nenadoma prekinemo, ali pa pretok spreminjamo zvezno z uravnavanjem temperature v izvoru.

Metoda CVD je bolj primerna za množično proizvodnjo naprav. V komori izpostavimo eno ali več rezin substrata hlapnim izhodiščnim kemikalijam, ki na površini reagirajo ali razpadejo in pri tem odložijo atome, ki se vgradijo v rastočo plast. Stranske produkte se sproti odstranjuje s prepihovanjem komore.

Izdelava heterostruktur je draga in tehnološko zahtevna zaradi občutljivih aparatur, strogih zahtev po čistoči kemikalij in prisotnosti zelo strupenih plinov. Imajo pa heterostrukture izjemne lastnosti, ki v nekaterih primerih odtehtajo težave: v hitri elektroniki in elektrooptiki so brez konkurence. Heterostrukture so tudi ključna komponenta polprevodniških laserskih diod, sončnih celic in elektronskih naprav nanoskopske velikost, *nanostruktur* ali *nanonaprav*. Za razvoj heterostruktur sta leta 2000 prejela Nobelovo nagrado Kroemer in Alferov.

13.2 Heterospoj p-n

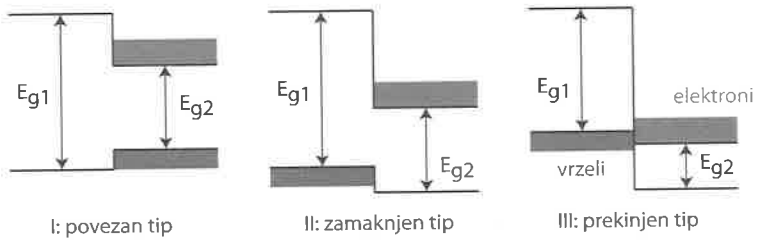
Obravnava heterospojev je podobna analizi homospojev. Na mejnem območju pride do difuzije večinskih nosilcev naboja na drugo stran in vzpostavi se vgrajeno električno polje. To lahko ponovno prikažemo z energijskim diagramom, slika 13.2. Bistvena novost v primerjavi s homospojem so nagli skoki v spodnjem robu prevodnega in zgornjem robu valenčnega pasu na območju spoja.



Slika 13.2. Energijski diagram heterospoja p-n.

Glede na medsebojne lege energijskih rež polprevodnikov ločimo tri tipe heterospojev (slika 13.3):

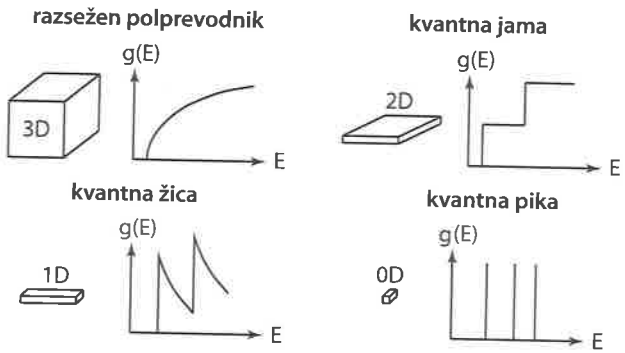
- Tip I: povezan tip. Energijska reža enega materiala povsem prekriva režo drugega materiala. Nosilci naboja se pretežno nahajajo na tisti strani stika, ki ima manjšo režo.
- Tip II: zamaknjen tip. Energijski reži se delno pokrivata. Različni nosilci naboja so pretežno na različnih straneh stika. Ta tip spoja omogoča rekombinacijo in nastanek fotonov z energijo, ki je manjša od energijskih rež obeh polprevodnikov.
- Tip III: prekinjen tip. Energijski reži se ne prekrivata. Kot v tipu II so različni nosilci naboja na različnih straneh stika, posebnost pa je, da se valenčni pas materiala, kjer so proste vrzeli, prekriva s prevodnim pasom materiala, kjer so prosti elektroni.



Slika 13.3. Različni tipi heterospojev p-n. Osiromašena plast ni narisana.

13.3 Nizkodimenzionalne strukture

Najbolj opazen pojav pri zmanjševanju velikosti materialov in naprav proti nanometerskemu območju je kvantizacija elektronskih stanj zaradi ujetja elektronov v omejen prostor. Dimenzionalnost lahko zmanjšujemo v korakih: od trorazsežnih preko ravninskih in linearnih do točkasih sistemov. Pri tem se gostota stanj spreminja kvalitativno, kot je shematsko prikazano na sliki 13.4, kar odpira možnost za izdelavo nanostrukturiranih naprav z edinstvenimi lastnostmi.



Slika 13.4. Vpliv dimenzionalnosti na gostoto stanj v nanostrukturah.

13.3.1 Dvodimenzionalni sistemi

Pomembna lastnost dvodimenzionalnih sistemov je stopničasta oblika gostote stanj. Obravnava je podobna kot v trorazsežnih sistemih (razdelek 10.2). V ravnini vpeljemo periodične robne pogoje z razdaljo l. Naj bo v sistemu N elektronov. Za dva elektrona z različnim spinom potrebujemo površino $(2\pi/l)^2 = (2\pi)^2/S$ recipročnega prostora (ki je zdaj dvodimenzionalna ravnina). Privzamemo, da je energija odvisna samo od razdalje od izhodišča recipročnega prostora. Ploščina kroga, ki obsega vsa zasedena stanja, je

$$\frac{N}{2}\frac{(2\pi)^2}{S} = \pi k_F^2, \tag{13.1}$$

torej

$$k_F = (2\pi n)^{1/2}, \tag{13.2}$$

kjer je $n = N/S$ *ploskovna gostota* elektronov. Energija najvišjih zasedenih stanj je

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} 2\pi n. \tag{13.3}$$

Gostoto stanj določimo z odvajanjem izraza

$$N(E) = \frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{S}{2\pi}E, \tag{13.4}$$

in dobimo

$$g(E) = \frac{\mathrm{d}N(E)}{\mathrm{d}E} = \frac{m_e}{\pi\hbar^2}S = \text{konst.} \tag{13.5}$$

Gostota stanj torej ni odvisna od energije. Če obstaja več pasov, ima skupna gostota stanj stopničasto obliko (slika 13.4).

13.3.2 Enodimenzionalni sistemi

V eni dimenziji ima gostota stanj oster vrh na dnu pasu. Dokažimo to! Vpeljemo periodične robne pogoje v eni dimenziji z razdaljo l. Za dva elektrona potrebujemo dolžino $2\pi/l$ recipročnega prostora (ki je zdaj enodimenzionalen). Ker je energija odvisna samo od razdalje od izhodišča, zapolnjujemo daljico s središčem v izhodišču. Velja

$$\frac{N}{2}\frac{2\pi}{l} = 2k_F, \tag{13.6}$$

torej

$$k_F = \frac{\pi}{2}n, \tag{13.7}$$

kjer je $n = \frac{N}{l}$ *dolžinska gostota* elektronov. Energija najvišjih zasedenih stanj je

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}(\pi n/2)^2. \tag{13.8}$$

Zapišemo

$$N(E) = l\frac{\sqrt{2m_e}}{\hbar}\frac{2}{\pi}\sqrt{E}, \tag{13.9}$$

in dobimo gostoto stanj

$$g(E) = \frac{\mathrm{d}N(E)}{\mathrm{d}E} = l\frac{\sqrt{2m_e}}{\hbar}\frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{E}} = l\frac{2}{h}\sqrt{\frac{2m_e}{E}}. \tag{13.10}$$

Na dnu pasu ima gostota stanj korensko divergenco: stanja so močno zgoščena pri nizkih energijah. Za $E = \frac{\hbar^2}{2m_e}k^2$ je grupna hitrost

$$v = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k} = \frac{\hbar k}{m_e} = \sqrt{\frac{2E}{m_e}} \tag{13.11}$$

in sledi

$$g(E) = \frac{4l}{hv}. \tag{13.12}$$

Ta zanimiva povezava med hitrostjo elektronov in njihovo gostoto stanj, ki velja samo v eni dimenziji, je pomembna pri obravnavi prevodnosti nanoskopskih elektronskih naprav v razdelku 14.1.

13.4 Kvantna jama

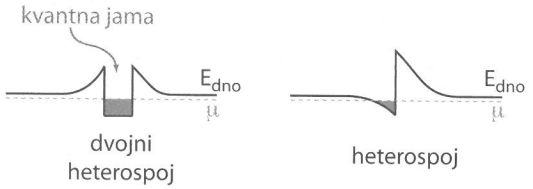
Kvantna jama je naprava, v kateri so nosilci naboja ujeti v eni smeri, v kateri imajo diskretna energijska stanja, v prečni smeri pa se lahko prosto gibljejo v dvodimenzionalni ravnini in imajo kontinuum stanj. Valovna funckija se zapiše kot

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{i(k_x x + k_y y)}\phi_n(z), \tag{13.13}$$

torej kot produkt ravnega vala v ravnini in vezanega stanja v pravokotni smeri.

Kvantne jame so pomembne kot laboratorij za raziskovanje *dvodimenzionalnih elektronskih plinov*. Plast plina je debela zgolj kakšnih 10 nm, ploskovna gostota elektronov pa je tipično $10^{11}\,\mathrm{cm}^{-2}$.

Izdelamo jih lahko kot *dvojne heterostrukture*, pri katerih je sredinska plast izjemno tanka, slika 13.5, levo. Primerno potencialno jamo dobimo tudi na enojnem heterospoju, kjer je potencial trikotne oblike, slika 13.5, desno. Pogosto se uporablja kombinacija čistega GaAs in n-dopiranega AlGaAs. V tem primeru je elektronski plin ujet v čisti nedopirani plasti GaAs, kjer je gibljivost izjemno visoka. Ta postopek, imenovan *modulacijsko dopiranje*, omogoča hitrejše delovanje elektronskih naprav in manjšo porabo. Primer so hitri tranzistorji HEMT (high electron mobility transistor), ki imajo frekvence delovanja tudi več sto GHz, se pravi stokrat več kot MOSFET. Uporablja se jih v sprejemnikih za satelitsko televizijo, mobilnih telefonih, radarjih, ipd.



Slika 13.5. Energijska diagrama dveh tipov kvantnih jam: dvojni heterospoj (levo), navadni heterospoj (desno). Narisan je le spodnji rob prevodnega pasu in kemijski potencial.

13.5 Kvantna žica

Kvantna žica je naprava, v kateri so nosilci naboja ujeti v dveh dimenzijah in se lahko prosto gibajo le vzdolž preostale dimenzije. Tako dobimo dolge kvantne kanale, ki jih lahko uporabimo za prenašanje naboja: po njih teče *enodimenzionalen elektronski plin*. Ohmov zakon ne velja, prevajanje je balistično. V idealnem primeru vsak kanal prispeva k skupni prevodnosti en kvant prevodnosti, $G_0 = 2e_0^2/h$.

Možen način za izdelavo kvantnih žic je njihovo gojenje v zarezah na nagubanih površinah. Material za izdelavo žice se napari iz izvora, podobno kot pri epitaksiji, žice pa nastanejo spontano, če so izpolnjeni določeni pogoji. Temu rečemo *samoorganizacija*, *samourejanje* ali *pristop od spodaj navzgor*: namesto da skušamo kontrolirano sestaviti dele v celoto, zgolj ustvarimo pogoje, da se komponente spojijo kar same, ko sistem teži k stanju z najnižjo možno energijo.

Kvantne žice lahko izdelamo tudi tako, da v vzorcu, v katerem je pod površino kvantna jama z dvodimenzionalnim elektronskim plinom, na površini izdelamo prevodne elektrode. V teh vzpostavimo ustrezne negativne napetosti, da v območjih pod površino, ki so tik pod elektrodami, dosežemo tolikšen dvig potenciala za elektrone, da so ti od tam izrinjeni in je njihovo gibanje omejeno na ozek enodimenzionalni trak. Na ta način elektrostatsko definiramo obliko naprave. Z napetostjo lahko vplivamo na širino žice.

13.6 Kvantna pika

Kvantna pika je naprava, v kateri so nosilci naboja ujeti v vseh treh prostorskih smereh (včasih rečemo, da je to nič-dimenzionalna struktura). Izdelamo jih lahko na podobne načine kot kvantne žice.

Kvantna pika je neke vrste *umetni atom*. Ujeti elektroni se uredijo v lupine, ki so drugačne kot v pravih atomih, saj je tudi oblika potencialne jame drugačna in sicer bolj podobna škatlasti končno globoki potencialni jami. Z napetostjo na zunanjih elektrodah lahko določimo število ujetih elektronov. Kot pravi atomi imajo kvantne pike diskreten spekter stanj. Zaradi tega so energijske razlike prehodov točno določene in dosežemo lahko sevanje svetlobe s točno določeno valovno dolžino, za razliko od razsežnih polprevodnikov s pasovi, kjer je spekter zvezen.

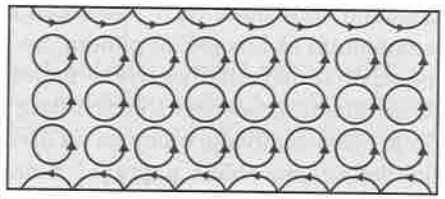
13.7 Kvantni Hallov pojav

V močnem magnetnem polju (reda 10 T) in pri nizkih temperaturah (pod 1 K) se elektroni v kvantni jami obnašajo povsem drugače kot v režimu klasičnega Hallovega pojava. Namesto linearne odvisnosti Hallove upornosti od magnetnega polja je potek stopničast z univerzalnimi vrednostmi, ki so odvisne le od osnovnih fizikalnih konstant h in e_0:

$$R_H = \frac{1}{n}\frac{h}{e_0^2}, \tag{13.14}$$

kjer je n celo število. Upornost je kvantizirana. Kasneje so odkrili, da je lahko n tudi ulomek, zato danes ločimo celoštevilski in racionalni kvantni Hallov pojav. Za kvantni Hallov pojava sta bili podeljeni kar dve Nobelovi nagradi. Leta 1985 jo je prejel von Klitzing za odkritje celoštevilskega Hallovega pojava, leta 1998 pa Laughlin, Strömer in Tsui za odkritje in razlago racionalnega.

Celoštevilski Hallov pojav lahko razmeroma preprosto razložimo: elektroni se v močnem polju gibajo po majhnih krožnicah. Na robu materiala so te prekinjene, elektron se od roba »odbija« in tvori idealen enodimenzionalni kanal za prevajanje (slika 13.6). To je posledica netrivialnih topoloških lastnosti v prevodnem pasu podobno kot pri topoloških izolatorjih. Racionalni kvantni Hallov pojav je teže razumeti, saj gre za zapleten sistem z močnimi interakcijami med elektroni. Je zelo občutljiv pojav, ki ga lahko opazimo samo v izjemno čistih vzorcih pri izjemno nizkih temperaturah.



Slika 13.6. Nastanek prevodnih kanalov na robu vzorca pri kvantnem Hallovem pojavu.

Kvantni Hallov pojav omogoča določiti izjemno natančen standard za upornost. Zaradi topološkega izvora je n celo število na deset decimalk natančno; govorimo o *točni kvantizaciji*. Od 1990 je standard za električno upornost definiran preko kvanta prevodnosti. *Von Klitzingova konstanta* je

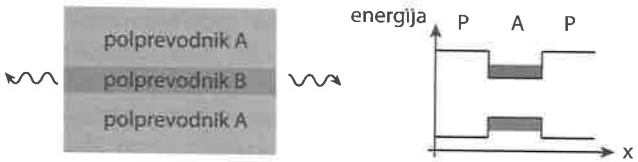
$$R_K = \frac{h}{e_0^2} = 25\,812{,}807\,443\,\Omega. \tag{13.15}$$

Tudi sicer obstaja želja, da bi bile vse merske enote definirane na podlagi osnovnih fizikalnih konstant. Izmed osnovnih enot v mednarodnem sistemu enot SI (meter, kilogram, sekunda, amper, kelvin, mol, kandela) danes le še masa temelji na artefaktu, masi *prakilograma* iz zlitine Pt in Ir, ki je shranjen v trezorju v Sèvresu pri Parizu, kjer ima sedež Mednarodna pisarna za uteži in mere. To se bo kmalu spremenilo, ko bo stopil v veljavo nov dogovor, po katerem bodo vse merske enote definirane z osnovnimi fizikalnimi konstantami iz atomskega sveta.

13.8 Laserji iz heterostruktur

Laserji, ki temeljijo na homospojih, se med delovanjem močno grejejo, zato jih je potrebno hladiti ali pa jih lahko uporabljamo zgolj v pulznem načinu (vsakemu blisku sledi daljše mirovanje). Rešitev je leta 1970 našel Alferov: izdelal je laser iz heterostruktur, ki deluje pri sobni temperaturi v zveznem načinu.

Laser iz dvojne heterostrukture je sestavljen iz aktivnega območja z manjšo energijsko režo med območjema z večjo (stik tipa I, denimo GaAs in $Al_xGa_{1-x}As$), slika 13.7. Nosilci naboja so ujeti v aktivnem območju, kjer prihaja do stimuliranega sevanja.



Slika 13.7. Polprevodniški laser na osnovi dvojne heterostrukture. Levo: shematski prikaz zgradbe laserja. Desno: pasovni diagram. P: pasivno območje, A: aktivno območje.

Tudi svetloba je zaradi različnih dielektričnih konstant materialov ujeta prav v aktivnem območju, kjer se koherentno ojača. Izgube v pasivnih območjih (od koder izhajajo nosilci naboja, ki jih injeciramo v aktivno območje) so zelo majhne. Takšni laserji so majhni, robustni, razmeroma preprosti in poceni.

Če je osrednja plast zelo tanka, se obnaša kot kvantna jama. Učinkovitost takšnega laserja je veliko večja, ker je gostota stanj ujetih nosilcev naboja visoka na robovih valenčnega in prevodnega pasu, zato imamo veliko elektronov z energijami, ki so ravno ustrezne za prehode s stimuliranim sevanjem. Laser se da izdelati tudi iz kvantnih žic in iz plasti urejenih kvantnih pik; v teh primerih je možno doseči še višjo učinkovitost.

14

Nanotehnologija

Predpona nano v metričnem sistemu enot pomeni faktor 10^{-9}, torej milijardinko. Izvira iz grške besede nanos, ki pomeni škrat. Pojma *nanotehnologija* in *nanoznanost* nista natančno opredeljena, sta pa zadnje čase zelo popularna. Pogosto se nanašata na naprave in objekte, ki so velikosti največ kakšnih 100 nm. Pod to zelo ohlapno definicijo bi k nanotehnologiji lahko prišteli že sodobno polprevodniško tehnologijo, čeprav gre pri tej le za naravno nadaljevanje tradicionalnih postopkov izdelave, le na čedalje manjši velikostni skali in z nekaj prilagoditvami, vendar brez radikalno novih rešitev. Boljša definicija je, da gre pri nanotehnologiji za obravnavo naprav in objektov, ki imajo posebne in po možnosti zanimive lastnosti prav zaradi svoje majhne velikosti. Tu gre pogosto za različne kvantizacijske pojave (nastanek stoječih valovanj elektronov, torej diskretnih spektrov vzbuditev namesto zveznih pasov), kvantno koherentno prevajanje električnega toka, interferenčne pojave ter za učinke, ki so posledica tega, da površinska plast pri zelo majhnih telesih ni zanemarljivo majhna v primerjavi z notranjostjo. Razmerje med površino in prostornino je namreč obratno sorazmerno s polmerom, torej delež atomov na površini narašča napram celotnemu številu atomov, če zmanjšujemo velikost naprave.

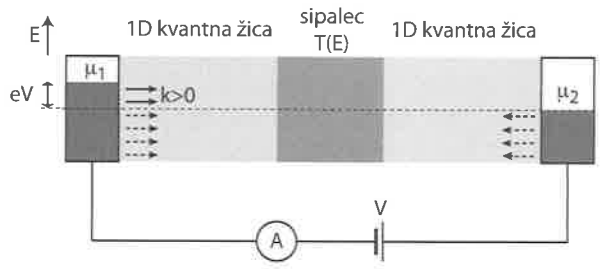
Mi si bomo v nadaljevanju ogledali predvsem vpliv kvantnih pojavov na transportne lastnosti nanoskopskih elektronskih naprav.

14.1 Prevodnost nanoskopskih naprav

V razdelku 10.8 smo že na kratko opisali kvantno koherentno prevajanje ter povezavo med transmisivnostjo T in prevodnostjo naprave,

$$G = G_0 T, \tag{14.1}$$

kjer je $G_0 = 2e_0^2/h$ kvant prevodnosti. Oglejmo si to zdaj bolj podrobno. Izračunali bi radi tok, ki teče iz levega vodnika v desnega. Vodnike nanoskopskih dimenzij si lahko predstavljamo kot enodimenzionalne kvantne žičke.



Slika 14.1. K izpeljavi izraza za tok skozi nanoskopsko napravo.

Tok zapišemo kot $I = qv\rho_{1D}$, kjer je q naboj delcev, v je njihova hitrost in ρ_{1D} dolžinska gostota (število elektronov na enoto dolžine vodnika). V primeru enodimenzionalnega vodnika sta tako gostota stanj kot hitrost odvisni od energije. Tok zato izračunamo kot integral po energijah (glej tudi sliko 14.1)

$$I = \int_{\mu_2}^{\mu_1} qv(E)\frac{1}{2}g_{1D}(E)\mathrm{d}E, \tag{14.2}$$

kjer je $g_{1D}(E)$ dolžinska gostota stanj v eni dimenziji. Integriramo od kemijskega potenciala μ_2 v desnem priključku do kemijskega potenciala μ_1 v levem, pri čemer smo predpostavili, da je $\mu_1 > \mu_2$. Razlog za izbiro meja je sledeč: iz levega v desni priključek lahko potujejo le elektroni iz zasedenih stanj v levem priključku v nezasedena stanja v desnem priključku. Faktor 1/2 v izrazu je potreben zato, ker k toku prispevajo le elektronska stanja, kjer elektron potuje v desno, v gostoti stanj pa so upoštevana tako potujoča valovanja v levo kot v desno. Upoštevamo, da je $g_{1D}(E) = 4/hv$ [po enačbi (13.12)], in dobimo

$$I = \int_{\mu_2}^{\mu_1} qv(E)\frac{1}{2}\left(\frac{4}{hv(E)}\right)\mathrm{d}E = \frac{2q}{h}(\mu_1 - \mu_2) = \frac{2e_0^2}{h}V. \tag{14.3}$$

V zadnjem koraku smo upoštevali, da je razlika kemijskih potencialov sorazmerna s priključeno napetostjo, $\mu_1 - \mu_2 = qV$, ter da je naboj elektrona $q = -e_0$. Dobimo torej

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e_0^2}{h}. \tag{14.4}$$

Zdaj smo tudi zares izpeljali izraz za *kvant prevodnosti*, $G_0 = 2e_0^2/h$. Prevodnost je enaka ne glede na to, kako dolga je naprava, zato ne moremo smiselno definirati specifične prevodnosti σ. Govorimo lahko le o prevodnosti G, ki je skupna lastnost celotne nanoskopske naprave.

V splošnem lahko nanonapravo smatramo kot oviro, ki jo opišemo s funkcijo transmisivnosti $T(E)$. Po Landauerju, ki je prvi poudaril, da je na nanoskopski skali potrebno prevodnost obravnavati kot kvantnomehanski problem sipanja elektronov, se ta pristop imenuje *Landauerjev formalizem*. Za nizko napetost velja v splošnem

$$G = \frac{2e_0^2}{h}T(\mu), \tag{14.5}$$

kjer μ označuje kemijski potencial, ki je v limiti nizkih napetosti enak v obeh priključkih: $\mu_1 - \mu_2 = qV \to 0$, torej $\mu_1 = \mu_2 \equiv \mu$. Pomembna je torej verjetnost za prepuščanje elektronov pri Fermijeven nivoju.

Če sta priključni žici malo širši, obstaja večje število možnih kvantnih stanj v prečni smeri, ki so relevantna za prevajanje toka. Rečemo, da imamo večje število vzporednih *kanalov*. Landauerjevo enačbo moramo razširiti tako, da seštejemo po vseh kanalih:

$$G = \frac{2e_0^2}{h}\sum_n T_n(\mu), \tag{14.6}$$

Transmisivnosti v različnih kanalih so različne. V makroskopskem svetu je bolj preprosto: imamo en sam kanal z dano specifično prevodnostjo, zato je celotna prevodnost kar sorazmerna s presekom vodnika. V nanoskopskem svetu pa imamo večje število neodvisnih kanalov. Klasični (makroskopski) primer je podoben reki, z različno široko in globoko strugo, kvantni (mikroskopski) pa večjemu številu vzporednih potočkov enake širine in globine, na katerih so lahko različno dvignjene zapornice (prepustnosti T_n), pri čemer povsem vzdignjena zapornica pomeni polno prevodnost G_0.

Zanimivo vprašanje je, zakaj dobimo v primeru balističnega prevajanja s $T = 1$ končno upornost $h/2e_0^2$. Upornost namreč pomeni, da se energija nekje pretvarja v toploto. V balističnem prevodniku elektron nikjer v notranjosti naprave ne odda energije. O tem so se fiziki veliko spraševali v 80. letih. Eksperimenti so naposled pokazali, da so enačbe vendarle pravilne. Energija elektronov se pretvori v toploto daleč stran od aktivnega dela nanonaprave, in sicer v zunanjem makroskopskem kontaktu (pravokotnika na sliki 14.1). Količina $h/2e_0^2$ je torej *kvantizirana kontaktna upornost*, ki nastane na spoju med makroskopsko elektrodo in mikroskopsko žičko, saj lahko le elektroni iz nekaterih stanj velike elektrode prodrejo v majhno žičko, vsi drugi pa se odbijejo, ne da bi v žičko sploh lahko vstopili. Zanimivo je tudi, kaj vse to pomeni za splošen T. Velja

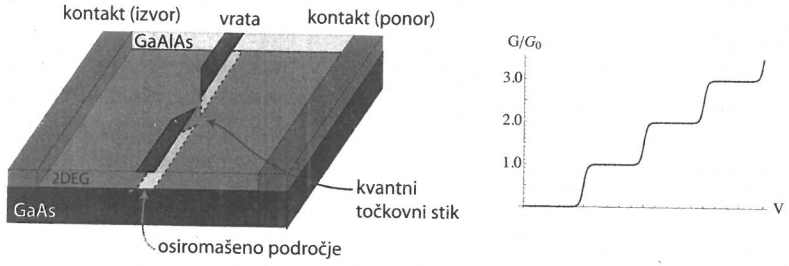
$$\text{upornost} = \frac{h}{2e_0^2}\frac{1}{T} = \frac{h}{2e_0^2}\left(1 + \frac{1-T}{T}\right) = \frac{h}{2e_0^2} + \frac{h}{2e_0^2}\frac{R}{T}, \tag{14.7}$$

kjer je R reflektivnost (odbojnost), saj je $R + T = 1$. Prvi člen v izrazu je kvantizirana kontaktna upornost, drugi člen pa je upornost zaradi odboja na potencialnih pregradah znotraj nanoskopske naprave. Če je $T = 1$, drugi člen odpade. Če pa je $T = 0$, postane drugi člen neskončno velik.

14.2 Kvantni točkovni stik

V kvantni jami z dvodimenzionalnim elektronskim plinom s pregrado ločimo dve območji. V pregradi naredimo prehod, ožino, katere efektivno širino lahko zvezno spreminjamo z napetostjo na elektrodi (vratih) na površini naprave, slika 14.2 levo. Takšni ožini rečemo *kvantni točkovni stik*. V dobrem približku se elektroni v ožini obnašajo, kot bi bili v enodimenzionalni žici, skozi katero letijo balistično, zato je

to lepa ilustracija kvantiziranega prevajanja, ki ga moramo opisati z Landauerjevo formulo. Prevodnost kot funkcija napetosti na vratih ima obliko stopničaste krivulje: vsaka stopnica ustreza odprtju novega prevodnega kanala, slika 14.2 desno. Pri končni temperaturi stopnice niso ostre, temveč zabrisane. V nekaterih primerih opazijo, da ima prva stopnica namesto G_0 višino $0{,}7\,G_0$: to se imenuje anomalija 0,7, ki še ni povsem pojasnjena. V prisotnosti magnetnega polja prevodnost narašča s pol nižjimi stopnicami po $e_0^2/h = (1/2)G_0$: kanali se odpirajo ločeno za spin gor in spin dol.

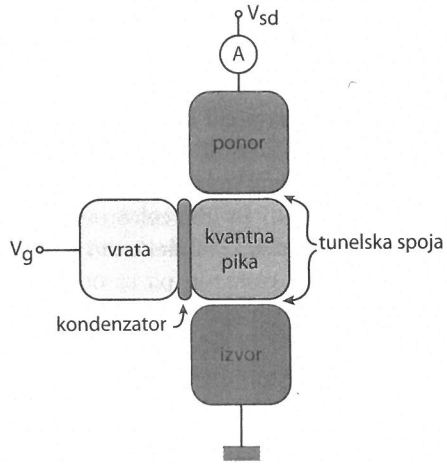


Slika 14.2. Kvantni točkovni stik. Levo: shematski prikaz naprave. Desno: prevodnost v odvisnosti od napetosti na vratih.

14.3 Enoelektronski tranzistor

Oglejmo si napravo, ki dobro ponazori posebnosti elektronskih naprav nanoskopske velikosti, v katerih moramo upoštevati, da so nosilci naboja diskretni (posamezni elektroni). Imenujemo jo *enoelektronski tranzistor* (angl. single-electron transistor, SET). Njegov ključni sestavni del je kvantna pika, v katero se lahko ujame manjše število elektronov. Shematsko je SET prikazan na sliki 14.3: osrednji otoček je priključen na dve elektrodi, izvor in ponor, s katerimi lahko skozi potencialne pregrade (tunelske bariere) izmenjuje elektrone. Pogostost takšnih prehodov elektrona skozi oviro s tuneliranjem lahko zvezno nastavljamo z napetostmi na dodatnih elektrodah, ki določajo višino in širino potencialnih pregrad. Kadar je pogostost prehodov majhna, je večino časa v notranjosti kvantne pike neko točno določeno število elektronov, N, bolj redko pa kakšen elektron več ali manj, $N \pm 1$, še redkeje pa dva več ali manj, $N \pm 2$. Z dodatno elektrodo, vrati, pa lahko premikamo potencialno energijo kvantne pike. Zasedena so vsa tista stanja, katerih energija je nižja od kemijskega potenciala. S spreminjanjem napetosti na vratih torej spreminjamo povprečno zasedenost N. Kvantna pika je umetni atom, pri katerem z obračanjem potenciometra spreminjamo njegovo vrstno število Z.

Prevodnost naprave med izvorom in ponorom je močno odvisna od tega, kako so elektronski nivoji v kvantni piki poravnani s kemijskim potencialom v elektrodah. Ugotoviti moramo verjetnost za prehod elektronov z energijo μ skozi napravo iz ene elektrode v drugo. V splošnem, ko nivoji niso poravnani, je transmisivnost majhna, saj ustreza tuneliranju elektrona skozi celotno napravo, kar je malo verjetno, saj smo ugotovili, da je verjetnost za tuneliranje eksponentno padajoča funkcija širine prepovedanega območja.



Slika 14.3. Shematski prikaz kvantne pike kot elektronske naprave.

Za razumevanje lastnosti SET moramo torej poznati energijski spekter vezanih stanj v notranjosti kvantne pike. Pomembno vlogo igra pojav imenovan *Coulombska blokada*. Elektroni so namreč električno nabiti in se med seboj odbijajo. Če želimo v kvantno piko dodati elektron, to zato stane dodatno energijo, povezano s kapaciteto kvantne pike, ki jo lahko smatramo kot majhen kondenzator. Naboj na kondenzatorju je podan z $e = CU$, kjer je C kapaciteta konfenzatorja (za ploščati kondenzator z dvema elektrodama ploščine S, ki sta razmaknjeni za razdaljo l, med njima pa je snov z dielektrično konstanto ϵ, velja na primer $C = \epsilon\epsilon_0 S/l$). Ker je napetost definirana kot razmerje med električnim delom in pretočenim nabojem, med polnjenjem kondenzatorja z nabojem opravimo delo $A = \int U\,\mathrm{d}e = \int (e/C)\,\mathrm{d}e = e^2/2C$, za natanko toliko pa se poveča energija kondenzatorja, če zanemarimo izgube zaradi upornosti.

Imamo torej dva prispevka k energiji, enega zaradi odboja med elektroni, drugega zaradi električnega potenciala na vratih. Celotna energija N elektronov v kvantni piki pri napetosti na vratih V_g je torej

$$E(N, V_g) = E_C N^2 - \alpha e_0 V_g N = E_C (N - N_g)^2 + \text{konst.}, \tag{14.8}$$

kjer je $E_C = e_0^2/2C$, α pa je neka konstanta, ki pove, kako se napetost na vratih pozna v spremembi potenciala v notranjosti kvantne pike. Količino N_g smo vpeljali kot

$$N_g = \frac{\alpha e_0 V_g}{2E_C}. \tag{14.9}$$

To je napetost na vratih, preračunana v ustrezne brezdimenzijske enote. Odvisnost $E(N, V_g)$ kot funkcija N ima obliko parabole. Če naj bo pika prevodna, dodajanje elektrona ne sme stati dodatne energije, torej mora biti izpolnjena enačba

$$E(N+1, V_g) = E(N, V_g). \tag{14.10}$$

Enačba je izpolnjena le pri določenih vrednostih V_g. Tedaj je naprava prevodna in govorimo o *enoelektronskem tuneliranju*. Hitro se lahko prepričamo, da ima enačba $E(N+1, V_g) = E(N, V_g)$ rešitev, če je N_g polcelo število (1/2, 3/2, 5/2, itd.). Pri teh napetostih na vratih ima enoelektronski tranzistor maksimalno prevodnost, med temi vrhovi pa je prevodnost zelo majhna, kar je posledica Coulombske blokade.

Pogosto opazimo, da v območjih Coulombske blokade pri zelo nizkih temperaturah prevodnost močno naraste. To se zgodi za lihe celoštevilske vrednosti N_g. Tedaj je v kvantni piki ujeto liho število elektronov: vsi elektroni razen enega zasedajo orbitale v parih s spinon gor in del, preostali elektron pa se obnaša kot drobna magnetnica. Takšna kvantna pika je zato neke vrste umetni magnetni atom, pojav povečane prevodnosti pa se imenuje *Kondov pojav*. Kondov pojav je tema številnih raziskav, ker je pomemben za boljše osnovno razumevanje skupinskih pojavov in magnetizma v snovi, saj je povečana prevodnost skozi kvantno piko posledica usklajenega gibanja velikega števila elektronov iz izvora in ponora, ki med potjo skozi napravo obračajo smer magnetnice.

Velikost in širina vrhov je odvisna od temperature, zato je takšne naprave možno uporabiti kot merilnike (termometri na Coulombsko blokado). Njihova prednost je, da lahko neposredno izmerimo absolutno temperaturo, ne da bi bila potrebna predhodna kalibracija. Tovrstne termometre imenujemo *primarni termometri*.

14.4 Sklopljene kvantne pike

Iz večjega števila kvantnih pik lahko sestavimo bolj zapletene nanostrukture, *sklopljene kvantne pike*. Če smemo kvantno piko imenovati tudi umetni atom, potem je dvojna kvantna pika gotovo umetna molekula. Potencialno pregrado med pikama lahko poljubno spreminjamo in tako raziščemo različne režime: če je pregrada visoka (šibka tunelska sklopitev, elektroni le redko skočijo iz ene pike v drugo), je to podobno ionski kemijski vezi, če pa je pregrada nizka (močna tunelska sklopitev, elektroni zelo pogosto skačejo med pikama), je to podobno kovalentni kemijski vezi. Ker višino tunelske pregrade spreminjamo z napetostjo na elektrodi, lahko z isto napravo raziščemo različne kemijske vezi, kar v kemiji seveda ni mogoče.

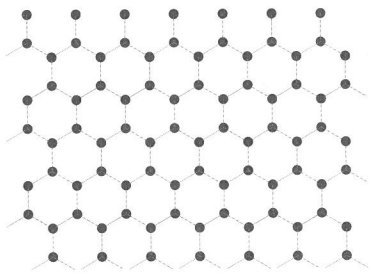
Iz zaporedno vezanih kvantnih pik lahko sestavimo napravo, ki se imenuje *črpalka za posamezne naboje*. S spreminjanjem napetosti na vratih dosežemo, da elektron iz izvora skoči najprej v prvo piko, nato v drugo, itd., končno pa v ponor. Spreminjanje napetosti je izbrano tako, da v vsakem ciklu premaknemo (prečrpamo) natanko en elektron iz leve v desno elektrodo, kar je mogoče zaradi Coulombske blokade. Napake (izpuščen elektron, dva prepuščena elektrona) so zelo redke. Če postopek ponavljamo periodično, s tem ustvarimo električni tok sorazmeren s frekvenco ponavljanja ν:

$$I = (-e_0)\nu. \tag{14.11}$$

Postopku rečemo *kvantizirano črpanje naboja*. Danes je možno uporabiti frekvence tja do GHz, kar ustreza tokom reda 100 pA. Kvantizirano črpanje bo morda v prihodnje uporabljeno za redefinicijo merske enote amper.

14.5 Grafen

Element ogljik ima različne pojavne oblike (*alotropske modifikacije*): diamant, grafit, grafen, fuleren in ogljikove nanocevke. Oglejmo si *grafen*, dvodimenzionalno mrežo pravilnih šesterokotnikov v obliki satovja, glej sliko 14.4. Z zlaganjem posameznih plasti grafena dobimo *grafit*. Če grafen vzdolžno prerežemo in zvijemo, dobimo ogljikovo *nanocevko*. Če iz grafena izrežemo ustrezno kombinacijo šesterokotnikov in to zvijemo v kroglo, dobimo *fuleren*, molekulo iz nekaj deset atomov ogljika.



Slika 14.4. Razporeditev atomov ogljika v grafenu.

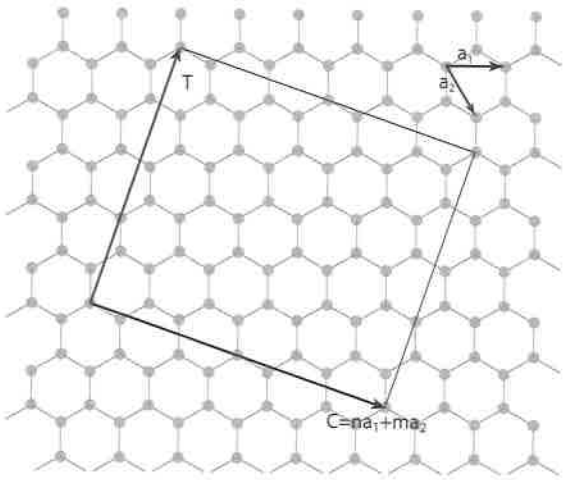
Lastnosti grafena kažejo na njegov velik potencial na številnih področjih. Je močnejši od jekla, hkrati pa upogljiv. Je prozoren za svetlobo (ena plast absorbira manj kot 3 % vpadnega toka). Je dobro električno in toplotno prevoden, če je dopiran. Je najtanjši znan material. Je tudi zelo lahek: 1 m^2 tehta zgolj 0,77 mg. Zaradi teh posebnih lastnosti nekateri imenujejo grafen »plastika 21. stoletja« in pričakujejo, da bo nekoč nadomestil silicij v elektroniki. Kljub temu pa se v praksi še ne uporablja veliko, ker metode za pripravo velikih kosov materiala še niso zadosti razvite. Majhne kosmiče se lahko pripravi tako, da se plast grafita odlušči z uporabo samolepilnega traku in deponira na ustrezno podlago – pri tem dobimo tudi plasti grafita, debele le eno plast, torej grafen.

Grafen ima zelo posebne lastnosti zaradi svoje nenavadne pasovne strukture, saj ima energija elektronov v odvisnosti od valovnega vektorja obliko stožcev, ki se stikajo ravno pri Fermijevem nivoju. Podobno lastnost najdemo pri močno pospešenih elektronih, zato lahko z grafenom opravljamo nekatere eksperimente, ki so relevantni za fiziko osnovnih delcev in kozmologijo. Za raziskave posebnih lastnosti grafena sta leta 2010 Nobelovo nagrado prejela Geim in Novoselov.

Električne lastnosti trakov, izrezanih iz grafena, so odvisne od širine in oblike robov. Visoka mobilnost nosilcev naboja bi bila uporabna, če bi iz grafena želeli izdelati žičke. Nekaj več težav bi bilo z izdelavo tranzistorjev, saj za razliko od običajnih polprevodnikov grafen sam po sebi nima energijske reže. Vprašanje pa je, kako omejujoč dejavnik so defekti v grafenski mreži, ter ali je uporaba grafena združljiva s tehnologijami za procesiranje silicija, če bi želeli integrirati grafen s CMOS. Grafen je eno izmed prioritetnih raziskovalnih področij v EU in leta 2013 je bil naznanjen desetletni projekt (FET »flagships« v okviru Obzorja 2020) v vrednosti 1 milijarde EUR za raziskave osnovnih lastnosti materiala in razvoj aplikacij.

14.6 Ogljikove nanocevke

Ogljikove nanocevke so podolgovate strukture, nekakšne makromolekule, sestavljene iz atomov ogljika v podobni konfiguraciji kot v grafitu in grafenu. V preprostem približku si jih lahko predstavljamo kot plast grafena, ki jo prerežemo v obliki ozkega dolgega traku, zavijemo in spojimo v dolgo cevko, slika 14.5. Goji se jih z metodo CVD iz ogljikovodikov v plinski fazi s pomočjo kovinskih katalizatorjev. Cevka je lahko ena sama (nanocevke z eno steno) ali večje število koncentričnih cevk (nanocevke z več stenami). Cevke z eno steno imajo premer 1 do 2 nm in so lahko izjemno dolge (trenutni rekord je 18,5 cm, kar pomeni razmerje med dolžino in premerom reda 10^8, bolj običajne dolžine pa so nekaj mikronov). Imajo izjemne lastnosti prevajanja toplote, ter izjemne mehanske in električne lastnosti: preračunano na presek močno prekašajo žičke iz kovin. Zaradi močnih vezi med atomi ogljika jih je zelo težko pretrgati. Vse te lastnosti pa v resnici veljajo le za idealne nanocevke brez defektov. Navkljub velikemu napredku na tem področju je še vedno težko izdelati večjo količino nanocevk z dobro določenimi lastnostmi na ekonomičen način.



Slika 14.5. Označba (n, m), ki pove, kako lahko plast grafena prerežemo in zvijemo v nanocevko. Vektor **C** se imenuje kiralni vektor. Vektor **T** kaže vzdolž osi nanocevke.

Zavitost cevke označimo s celima številoma n in m, ki povesta kako moramo (v mislih!) prerezati plast grafena, da lahko iz nje zvijemo takšno cevko, glej sliko 14.5. Za $n = m$, so prevodne (kovinske), sicer pa so polprevodne z energijsko režo med nekaj 100 meV in ~ 1 eV. Premer nanocevke je

$$d = \frac{a}{\pi}\sqrt{n^2 + nm + m^2}, \tag{14.12}$$

kjer je $a = 0{,}246$ nm. Preračunano na presek je gostota toka skozi nanocevko lahko tisočkrat večja kot v bakru.

Nanocevke se da pridobiti tudi iz nekaterih drugih materialov, ki tvorijo plastne materiale, denimo WS_2, MoS_2 in SnS_2. V Ljubljani je bila odkrita družina nanocevk, ki poleg atomov prehodne kovine in halkogenih elementov vsebujejo tudi jod.

Trenutno še ni pravih aplikacij, pri katerih bi se uporabljalo posamezne nanocevke in njihove posebnosti. Uporablja pa se jih že kot neurejen razsežen material v različnih kompozitih. V prihodnje bi lahko služile kot žičke za povezovanje elektronskih komponent ter kot vlakna za izjemno močno prejo.

14.7 Molekularna elektronika

Ker se miniaturizacija v polprevodniški industriji približuje atomskim in molekulskim dimenzijam, se povečuje zanimanje za možno uporabo posameznih molekul v elektroniki. Želja je, da se jih ne bi uporabljalo zgolj kot nanoskopske žičke, temveč tudi za izdelavo aktivnih komponent, kot so tranzistorji, ali pa za trajno hranjenje informacij. Preproste naprave te vrste danes že obstajajo: običajno gre za molekulo, pritrjeno med dve kovinski elektrodi, skozi katero lahko poženemo električni tok. Še vedno pa je odprto vprašanje, kako skalirati ta pristop na večje naprave, kako povezati več molekul med seboj, kako izboljšati električni stik med molekulo in kontakti, ipd.

15

Magnetizem

Kljub pospešenemu prehodu na polprevodniške medije za trajno hranjenje podatkov je večina bitov danes še vedno zapisanih z obračanjem magnetnih momentov. V tem poglavju spoznamo osnove magnetizma, pomembne magnetne materiale in nekatere naprave.

Magnetizem ima dolgo zgodovino. Omeniti je vredno, na primer, iznajdbo kompasa v 11. stoletju na Kitajskem. Sodobna znanstvena obravnava elektromagnetizma sega v 19. stoletje, ko je Oersted naključno odkril povezavo med električnim tokom in magnetnim odzivom. Faraday je opravil številne pionirske poizkuse, Gauss, Ampère in drugi so prispevali teoretično podlago, Maxwell pa je opravil veliko teoretično sintezo.

15.1 Magnetno polje

Magnetno polje ustvarijo trajni magneti in električni vodniki s tokom. Polje potem deluje z magnetno silo in navorom na druge trajne magnete in vodnike s tokom. Paličasti trajni magneti so magnetni dipoli: imajo severni in južni pol, izoliranih magnetnih monopolov pa v naravi zelo verjetno ni. Droben paličast magnet, magnetnica, postavljen v magnetno polje, definira smer polja v točki. Če takšne vektorje povežemo med seboj, dobimo *magnetne silnice*, ki so zelo priročen način za vizualizacijo vektorskih polj v prostoru.

Gostoto magnetnega polja B, definiramo preko magnetne sile, ki jo polje izvaja na vodnik dolžine l, po katerem teče tok I:

$$F = IlB. \tag{15.1}$$

Gostoto magnetnega polja merimo v enotah tesla, $1\,\mathrm{T} = 1\,\mathrm{N/Am}$. Polje lahko ustvari tudi magnetni navor: tuljava s tokom se zasuka v smeri polja. Navor je

$$\mathbf{M} = \mathbf{p}_m \times \mathbf{B}, \tag{15.2}$$

kjer je $\mathbf{p}_m$ magnetni dipolni moment tuljave (v tretjem poglavju smo isto količino označevali z $\boldsymbol{\mu}$). Energija dipolnega momenta v polju pa je $E = -\mathbf{p}_m \cdot \mathbf{B}$.

Jakost magnetnega polja H definiramo preko polja, ustvarjenega okoli dolgega ravnega vodnika, po katerem teče tok I:

$$H = \frac{I}{2\pi r}. \tag{15.3}$$

Jakost magnetnega polja merimo v enotah A/m. Polje kaže v tangentni smeri. V praznem prostoru velja

$$B = \mu_0 H, \tag{15.4}$$

kjer je $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$Vs/Am *indukcijska konstanta.* Če se v polju nahaja snov, pa velja

$$B = \mu\mu_0 H, \tag{15.5}$$

kjer je μ *permeabilnost*, ki meri, kako močno magnetno polje prodre v snov. Snovi, za katere velja $\mu > 1$ se imenujejo *paramagnetne* snovi, tiste z $\mu < 1$ pa *diamagnetne.* Prve polje privlači, druge pa odbija.

Magnetno polje povzroči magnetizacijo snovi, saj elektroni v polju krožijo, notranja vrtilna količina pa se obrne vzdolž polja. Kroženje ima diamagnetni učinek, reorientacija spina pa paramagnetni učinek. *Magnetizacijo* zapišemo kot

$$M = np_m, \tag{15.6}$$

kjer je n gostota momentov, p_m pa povprečni dipolni moment. Zapišemo tudi

$$M = \chi H, \tag{15.7}$$

kjer je χ *magnetna susceptibilnost.* Velja

$$B = \mu_0 H + \mu_0 M = \mu_0(1+\chi)H, \tag{15.8}$$

torej $\mu = 1 + \chi$.

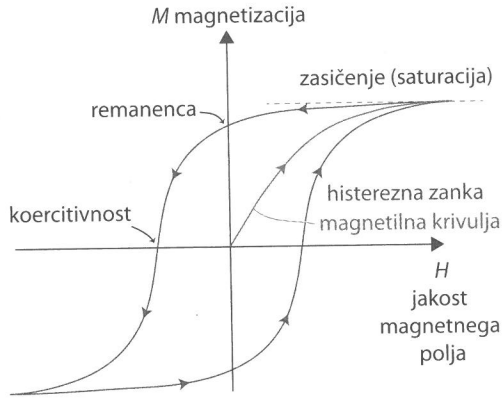
15.2 Feromagnetizem

Feromagneti so materiali, ki so *magnetno urejeni*: vsi magnetni momenti nekega območja kažejo v isto smer. Ureditev je *spontana* in obstaja tudi v odsotnosti zunanjega magnetnega polja. Iz feromagnetov je mogoče narediti trajne magnete. Obstajajo tudi drugačne vrste ureditve momentov: antiferomagnetizem (sosednji momenti kažejo v nasprotnih smereh), ferimagnetizem (sosednji momenti kažejo v nasprotnih smereh, a so različni po velikosti) in druge bolj zapletene možnosti, kot so razne vijačne strukture. V nadaljevanju nas bodo najbolj zanimali feromagneti, ki so najbolj uporabni.

Območja, kjer so magnetni momenti urejeni in kažejo v isto smer, se imenujejo *Weissove domene.* Urejenost znotraj domen obstaja le do določene temperature, ki se imenuje *Curiejeva temperatura.* Nad to temperaturo so termične fluktuacije tako

močne, da se red poruši. Ureditev momentov znotraj domen je posledica kvantnomehanskega pojava, *izmenjalne interakcije*, ki nastane zaradi Coulombskega odboja in Paulijevega izključitvenega načela, ker so elektroni fermioni. Če bi svet opisovala klasična fizika, magneti sploh ne bi obstajali!

Kos snovi je običajno razdeljen na več domen z vektorji magnetizacije, ki kažejo v različnih smereh. V odsotnosti zunanjega polja namreč ni energijsko ugodno, da bi bili poravnani v isto smer prav vsi magnetni momenti, saj bi tedaj silnice segale iz snovi, namesto da se zaključijo v notranjosti. Med domenami so *domenske stene*, znotraj katerih se spremeni smer magnetizacije. Tudi stene stanejo nekaj energije. Struktura domen je torej kompromis med čim manjšo energijo magnetnega polja in energijo domenskih sten. Možno je doseči, da je feromagnet navzven nemagneten, če je povprečni magnetni moment enak nič (recimo tako, da je enako veliko domen s spinom gor kot s spinom dot). Feromagnetna snov je tedaj *razmagnetena.*



Slika 15.1. Magnetilna krivulja in histerezna zanka za feromagnetni material.

Feromagneti imajo visoko magnetno permeabilnost μ (reda 1000 ali celo še več), ki pa ni konstantna, temveč je odvisna od jakosti magnetnega polja ter od preteklega dogajanja v materialu. Slednji lastnosti rečemo *histereza* (iz starogrške besede za zaostajanje). Obnašanje feromagneta v zunanjem polju opišemo s krivuljama, ki se imenujeta *magnetilna krivulja* in *histerezna zanka*, slika 15.1. Magnetilna krivulja opiše potek $M(H)$, če je snov na začetku popolnoma razmagnetena. Histerezna zanka pa opisuje obnašanje snovi v izmeničnem zunanjem polju, ko snov zaporedoma magnetimo v eno smer, nato pa v drugo. Jakost polja mora biti pri tem zadosti visoka, da dosežemo zasičenje (saturacijo), torej največje možno namagnetenje snovi. Ob magnetenju se povečujejo tiste domene, katerih magnetizacija kaže približno v smeri zunanjega polja, ostale pa se zmanjšujejo. Pri zelo močnem polju se magnetizacija v vseh domenah uredi v smeri zunanjega polja. Poudariti je potrebno pojav *remanentne magnetizacije* v odsotnosti polja: obstoj dveh možnih stabilnih smeri magnetizacije je ključnega pomena pri magnetnem shranjevanju podatkov. Videz zanke in vrednosti koercitivnega polja ter remanentne magnetizacije so odvisne od hitrosti, s katero spreminjamo polje.

15.3 Feromagnetni materiali

Med elementi so feromagnetni pri sobni temperaturi železo (Fe), nikelj (Ni) in kobalt (Co), pri nizkih temperaturah pa še gadolinij (Gd) in disprozij (Dy). Feromagnetne so različne zlitine, kot so MnBi, MnSb, MnAs, in oksidi, denimo železovi oksidi (Fe_2O_3, Fe_3O_4) in CrO_2. Slednji so se nekoč veliko uporabljali kot magnetna emulzija za izdelavo avdio kaset.

Za podatkovne magnetne kasete (DAT, DLT, LTO) se danes uporabljajo emulzije iz magnetnih delcev, zato nosijo oznake, kot je MP (kovinski delci) ali BaFe (barijev ferit). Trenutna generacija naprav LTO-7 lahko hrani do 6 TB na kaseto brez stiskanja podatkov. Zelo so primerne za varnostne kopije, saj jamčijo obstojnost podatkov za več deset let.

Za močne trajne magnete se uporabljajo zlitine AlNiCo, SmCo (samarij-kobalt) in NdFeB (neodimski magneti). Neodimski magnetni so trenutno najmočnejši trajni magneti. Najdemo jih v mehanizmih za premikanje ročic z bralno in pisalno glavo v trdih diskih. Trenutno se intenzivno raziskuje alternativne materiale za izdelavo magnetov, saj so redke zemlje (lantanidi), kot sta samarij in neodim, drage. Potencialna težava je tudi monopol Kitajske, ki proizvede kar 95 % vseh redkih zemelj in 75 % vseh močnih magnetov. Omenimo še, da so magnetne tudi nekatere organske spojine, denimo TDAE-C_{60}, ki je material, sestavljen iz fulerenskih kroglic in organskih molekul TDAE.

15.4 Magnetna anizotropija

Magnetizacija domen v feromagnetnih materialih je usmerjena v točno določene smeri. To ni samo po sebi umevno, saj je magnetni moment prostega atoma lahko usmerjen povsem poljubno. Očitno se torej posebne smeri pojavijo šele, ko se atomi uredijo v kristalno strukturo. Upoštevati je treba pojav imenovan *sklopitev spin-tir*: lastna vrtilna količina elektrona (spin) je povezana s tirno (orbitalno) vrtilno količino, torej z gibanjem elektrona. Sklopitev spin-tir obstaja tudi za posamezne atome, vendar ne vodi k usmerjenosti magnetnega momenta, saj je izoliran atom krogelno simetričen in je tudi tirna vrtilna količina lahko usmerjena v katero koli smer. V kristalu pa sosednji atomi zmotijo krogelno simetrijo in usmeritev tirne vrtilne količine ni več poljubna. Kombinacija sklopitve spin-tir in gibanja elektronov v kristalu zato povzročijo, da tudi smer spina ni več poljubna, temveč imamo energijske minimume za točno določene smeri lastne vrtilne količine. Pojav se imenuje *magnetna anizotropija*.

V praksi visoka magnetna anizotropija pomeni, da sta remanentna magnetizacija in koercitivno polje visoka. Takšni materiali se imenujejo *trdo magnetne* snovi; iz njih izdelujemo trajne magnete, saj jih je težko razmagnetiti. Njihovo nasprotje so *mehko magnetne* snovi, ki imajo ozko histerezno zanko in se uporabljajo za zgoščevanje magnetnega polja v tuljavah, motorjih in transformatorjih. Za magnetno hranjenje podatkov potrebujemo lastnosti, ki so nekje med tema mejnima primeroma.

Obravnavajmo domeno v zunanjem polju upoštevajoč magnetno anizotropijo (model Stonerja in Wohlfartha). Predpostavimo, da privilegirana os leži vzdolž smeri osi z. V preprostem približku magnetno energijo na enoto prostornine zapišemo kot

$$E = -K(\hat{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{n})^2 - \mu_0 \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}, \tag{15.9}$$

kjer je K koeficient, ki meri jakost anizotropije, $\mathbf{M}$ je vektor magnetizacije (strehica označuje enotski vektor v tej smeri, $\hat{\mathbf{M}} = \mathbf{M}/|\mathbf{M}|$), enotski vektor $\mathbf{n}$ pa kaže v smeri privilegirane osi. Naj bo tudi zunanje polje $\mathbf{H}$ usmerjeno vzdolž osi z. Tedaj velja

$$E = -K\cos^2\phi - \mu_0 M H \cos\phi, \tag{15.10}$$

kjer je ϕ kot med osjo z in smerjo magnetizacije. Z odvajanjem lahko pokažemo, da je minimum pri $\phi = 0$, če velja $H > -\frac{2K}{\mu_0 M}$. Podobno je $\phi = \pi$, če velja $H < \frac{2K}{\mu_0 M}$. Na intervalu $H \in [-\frac{2K}{\mu_0 M} : \frac{2K}{\mu_0 M}]$ obstajata torej dve rešitvi. Do preklopa iz enega minimuma v drugega pride, ko trenutna rešitev ni več lokalni minimum. To je torej preprost model, ki razloži histerezno zanko; ta ima v tem preprostem modelu obliko pravokotnika.

15.5 Spintronika

S tem, da se elektron obnaša kot vrtavka, čeprav je točkast (nesestavljen) delec, smo se že dobro seznanili. Ideja o uporabi spinskega stanja elektronov (»spin gor« ali »spin dol«) za shranjevanje in obdelavo podatkov se imenuje *spintronika*, po analogiji z elektroniko, ki temelji na električnih nabojih in toku. Notranje sukanje elektrona je povezano z magnetnim momentom, zato je razlika med elektroniko in spintroniko v tem, da prva izkorišča električne pojave, druga pa poleg tega še magnetne pojave, kar omogoči izdelavo inovativnih naprav.

Naboj v neki elektrodi (denimo na plošči kondenzatorja) se nabere tako, da vanjo spustimo električni tok. Kako pa nekam spravimo spin? Očitno potrebujemo presežek elektronov z izbrano smerjo spina v primerjavi z elektroni z nasprotno usmerjenim spinom. *Injeciranje spina* lahko poteka na več načinov. Pri *optičnem injeciranju* se uporabi možnost, da je lahko svetloba krožno polarizirana, torej da fotoni nosijo vrtilno količino. Če se polariziran foton absorbira v polprevodniku, pri tem odda vrtilno količino elektronu. Ta pristop je uporaben v GaAs. Pri *električnem injeciranju* iz kovinske feromagnetne elektrode poganjamo spinsko urejen tok v polprevodnik. Za ta pristop je potrebna ustrezna izbira materialov, da lahko naredimo obstojen spoj. Spinsko polarizacijo definiramo kot

$$P = \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{n_\uparrow + n_\downarrow}, \tag{15.11}$$

kjer so n_σ gostote elektronov s spinom gor ali dol. Polarizacija je največja v bližini spoja, v notranjosti polprevodnika pa upada zaradi sipanja.

Glavna težava večine spintronskih naprav, kot jih znamo izdelati danes, je nizka delovna temperatura, ki je veliko pod sobno temperaturo. Tudi stopnja polarizacije elektronov, ki jo lahko dosežemo, še ni zadovoljiva: P znaša vsega nekaj procentov.

15.6 Magnetoupornost

Magnetoupornost je sprememba specifične električne prevodnosti z jakostjo zunanjega magnetnega polja, ki mu je snov izpostavljena. Pojav je prvi opazil Thomson (Lord Kelvin) leta 1851 v železu. Ugotovil je, da je upornost odvisna od kota med električnim tokom in magnetizacijo. Do pojava pride zaradi sklopitve spin-tir. V večini materialov je upornost največja, ko tok teče v smeri magnetnega polja. Pojavu rečemo *anizotropna magnetoupornost*. Takšne senzorje se uporablja za merjenje magnetnega polja, podobno kot Hallove senzorje.

Do pojava magnetoupornosti pride, ker je verjetnost za sipanje elektrona v magnetno urejenem materialu odvisna od medsebojne orientacije spina elektrona in spina sipalca: če sta vzporedna, je sipanje šibkejše, kot če sta v nasprotnih si smereh. Z zunanjim poljem spreminjamo relativno gostoto elektronov z različnim spinom, zato s tem vplivamo na skupno prevodnost.

Magnetoupornost se meri kot

$$\mathrm{MR}_H = \frac{R(0) - R(H)}{R(H)}, \tag{15.12}$$

kjer je H jakost zunanjega magnetnega polja. V običajnih materialih je sprememba upornosti v magnetnem polju največ kakšnih 5 %. Obstaja družina oksidnih materialov, ki v osnovni celici vključujejo tudi atom mangana, *manganiti*, katerih upornost se v polju spremeni za več velikostnih redov. Tipičen primer je $\mathrm{La}_x\mathrm{Ca}_{1-x}\mathrm{MnO}_3$. Pri teh materialih se prevodnost v polju močno poveča, ker se uredijo spini na atomih Mn in se močno zmanjša sipanje elektronov na sicer neurejenih magnetnih momentih. V bistvu gre za fazni prehod iz paramagnetne (nemagnetne) v feromagnetno fazo pod vplivom zunanjega polja, ob kateri se tudi prevodniške lastnosti spremenijo iz izolatorskih v kovinske. Pojav se imenuje *kolosalna magnetoupornost*, odkrit je bil leta 1950 in še vedno ni povsem razumljen. Pri številnih manganitih je pojav prisoten le pri nizkih temperaturah, pri nekaterih pa tudi pri sobni temperaturi. Kljub temu se tovrstni materiali ne uporabljajo v praktične namene.

Gigantska magnetoupornost je pojav izjemno visoke magnetoupornosti v umetno izdelanih heterostrukturah iz zaporednih plasti feromagnetnih (Fe, Co) in nemagnetnih prevodnih plasti (Cr, Cu). Debelina prevodnih plasti je določena z razdaljo povezano z magnetnim urejanjem spinov v kovinah; izberemo takšno debelino, da imata dve zaporedni magnetni plasti magnetizacijo v obratnih smereh. Heterostrukture izdelamo z epitaksijo. Gigantsko magnetoupornost sta odkrila Fert in Grünberg leta 1988, za kar sta leta 2007 prejela Nobelovo nagrado, v veliki meri tudi zaradi izjemnega aplikativnega pomena odkritja, saj vse bralne glave sodobnih trdih diskov temeljijo na tem pristopu. Do spremembe smeri magnetizacije v plasteh pride že pri zelo majhnih poljih, ki uredijo magnetizacije plasti v vzporedni smeri, kar močno poveča prevodnost. Namesto kovin, omenjenih v začetku tega odstavka, se danes za izdelavo bralnih glav uporablja magnetno mehka zlitina permalloy (20 % Fe in 80 % Ni) za magnetne plasti in Ag za nemagnetne, kar dodatno zniža jakost polja, potrebnega za reorientacijo magnetizacije. Prevodnost se lahko močno spremeni že pri poljih pod 0,01 T, kar je potrebno za uporabo pri magnetnem hranjenju podatkov.

15.7 Spinski ventil

Spinski ventil je naprava, ki prepušča zgolj elektrone z določeno smerjo spina, torej je neke vrste spinski filter. Podoben je *polarizatorju* v optiki, ki prepusti elektromagnetno valovanje s polarizacijo v izbrani smeri, v pravokotni pa ne. Pogosto uporabimo par enakih elementov: drugega tedaj imenujemo *analizator*. Če sta optična polarizator in analizator poravnana, potem je svetloba prepuščena. Če pa sta prekrižana (torej pod pravim kotom), potem ni prepuščene nič svetlobe. V splošnem je prepustnost sorazmerna z $\cos^2\theta$, kjer je θ kot med polarizacijskima ravninama.

Podobno lahko naredimo z elektroni. Spinsko nepolarizirane elektrone (torej enako število elektronov s spinom gor in s spinom dol) iz navadne kovine spustimo skozi feromagnet. Prepuščeni bodo le elektroni z izbranim spinom, denimo s spinom gor. To je sicer zgolj grob približek, ki v praksi žal ni izpolnjen. Z drugim feromagnetom nato analiziramo, ali na poti skozi vmesno polprevodno plast elektroni ohranijo spinsko polarizacijo. Primerjamo tok za dve različni izbrani smeri, gor in dol. Če obstaja razlika, potem skozi napravo teče spinsko polariziran tok. To je hkrati tudi dokaz, da je električno injeciranje spina bilo uspešno.

Pokazati se da, da je prepustnost idealnega spinskega analizatorja sorazmerna z

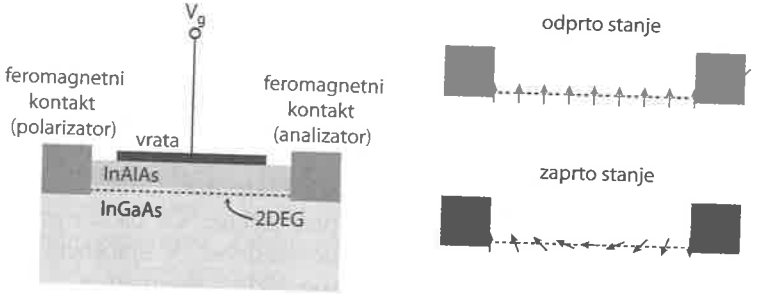
$$\cos^2(\theta/2), \tag{15.13}$$

kjer je θ kot med smerjo spina in prepustno smerjo polarizatorja. Če je prepustna smer, denimo, vzdolž osi z, potem so elektroni s spinom gor ($\theta = 0$) povsem prepuščeni, elektroni s spinom dol ($\theta = \pi$) pa se odbijejo nazaj. To je podobno kot v napravi Sterna in Gerlacha, ki jo torej lahko smatramo kot spinski polarizator ali analizator.

Delovanje spinskih ventilov včasih opišemo z izrazom *tunelska magnetoupornost* (TMR). Ta pojav se že uporablja v bralnih glavah novih generacij trdih diskov.

15.8 Spinski tranzistor

Spinski tranzistor, imenovan tudi tranzistor Datte in Dasa po avtorjih članka, kjer je bil prvič predlagan (1990), temelji na uporabi spinskega ventila z območjem, kjer lahko obračamo spin, za krmiljenje spinskega toka skozi napravo. Med polarizator in analizator spinskega ventila postavimo aktivno območje iz materiala, ki ima močno sklopitev spin-tir. V takšnih materialih se da z električnim poljem vplivati na spreminjanje spina elektronov na poti skozi napravo (spinsko precesijo). To se imenuje *Rashbov pojav*. V bistvu gre za neke vrste spinski tranzistor na učinek polja, slika 15.2, le da električno polje drugače učinkuje: namesto da spremeni tip večinskih nosilcev naboja v kanalu, zgolj zasuka spin potujočih nosilcev naboja. Prva eksperimentalna demonstracija spinskih tranzistorjev je uspela šele nedavno (Koo, Chang, 2009). Takšen tranzistor je zgolj stikalo brez možnosti ojačanja.



Slika 15.2. Spinski tranzistor. Levo: skica naprave, desno: razlaga delovanja.

16

Hranjenje podatkov

Ogledali si bomo fizikalne osnove nekaterih danes najbolj uporabljanih načinov za trajno shranjevanje klasičnih informacij, torej nizov binarnih vrednosti. Beseda trajno pri tem pomeni dolgoročno, večletno hranjenje podatkov brez napake pri kasnejšem odčitavanju. Nobena obstoječa tehnologija ne omogoča zares poljubno dolgega hranjenja; rečemo, da podatki *trohnijo* (angl. data degradation). Zato so za ohranitev digitalnih podatkov potrebni posebni postopki, med drugim redno osveževanje in podvajanje. Diskovna polja RAID ne rešijo težav, saj gre za tehnologijo, ki zagotavlja predvsem dostopnost podatkov kljub okvari enega ali dveh diskov, ne pa dolgoročne integritete podatkov. Uporaba datotečnih sistemov, ki računajo kontrolne vsote, kot je ZFS, tudi ni popolna rešitev. Potrebno je pravo arhiviranje podatkov.

16.1 Magnetni pomnilniki: trdi diski in magnetni trakovi

Magnetni nosilci so še vedno najpomembnejši medij za hranjenje podatkov. Zaradi težnje po obdelavi čedalje večjih količin podatkov je pomembno razumeti skrajne meje gostote zapisa, ki jih ta pristop omogoča. Nekoč je veljajo, da se kapacitete trdih diskov podvojijo vsaki dve leti (Kryderjev zakon), v zadnjih letih pa smo se že približali tehnološkim (če ne fizikalnim) mejam in se je razvoj upočasnil.

16.1.1 Superparamagnetna meja

Strogo vzeto so fizikalni sistemi lahko trajno magnetno urejeni le, če so neskončno veliki. V končno velikih sistemih se po nekem času magnetizacija lahko naključno obrne, vendar je ta *Néelov relaksacijski čas* včasih zadosti dolg, da je za vse praktične namene neskončen in sistem se obnaša kot trajni magnet. Ker bi želeli informacijo zapisati v čim manjši del prostora, si moramo bolj podrobno ogledati, kako je Néelov karakteristični čas odvisen od velikosti sistema. Predvsem nas zanimajo *feromagnetni nanodelci* premera nekaj deset nanometrov, ki imajo eno samo magnetno domeno.

Takšni delci so *superparamagnetni*: pri kratkotrajnih meritvah izmerimo končno magnetizacijo kot pri feromagnetih, če pa rezultate povprečimo po času, veliko daljšem od relaksacijskega, dobimo rezultat nič kot pri paramagnetih, ker so spremembe smeri magnetizacije naključne.

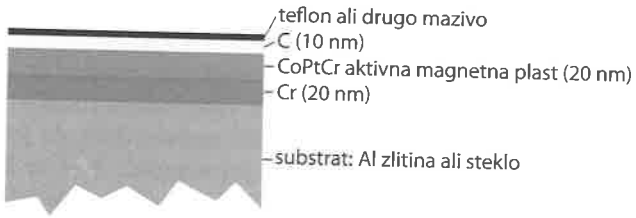
Na Néelov relaksacijski čas močno vpliva magnetna anizotropija K. Spontano preklapljanje med stabilnimi smermi magnetizacije je možno le tedaj, ko zaradi *termičnih fluktuacij* nanodelec nenadoma dobi zadosti presežne energije, da premaga energijsko prepreko, ki ločuje dve odlikovani smeri. Néelov čas τ_N je eksponentno odvisen od anizotropije in temperature:

$$\tau_N = \tau_0 \exp\left(\frac{KV}{k_B T}\right), \tag{16.1}$$

kjer je τ_0 neka konstanta in V prostornina nanodelca. Energijska pregrada za preklapljanje smeri magnetizacije je produkt specifične magnetne anizotropije K in velikosti domene V. Za magnetne materiale, ki so uporabni za izdelavo magnetnih nosilcev podatkov, je K omejen. To pomeni, da pri nekem sprejemljivo dolgem relaksacijskem času, v katerem se podatki na trdem disku ne smejo naključno spremeniti, ter pri neki mejni temperaturi, pri kateri se bo podatke hranilo, obstaja spodnja meja za velikost delcev, ki hranijo podatke. To je *superparamagnetna meja*. En bit v današnjih trdih diskih v resnici ni zapisan z enim samim magnetnim nanodelcem, temveč na območju, ki pokriva nekaj sto magnetnih zrn. To efektivno pomeni, da v zgornji enačbi upoštevamo ustrezno večjo prostornino V, vse ostalo pa še vedno v zelo dobrem približku velja.

16.1.2 Magnetne plošče

Trdi diski uporabljajo trde plošče iz aluminija ali stekla z nanešeno tanko plastjo feromagnetnega materiala debeline nekaj 10 nanometrov za zapis podatkov na obeh straneh plošče. V trdem disku so danes tipično 3 ali 4 takšne plošče, ki se vrtijo s hitrostmi od 5400 do 15000 obratov na minuto. Podatki so zapisani linearno, v črtah širine okoli 50 nm, imenovanih *sledi*. Čisto na površini vsake plošče je tanka plast materiala, ki deluje kot mazivo, pod njo pa še plast ogljika, slika 16.1. Ti plasti delujeta kot zaščita magnetne plasti pred morebitnimi rahlimi dotiki bralno pisalne glava.



Slika 16.1. Shematski prikaz sestave magnetne plasti na površini plošč trdega diska.

Magnetizacija je lahko urejena vzporedno s površino ali pravokotno nanjo. Pri prvem pristopu je zgornja meja gostote informacij okoli 200 Gb/in^2 (gigabitov na kvadratni palec), pri drugem pa nekaj nad 1000 Gb/in^2. Od leta 2006 na trgu prevladujejo trdi diski, ki uporabljajo pravokotni zapis in v času pisanja knjige dosegajo gostoto do 1300 Gb/in^2, tipično pa imajo okoli 850 Gb/in^2. To mejo se bo lahko premagalo kvečjemu z novimi pristopi k zapisovanju.

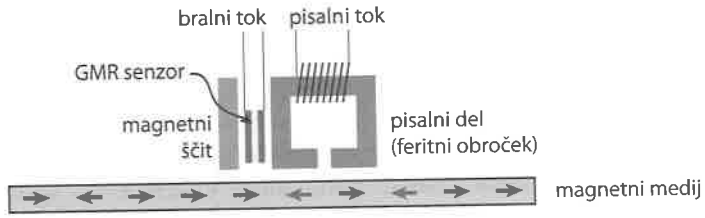
Možna izboljšava je izbira materialov z višjo magnetno anizotropijo K. Pri visokih K je za preklapljanje smeri magnetizacije potrebno močno magnetno polje, lahko pa se območje pred vzpostavitvijo magnetnega polja najprej segreje, s čimer se verjetnost za preklop znatno poveča. Ta tehnologija se imenuje *magnetno zapisovanje s pomočjo toplote* (angl. heat-assisted magnetic recording, HAMR). Pri podjetju Seagate so leta 2012 s to tehnologijo prvič dosegli 1000 Gb/in^2 gigabitov na kvadratni palec.

Zmanjšuje se tudi razdalja med posameznimi sledmi podatkov in to celo do te mere, da se te že delno prekrivajo. Pri branju ni težav, saj lahko bralna glava loči posamezne zapise, pri zapisovanju pa se uniči zapis na sosednji sledi. Zato je pred pisanjem potrebno prebrati star zapis, nato pa zapisati obe, novo in sosednjo staro sled. Učinek domin se prepreči tako, da so sledi razporejene v bloke, med katerimi je presledek. Tehnologija zapisovanja s prekrivanjem se angleško imenuje shingled magnetic recording (SMR); ime izvira iz angleške besede za strešnike, kar namiguje na delno prekrivanje sledi. Proizvajalec trdih diskov Seagate ima v času pisanja knjige na trgu izdelke te vrste s kapaciteto do 8 TB.

Današnje magnetne plošče so homogeni magnetni mediji, na katerih en bit prekriva večje število majhnih domen, ki niso nujno vse poravnane. Plošče bi lahko v prihodnje izdelovali z litografijo in na njej definirali enodomenska območja za zapis podatkov, s čimer bi povečati gostoto zapisa vsaj za faktor 10. Ta pristop se imenuje *zapisovanje na bitno oblikovan nosilec* (angl. bit-patterned media, BPM).

16.1.3 Bralno pisalna glava

Bralno pisalna glava (slika 16.2) lebdi zgolj kakšnih 10 nm nad površino. Tako majhni odmiki so potrebni, da lahko glava zanesljivo zapiše in prebere podatke, katerih površinska gostota je vedno višja. Glava pravzaprav lebdi na zelo tanki plasti zraka, ki deluje kot *zračni ležaj*. Zaradi manjšega trenja se počasi začenja zrak nadomeščati s helijem. Glava se nad ploščami radialno premika z aktuatorjem.



Slika 16.2. Bralno pisalna glava pri trdem disku z vzporednim zapisom podatkov.

Včasih so se uporabljale kombinirane bralno pisalne glave iz feritnega obročka v obliki črke C, na katerega je navita tuljava. Tok v tuljavi ustvari v reži obročka močno magnetno polje, s katerim se obrača magnetizacijo v ustrezno smer. Pri branju pa polje magnetnih domen na disku inducira napetost v tuljavi, ki jo merimo. Kasneje se je bralno glavo ločilo od pisalne. Najprej se je uporabljalo glave, ki so temeljile na anizotropni magnetoupornosti (AMR), nato na gigantski magnetoupornosti (GMR), danes pa največ na tunelski magnetoupornosti (TMR). Bralna glava je v bistvu spinski ventil.

16.1.4 Trajnost zapisa na magnetnih nosilcih

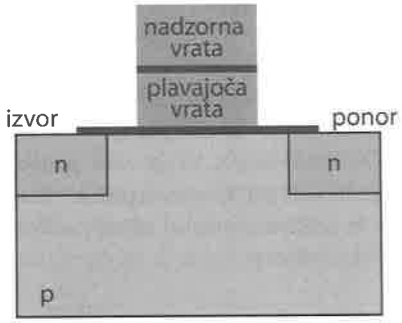
Najkvalitetnejši strežniški trdi diski naj bi imeli povprečni čas med okvarami, MTBF, nad milijon ur, kar je več kot 100 let. Če bi bile okvare povsem naključni dogodki, bi to pomenilo, da je verjetnost za okvaro funkcija oblike $1-\exp(-t/\tau)$, kjer je τ MTBF. V resnici pa okvare niso naključne in časovna odvisnost pogostosti napak kaže stopničast potek: pri strežniških diskih so okvare pogoste čisto na začetku obratovanja, potem pa po kakšnih 4 ali 5 letih. Dogaja se, da imajo diski od istega proizvajalca iz iste serije včasih težave istočasno, kar je lahko usodno za diskovna polja; priporočljivo je kombinirati diske različnih proizvajalcev. Poglavitni način okvar je mehanski (glava se zaleti v medij, obrabijo se aktuatorji ali ležaji motorja, ipd.). Pokvarijo se lahko tudi krmilniki trdih diskov, predvsem zaradi napetostnih sunkov.

Za namene varnostnega kopiranja in arhiviranja se še vedno uporabljajo magnetni trakovi, ki so bili nekoč poglavitni magnetni medij, danes pa jih v vedno večji meri nadomeščajo trdi diski tudi v tej vlogi. Življenjska doba trakov je več deset let, kar je veliko več kot pri trdih diskih, poleg tega je možno shranjevati veliko število kaset v robotiziranih trakovnih knjižnicah. Nove generacije trakov so tudi dokaj neobčutljive na magnetno polje: magnetna koercitivnost pri LTO3/4 je 300 mT (preračunano v enote za gostoto magnetnega polja).[1] Pri trdih diskih je koercitivnost še nekaj višja, okoli 500 mT. Za brisanje sodobnih magnetnih medijev se moramo zato kar precej potruditi: za zanesljivo uničevanje občutljivih podatkov se v praksi uporablja naprave imenovane »degausser«, ki medij podvržejo zelo močnemu izmeničnemu magnetnemu polju.

16.2 Polprevodniški trajni pomnilniki

Bliskovni (flash) pomnilniki so polprevodniške naprave, ki shranjujejo podatke v obliki naboja v celicah. Sorodni so pomnilnikom EEPROM, od katerih se razlikujejo predvsem v velikosti blokov, ki se jih lahko sočasno briše, zato so hitrejši pri zapisovanju večjih količin podatkov. Pri bliskovnih pomnilnikih tipa NAND se podatke zapisuje v blokih velikostnega reda nekaj 100 do nekaj 1000 bitov, pri pomnilnikih tipa NOR pa lahko zapišemo posamezne bajte. Za shranjevanje podatkov se uporablja predvsem NAND, iz katerih so večinoma izdelani pomnilniški ključki USB, spominske kartice in enote SSD. Pomnilnike tipa NOR najdemo predvsem v nišnih aplikacijah, denimo

[1] Za primerjavo: magnetno polje Zemlje znaša nekaj 10 μT, odvisno od kraja.



Slika 16.3. Tranzistor s plavajočimi vrati.

v vgrajenih napravah in za zagon sistemov. Oba tipa pomnilnikov delujeta podobno, le organizacija polprevodniških struktur in naslavljanje celic so drugačni.

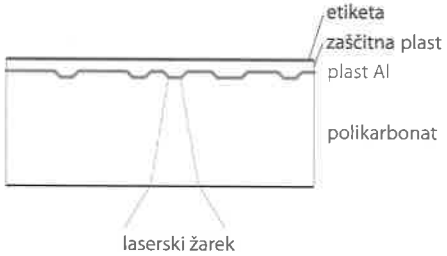
Bliskovni pomnilniki so izdelani *iz tranzistorjev s plavajočimi vrati*, glej sliko 16.3, ki so podobni tranzistorjem MOSFET. Plavajoča vrata so povsem izolirana od okolice z oksidno plastjo in na njih so lahko ujeti elektroni. Če so plavajoča vrata nabita, potem je težje odpirati prevodni kanal v plasti p z napetostjo na nadzornih vratih. V najbolj preprostem primeru torej zadostuje preveriti, ali se prevodna pot med izvorom in ponorom odpre, ko vzpostavimo napetost na nadzornih vratih. Tako delujejo *enonivojske celice* (SLC, single-level cell). Obstajajo tudi *večnivojske celice*, kjer lahko na plavajoča vrata spravimo različne količine naboja in tako shranimo več kot en bit informacije (2 bita pri MLC, 3 bite pri TLC pomnilnikih): v tem primeru moramo razločiti različne nivoje prevodnosti kanala med izvorom in ponorom.

Plavajoča vrata nabijemo tako, da na kontrolnih vratih vzpostavimo »visoko« napetost (recimo 12 V) in poženemo tok med izvorom in ponor: del teh elektronov preide skozi izolatorsko plast na plavajoča vrata. Proces se imenuje *injeciranje vročih elektronov*, kar pomeni, da imajo elektroni zadosti kinetične energij, da prodrejo skozi izolatorsko plast na kovinsko elektrodo. Izolatorska plast se pri tem vsakič rahlo poškoduje, kar omejuje število pisalnih ciklov pred okvaro celice. Brisanje poteka z vzpostavitvijo nasprotno predznačene potencialne razlike, pri čemer elektroni s plavajočih vrat odtunelirajo nazaj v podlago. Tudi pri brisanju prihaja do poškodb. Ker postane celica neuporabna že po nekaj tisoč pisalnih ciklih, so potrebne strategije za razpršitev podatkov po vseh tranzistorjih. Pogostost napak je v praksi močno odvisna od tipa celic: med SLC in TLC je več velikostnih redov razlike.

Podobno kot pri procesorjih se tudi pri pomnilnikih NAND zmanjšuje velikost tranzistorjev; velikost celic je leta 2016 nekje okoli 16 nm. Za premoščanje težav se uporablja podobne pristope kot sicer (glej razdelek 12.6): dielektrične materiale z visoko vrednostjo dielektrično konstanto, kovinske elektrode in tridimenzionalne strukture. Napredek na tem področju je hitrejši kot pri magnetnih medijih.

16.3 Optični pomnilniki

Na optične plošče je informacija zapisana na spiralno sled iz jamic. Razdalja med sledmi je 1,6 μm na CD, 740 nm na DVD in 320 nm na BD, minimalna velikost jamic pa je 830 nm na CD, 400 nm na DVD in 150 nm na BD. Substrat je iz polikarbonata (polimer na osnovi verig -O-(C=O)-O-), ki je zelo prosojen in celo bolje prepušča svetlobo kot nekatera stekla, hkrati pa je zelo trpežen material. Na površini je tanka plast kovine (Al, Au ali Ag), ki odbija svetlobo, sledi polimerna zaščitna plast debeline od 10 do 30 μm, ter morebitna etiketa.



Slika 16.4. Shematski prikaz prečnega preseka CD plošče in vpadnega laserskega žarka.

Branje poteka s spodnje strani: laserski žarek je izostren na plast, kjer se nahajajo jamice. Velikost pike laserskega žarka, kjer vpada na ploščo CD, je okoli 800 μm, v goriščni ravnini pa zgolj 1,7 μm. Ker je vpadno območje relativno veliko, so optični mediji dokaj neobčutljivi na prah in drobne praske na površini. Pri CD se uporablja diodni laser iz GaAlAs z valovno dolžino 780 nm, kar je v bližnjem infrardečem področju. Lomni količnik polikarbonata je $n = 1{,}55$, zato je valovna dolžina v notranjosti plošče krajša: $\lambda = 500$ nm. Globina jamic je četrtina valovne dolžine, $\lambda/4 = 125$ nm. Če laser zadane jamico, bo pokril celotno območje jamice ter nekaj območja okoli nje, ki ima podobno ploščino kot jamica. Razdalji se razlikujeta za $\lambda/4$, celotna razlika poti je dvakrat večja, torej $\lambda/2$, zato pride do destruktivne interference med svetlobo odbito z dna jamice in tisto iz okolice. Na območjih jamic je torej intenziteta odbite svetlobe bistveno manjša kot drugod. Podatki so zakodirani tako, da sprememba višine (v eno ali drugo smer) pomeni logično 1, odsotnost spremembe pa logično 0. Pri DVDjih se uporablja krajša valovna dolžina, $\lambda = 650$ nm (rdeče), pri BD pa $\lambda = 405$ nm (vijolično). V večplastnih nosilcih se globlje plasti bere s spremembo goriščne razdalje, prisotnost plitvejših plasti pa ne moti preveč, ker so delno prepustne.

Navadni nezapisljivi CD-ROMi so izdelati z mehansko kovinsko matrico, s katero se vtisne jamice na polikarbonatne nosilce. V zapisljivih nosilcih CD-R pa se uporablja dodatno plast iz svetlobno občutljivih organskih molekul (cianinov, ftalocianinov ali azo barvil). Zapisovanje poteka tako, da zelo intenziven laserski žarek zažiga barvilo na ustreznih mestih ter ga s tem naredi neprosojnega, kar zmanjša odbojnost žarka. Pri večkrat zapisljivih nosilcih CD-RW se odbojnost spreminja s preklapljanjem aktivne plasti med amorfno in kristalno fazo, pri čemer se uporablja laserske pulze z različnim trajanjem in različno intenziteto.

Življenjska doba CD-ROMov naj bi bila po konservativnih ocenah vsaj 25 let. Za zapisljive CD-R se včasih navaja podatek 50–200 let, za večkrat zapisljive CD-RW pa 20–100 let. V praksi se izkaže, da se težave pri številnih zapisljivih CDjih začnejo pojavljati že po desetih letih. Poznanih je več mehanizmov okvar: ultravijolična svetloba lahko spremeni lastnosti polikarbonatne plasti; plastika se lahko deformira; plast aluminija lahko oksidira, kar oteži odčitavanje. V zapisljivih ploščkih lahko tudi razpade plast barvila. Nedavno so na trg prišli diski M-DISC (Millenial Disc), združljivi s pogoni DVD in BD, ki naj bi imeli življenjsko dobo tisoč let. Uporabljajo bolj trdožive materiale, podatki pa se zapisujejo z močnim laserjem, ki ustvarja jamice v anorganski podatkovni plasti.

16.4 Spintronski pomnilniki: MRAM

MRAM je kratica za magnetoresistive random access memory, torej pomnilnik z naključnim dostopom, ki temelji na pojavu magnetoupornosti. V MRAM so podatki spravljeni v magnetnih celicah. Vsaka celica je sestavljena iz dveh feromagnetnih ploščic: ena ima fiksno magnetizacijo, magnetizacijo druge pa lahko obračamo z magnetnim poljem. Ploščici skupaj delujeta kot spinski ventil (glej razdelek 15.7), kar omogoča odčitavanje spravljenega bita z meritvijo upornosti celice. Če sta obe magnetizaciji v isti smeri, bo upornost manjša (stanje 1), če sta v obratnih smereh, pa večja (stanje 0).

Magnetizacijo se preklaplja z uporabo dveh prekrižanih žic, od katerih je ena pod celico, drugo pa nad njo, s čimer se doseže tudi naslavljanje celic. Po žicah se požene tok, ki inducira magnetno polje in povzroči preklop. Pomanjkljivosti sta poraba energije, saj je potreben znaten električni tok, ter zahteva po zadosti velikih celicah, da magnetno polje ne zmoti stanja v sosednjih celicah.

Novejši pristop uporablja pojav, ki se imenuje navor ob prenosu spina (angl. spin transfer torque, STT). Tu se uporablja dejstvo, da je spin vrtilna količina, sprememba vrtilne količine na enoto časa pa je navor. Če morajo elektroni ob prehodu v neko območje spremeniti spin, bodo ustvarili navor. Ta navor je zadosti velik, da lahko obrne magnetizacijo v aktivni magnetni plasti. Potreben tok je bistveno manjši kot pri tradicionalnem pristopu, možna je nadaljnja miniaturizacija (gostota primerljiva s čipi DRAM, torej dinamičnimi pomnilniki, kjer je podatek shranjen kot naboj na kondenzatorju) in tudi poraba energije je manjša.

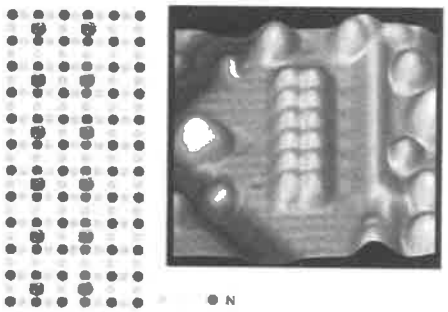
Za razliko od DRAM, kjer kondenzatorji počasi izgubljajo naboj, pri MRAM ni potrebno osveževati informacije v spominskih celicah. Podatki ostanejo trajno zapisani tudi ob izgubi napajanja. Prednost v primerjavi z bliskovnimi pomnilniki je v tem, da ob pisanju ne pride do poškodb celice, zato ima MRAM načeloma neomejeno življensko dobo in dopušča poljubno veliko število pisalnih ciklov. Kar se tiče hitrosti, so MRAM načeloma lahko hitrejši od DRAM, saj odčitavanje temelji na meritvi napetosti namesto toka, pri DRAM pa je potrebno izprazniti kondenzator, kar traja nekaj časa. Hitrost je primerljiva z SRAM (statičnimi pomnilniki, izdelanimi v obliki bistabilnih tranzistorskih vezij flip-flop), vsekakor pa veliko večja od bliskovnih pomnilnikov.

MRAM je sicer že na trgu, vendar kljub svojim številnim velikim prednostim še ne more tekmovati z bliskovnimi pomnilniki, razen za nekatere posebne namene (denimo za zelo hitro pisanje). Gotovo pa ima potencial postati ena izmed vodilnih pomnilniških tehnologij.

16.5 Prihajajoče tehnologije

V bližnji prihodnosti pričakujemo na trgu še nekatere druge nove tehnologije za hranjenje podatkov: memristorske pomnilnike[2], PCM RAM (phase-change memory) in DWM (domain-wall memory, tudi race-track memory).

Kaj pa je skrajna limita gostote shranjenih podatkov? Uspel je pionirski poskus, v katerem so spreminjali spinsko stanje nanostrukture, sestavljene iz zgolj 12 atomov železa na posebej pripravljeni površini bakra, slika 16.5. Struktura ima dve možni magnetni stanji, med katerima je možno preklapljati. V času trajanja poizkusa niso opazili spontanih preklopov, torej je Néelov relaksacijski čas dolg vsaj 17 ur. Povedati pa je treba, da je bil poskus opravljen pri zelo nizkih temperaturah (nekaj sto milikelvinov nad absolutno ničlo) in da je tehnično zelo zahteven. Od takšne konceptualne demonstracije do delujoče tehnologije je zelo dolga pot, gotovo več desetletij.



Slika 16.5. Nanostruktura iz $2 \times 6 = 12$ atomov železa na tanki plasti bakrovega nitrida na kristalu bakra. Slika je posneta z vrstičnim tunelskim mikroskopom. Vir: Loth et al., Science **335**, 196 (2012).

[2]Memristor (= memory resistor, spominski upornik) je elektronska komponenta, pri kateri obstaja povezava med pretočenim nabojem in fluksom (integralom napetosti po času).

Razno

Oznaka	vrednost	ime
h	$6{,}62 \times 10^{-34}$ Js	Planckova konstanta
$\hbar$	$1{,}05 \times 10^{-34}$ Js	reducirana Planckova konstanta
c	3×10^{8} m/s	svetlobna hitrost
k_B	$1{,}38 \times 10^{-23}$ J/K	Boltzmannova konstanta
m_e	9×10^{-31} kg	masa elektrona
e_0	$1{,}6 \times 10^{-19}$ As	osnovni naboj
μ_B	$5{,}8 \times 10^{-5}$ eV/T	Bohrov magneton
N_A	$6{,}02 \times 10^{23}$	Avogadrovo število

Tabela 1. Pomembne fizikalne konstante.

Bohrov radij:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me_0^2} = 0{,}052\,\mathrm{nm}. \tag{1}$$

Rydberg (energija, ki ustreza ionizacijski energiji atoma vodika):

$$1\mathrm{Ry} = \frac{me_0^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} = 13{,}6\,\mathrm{eV}. \tag{2}$$

Koristne zveze:

$$\begin{aligned} E(\mathrm{eV})\,\lambda(\mathrm{nm}) &= hc = 1239{,}8\,\mathrm{eV}\cdot\mathrm{nm}, \\ \frac{e_0^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c} &\approx \frac{1}{137}, \\ 1\,\mathrm{eV} &\approx k_B\,12\,000\,\mathrm{K}. \end{aligned} \tag{3}$$

Paulijeve matrike:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Literatura

- Gershenfeld: *The Physics of Information Technology*, Cambridge University Press, New York, 2000.
- Nielsen, Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univeristy Press, New York, 2000.
- Papadopoulos: *Solid-State Electronic Devices*, Springer, New York, 2014.
- Ashcroft, Mermin: *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976.
- Natelson: *Nanostructures and Nanotechnology*, Cambridge University Press, New York, 2015.
- Strnad: *Fizika* (1.-4. del), DMFA – založništvo, Ljubljana.

ZBIRKA IZBRANIH POGLAVIJ IZ FIZIKE

Izdajajo: Oddelek za fiziko Fakultete za matematiko in fiziko
Društvo matematikov, fizikov in astronomov Slovenije
DMFA – založništvo

3. M. Rosina, *Jedrska fizika*, 1969, 1977, 1981, 2016
9. M. Gros in dr., *Naloge iz fizike*, 1972, 1973, 1980, 1984, 1985, 1986, 1987, 1991, 1993, 1996, 1997, 2010, 2013
12. F. Ahlin, I. Kuščer, A. Moljk in J. Strnad, *Izpitna vprašanja iz fizike*, 1977, 1984, 1987, 1989, 1993, 2000
23. J. Pahor in D. Ponikvar, *Elektronski praktikum za fizike*, 1989, 1992, 1997, 2009
24. B. Golli, *Kvarkovski modeli hadronov*, 1991
25. J. Strnad, *Na pot k Schwarzschildu*, 1991
26. A. Likar, *Osnove fizikalnih merjenj in merilnih sistemov*, 1992, 2001, 2011
28. J. Strnad, *Izpitna vprašanja iz fizike II*, 1993, 1997
29. J. Strnad, *Homogeno gravitacijsko polje*, 1994
30. M. Rosina, *Višja kvantna mehanika*, 1995
31. J. Strnad, *Začetki kvantne statistične mehanike*, 1997
32. B. Majaron, M. Mikuž in T. Ramšak, *Kolokvijske naloge iz fizike I*, 1998, 2000, 2003, 2010
33. P. Prelovšek, *Teorija trdne snovi*, 2000
34. J. Strnad, *Odkritje razcepa*, 2000
36. I. Muševič, *Izpitna vprašanja iz fizike za kemike*, 2002
37. I. Muševič, *Izpitna vprašanja iz fizike za tekstilne, konfekcijske in grafične tehnike*, 2002
38. I. Drevenšek–Olenik, B. Golob in I. Serša, *Naloge iz fizike za študente tehniških fakultet*, 2003, 2008, 2013
39. Ž. Šmit, *Spektroskopske metode s pospešenimi ioni*, 2003
40. F. Cvelbar, *Merjenje ionizirajočega sevanja*, 2003
41. J. Pahor, *Elektronika za fizike*, 2004, 2009
42. P. Ziherl in G. Skačej, *Rešene naloge iz termodinamike*, 2005, 2007, 2010
43. A. Likar, D. Cvetko in G. Planinšič, *Zgledi iz fizikalnih merjenj*, 2005, 2011
44. G. Skačej in P. Ziherl, *Rešene naloge iz statistične fizike*, 2005, 2009
45. A. Mohorič, *Rešene naloge iz fizike I za fizikalno merilno tehniko*, 2007
46. S. Gaberšek, G. Skok in R. Žabkar, *Rešene naloge iz osnov meteorologije*, 2007, 2013
47. A. Mohorič, *Rešene naloge iz fizike II za fizikalno merilno tehniko*, 2010
48. D. Arčon, *Rešene naloge iz elektromagnetnega polja*, 2010
49. B. Borštnik, *Fizika za študente visokih šol*, 2011
50. S. Čopar, D. Svenšek, A. Mohorič, S. Prelovšek Komelj, *Rešene kolokvijske naloge iz fizike I in II*, 2016
51. R. Žitko, *Kvantne in računalniške tehnologije*, 2017

ZBIRKA IZBRANIH POGLAVIJ IZ FIZIKE

Izdajajo: Oddelek za fiziko Fakultete za matematiko in fiziko
Društvo matematikov, fizikov in astronomov Slovenije
DMFA – založništvo

Založilo: DMFA – založništvo, Jadranska ulica 19, 1000 Ljubljana
http://www.dmfa-zaloznistvo.si/

Odgovorni urednik Simon Širca

51.

Rok Žitko

KVANTNE IN RAČUNALNIŠKE TEHNOLOGIJE

Knjiga je bila strokovno pregledana
Tehnični urednik Matjaž Zaveršnik

© 2017 DMFA – založništvo – 2012

Natisnila tiskarna Itagraf v nakladi 200 izvodov
Ljubljana 2017

Cena: 16,00 EUR

Rok Žitko je doktor fizikalnih znanosti, višji znanstveni sodelavec na Institutu "Jožef Stefan" in docent na Fakulteti za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani.