Kvantna fizika (Obvezno glej slike)

Pri prehodu iz 19. v 20. stoletje so nastopile težave ne samo pri opisu pojavov pri $v \to c$ ampak tudi v mikroskopskem svetu na ravni atomov in atomskih jeder. Za večino problemov, ki jih bomo spoznali bo zadoščala nerelativistična obravnava.

Doslej smo bili vajeni, da lahko fizikalne količine (zlasti energija, vrtilna količina) zavzemajo poljubne vrednosti. V kvantni fiziki to **<u>ni</u>** več res.
Energija se v fizikalnih sistemih spremeni (oz. izmenja) samo v določenih **»obrokih« = Kvantih (lat. quantum)**.
Spomnimo se lahko na že poznani kvantiziran električni naboj (Milikanov poskus, 1909): $e_0, 2e_0, \dots$

V kvantnem svetu se zabrise razlika med valovanjem in delci. Valovanje se včasih »obnaša« kot delec in delci »dobijo« valovne lastnosti. Temu lahko imenitno rečemo **»valovno-delčna dualnost«** (wave-particle duality), čeprav nam to ne pove veliko.

<u>Najbolj pretresljivo</u> je to, da ni več absolutnih napovedi obnašanja fizikalnega sistema (npr. točnih trajektorij). Napovemo lahko samo verjetnosti izidov merjen/meritev.

Sevanje črnega telesa

Od tod so prišle prve indikacije za kvantno naravo sevanja.
Absorpcija svetlobe na telesu → Povečana energija atomov (na »vzmeteh« v kristalni strukturi) → Telo se ogreje → Pospešeni delci (e^-) sevajo → Energija se izseva → Telo se ohladi

Ko je absorpcija = emisiji imamo **<u>termično ravnovesje</u>**.
Vsa telesa pri $T \neq 0$ sevajo termično/toplotno sevanje

Telo, ki absorbira <u>vse</u> vpadno sevanje imenujemo **<u>Črno telo</u>**.

Wienov zakon

Pove, da ima porazdelitev sevanja črnega telesa pri različnih temperaturah maksimum pri različnih valovnih dolžinah. Valovna dolžina maksimuma je obratno sorazmerna z temperaturo:

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}; \qquad b = 2.9 \cdot 10^{-3}\ m\,K$$

(enote so meter Kelvin)

Štefanov zakon

Jožef Štefan je empirično pokazal, da za gostoto energijskega toka črnega telesa velja:

$$j = \sigma T^4; \qquad \sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$$

Gostota toka iz statistične fizike

Črno telo si v abstraktnem približku predstavljamo kot neko prazno votlino, v katero vpadajo žarki skozi tanko špranjo. Od povprečen ja po kotnih sipanja dobimo relacijo:

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

Rezultat iz statistične fizike nam pove, koliko nihajnih načinov je v votlini. To je:

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

Stetje nihajnih načinov v votlini je analogno stetju načinov nihanja na struni (1D) ali na opni (2D).

Rayleigh-Jeansov zakon (Klasična predstava)

V klasični predstavi vemo, da naj bi vsak nihajni način prinesel $k_B T$ energije. S tem dobimo **Rayleigh-Jeansov zakon**:

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

Ta »zakon« lahko jemljemo kot približek, ki dobro deluje za velike valovne dolžine ampak zelo zgreši za kratke valovne dolžine. To nesoglasje med opazovanji in napovedi iz klasične fizike je znano kot **Ultravijolična katastrofa**

$$\int_0^\infty w_\lambda(\lambda; T) d\lambda \to \infty$$

Planckov zakon

Planck (1900): Dal empirično formulo, ko ji je izpeljal ob privzetku, da so energije nihajočih nabojev (torej, sevanja, ki ga oddajajo) lahko samo mnogo kratniki $\mathcal{E}: 0, \mathcal{E}, 2\mathcal{E}, \ldots$ Kjer je $\mathcal{E}$ sorazmerna s frekvenco oscilatorjev

$$E_n = n\mathcal{E} = nh\nu = n\frac{hc}{\lambda}$$

kjer je h **Planckova konstanta**, $h\nu$ pa predstavlja en **kvant** (obrok) **energije izsevanega fotona**. **Planckov zakon** za sevanje črnega telesa je torej:

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

Izpeljava Planckovega zakona

Potrebujemo tri reci:

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

a)

Struna (1D), dovoljene taksne λ, da je $\sin\left(\frac{2\pi L}{\lambda}\right) = 0 \to \lambda_n = \frac{2L}{n} \to \nu_n = \frac{c}{\lambda_n} = \frac{cn}{2L}$

V 3D:

$$\nu = \frac{c}{2L}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad oz. \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{2L}{c}\nu\right)^2$$

To je kot da bi računali »$4\pi r^2 \Delta r$« v prostoru frekvenc. (Glej skice v zvezku)

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

V resnici je se 2x več načinov, ker ima lahko vsak foton dve polarizaciji. Torej število nihajnih načinov na frekvenčni interval:

$$N_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}V$$

Tako lahko zapišemo **spektralno energijsko gostoto**:

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

in **energijski tok**:

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

b) c)

Izračunamo povprečno energijo iz Boltzmannove porazdelitve:

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

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_n nh\nu\, e^{-\frac{E}{k_B T}}}{\sum_n\, e^{-\frac{E}{k_B T}}}$$

Uvedemo novo brez dimenzijsko spremenljivko $x = \frac{h\nu}{k_B T}$ in dobimo:

$$= k_B T\frac{\sum_n nxe^{-nx}}{\sum_n e^{-nx}} = \cdots = \frac{xe^{-x}}{(1-e^{-x})}$$

Sedaj lahko sestavimo skupaj vse faktorje:

$$w_\nu(\nu;T) = \frac{N_\nu}{V}\langle E\rangle = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\,k_B T\frac{xe^{-x}}{1-e^{-x}} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\,k_B T\frac{\frac{h\nu}{k_B T}}{e^{\frac{k\nu}{k_B T}}-1} =$$

$$w_\nu(\nu;T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}}-1}$$

Tako smo dobili **<u>Planckov zakon v merilu frekvenc</u>**. Ce želimo se v valovnih dolžinah:

$$w_{\lambda(\lambda;T)} = w_\nu(\nu;T)\left|\frac{d\nu}{d\lambda}\right|$$

Tako dobimo se **<u>Planckov zakon v merilu valovnih dolžin</u>**:

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

Od tod dobimo lahko energijski tok:

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

in pa integral po celotnem spektru:

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

Fotoelektrični pojav (»fotoefekt«)

Pojav je odkril Hertz leta 1887, pojasnila pa ga je Einstein leta 1905 za kar je dobil Nobelovo nagrado. Do takrat je bila »ideja« obrokov $h\nu$ sprejeta s skepso.
Einstein pa je pokazal, da kvantizacija (energije) ne velja le specifično le za črno telo, ampak je to splošna lastnost svetlobe.
Glej slike v zvezku

Presenetljivi rezultat:
Zaporna napetost U_0 je neodvisna od jakosti vpadne svetlobe
Einstein je to razložil, da namesto, da bi bila energija svetlobnega valovanja (enakomerno) porazdeljena po sredstvu/prostoru, bi bila energija svetlobe tudi sestavljena iz »kvantov« (diskretnih), od njih pa bi vsak imel:

$$h\nu=\boldsymbol{Foton}$$

Ko tak kvant zadane fotokatodo, vso njeno energijo lahko en sam e^-
Elektrone moramo izbiti iz kovine, za kar potrebujemo izstopno delo (exit work/exit function)

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

Izstopno delo določi mejno valovno dolžino pod katero svetloba ne more izbijati e^-:

$$A_i=\frac{hc}{\lambda_{min}}=h\nu_{min}$$

Rentgensko sevanje (žarki x/katodni žarki)

Glej slike v zvezku

Odkril jih je Rötgen (1895).
Fotoni nastajajo ob zaviranju e^- v polju pozitivnih jeder. To je t.i. **zavorno sevanje (Bremsstrahlung)**
Rötgen žarkov ni mogel odkloniti z magnetnim poljem ⇒ zarki »x« (nekaj neznanega)
Ugotovil pa je, da imajo $\lambda\approx 0.1nm$ (po uklonu ob prehodu skozi zaslonko)

Meritev spektra rentgenske svetlobe je pokazala tri značilnosti/**presenečenja:**

- Gladki (zvezni) del spektra → od zavornega sevanja
- **Ostre črte**, t.i. karakteristični del spektra → popolnoma nejasno, od kod
- Spekter je bil odrezan pri λ_{min}

Določitev λ_{min} (Rad vpraša)

Elektroni imajo maksimalno energijo eU ce jih iz katode pospešimo z U:

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

Braggov pogoj

Gledamo konstruktivno interference pri odboju iz kristalne mreže (*Skica zvezek*):

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

Comptonov pojav

Relativističen pojav, ki je bil prvič opazen pri sipanju rentgenske svetlobe na (skoraj) prostih e^- v atomih. (Kasneje tudi na drugih energijskih/prostorskih skalah)

Glej sliko v zvezku

Iz ohranitve energije dobimo:

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \qquad (i)$$

Iz ohranitve gibalne količine dobimo:

Za p_x:

$$h\nu = h\nu'\cos\theta + pc\cos\phi \qquad (ii)$$

Za p_y:

$$h\nu'\sin\theta = pc\sin\phi \qquad (iii)$$

Kvadriramo (ii) in (iii) ter ju sestejemo:

$$p^2c^2(\cos^2\phi + \sin^2\phi) = (h\nu - h\nu'\cos\theta)^2 + (h\nu'\sin\theta)^2$$
$$= (h\nu)^2 + (h\nu')^2(\cos^2\theta + \sin^2\theta) - 2h\nu h\nu'\cos\theta$$

$$p^2c^2 = (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2h\nu h\nu'\cos\theta$$

S kvadriranjem (i) dobimo:

$$h^2(\nu - \nu')^2 + 2h(\nu - \nu')mc^2 - m^2c^4 = p^2c^2 + m^2c^4$$

Od prej vstavimo p^2c^2:

$$h(\nu - \nu')mc^2 = h^2\nu\nu'(1 - \cos\theta)$$

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta); \quad \lambda_c = \frac{h}{mc}$$

kjer je λ_c **Comptonska valovna dolžina** (npr. $2.4 \cdot 10^{-3}\ nm$ za elektron)

Limite:

- $\theta = 0°$, e^- miruje tudi po trku, $\lambda = \lambda'$
- $\theta = 90°$, $\lambda' = \lambda + \lambda_c$
- $\theta = 180°$, e^- odleti v smeri vpadnega γ, max možna $\Delta\lambda = 2\lambda_c$

Atomski spektri

Ne samo pri zavornemu sevanju, črnemu telesu ampak tudi pri vzbujanju atomov, opazimo, da atomi lahko sprejemajo ali oddajo energijo le v »obrokih« (kvantih). *Glej slike v zvezku*

Bohrov model vodikovega atoma

Ta model odlično napove spekter ampak sicer **ni pravilen**. Bohr je naredil poenostavitev in rekel, da elektron kroži po krožnici okoli protona.

$$H = p^+ + e^- = "Sonce\ +\ Zemlja"$$

Coulombski potencial:

$$V(r) = -\frac{kZe^2}{r}; \qquad k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

Ta izpeljava je dobra tudi za naboj jedra $+Z_e$in en e^-(npr. za He^+, Li^{2+})
Centripetalna sila:

$$F_c = \frac{kZe^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \quad \rightarrow \quad v = \sqrt{\frac{kZe^2}{m_e r}}$$

Klasično bi moral elektron, kot pospešen naboj, sevati s frekvenco, ki je enaka frekvenci kroženja:

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

Tu prepoznamo virialni teorem za silo $1/r^2$, torej $T = -\frac{1}{2}V$. Lahko pa dobimo celotno energijo:

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

Zaradi sevanja (izgube energije) bi se moral e^- gibati po vedno manjših krožnicah (spirala), posledično torej vedno večje frekvence itd. itd., in to vse naj bi se zgodilo v $\approx 1\mu s$.
Drug problem je, da **ni črt**.

Bohrovi privzetki

1. Elektroni se lahko gibljejo po točno določenih orbitah, ne da bi sevali. Tem orbitam je rekel **Stacionarna stanja**
2. Atom seva, ko elektron preide iz enega stacionarnega stanja v drugega. Frekvenca izsevane svetlobe je:
$$h\nu = E_{zac} - E_{konc}$$
3. *Korespondenčno načelo:* V limiti velikih orbit/velikih energij/visokih vzbuditev/visokih kvantnih števil se morajo kvantni rezultati ujemati s klasičnimi.

Prvi privzetek se ni obdržal (treba je rešiti Schrödingerjevo enačbo za e^- v polju jedra). **Druga dva pa sta ostala v veljavi**.

Vrtilna količina e^-, ki »kroži« okoli jedra (Bohrov radij)

Bohr je **kvantiziral** tirno vrtilno količino:

$$\Gamma = m_e v r = n\hbar = n\frac{h}{2\pi}$$

Številu n je rekel **Kvantno število**, ki ga je uporabil za klasifikacijo (»knjigovodstvo«) orbit in splošneje kvantnih stanj kasneje.
Od tod sledi za polmer orbit:

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

Oz.

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{m_e kZe^2} = \frac{n^2 r_B}{z}$$

kjer je r_B **Bohrov radij**:

$$r_B = \frac{\hbar^2}{m_e K e^2} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.0529\ nm$$

Celotna energija

Celotno energijo e^- v polju p dobimo:

$$E_n = -\frac{kZe^2}{2r_n} = -\frac{kZe^2}{2}\left(\frac{m_e kZe^2}{n^2\hbar^2}\right) = -\frac{m_e k^2 Z^2 e^4}{2n^2\hbar^2}$$

Oz.

$$E_n = -E_0\frac{z^2}{n^2} \qquad E_0 = \frac{m_e k^2 e^4}{2\hbar^2} = 13.6\ eV$$

Tudi energije e^- so kvantizirane!

Ali velja korespondenčno načelo?

Kvantno:

$$h\nu = E_0 Z^2\left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2}\right) = E_0 Z^2\frac{(2n-1)}{(n-1)^2 n^2}$$

Upoštevamo $n \gg 1$:

$$\approx E_0 Z^2\frac{2}{n^3} = \frac{Z^2 m_e k^2 e^4}{\hbar^2 n^3}$$

Klasično:

$$h\nu_{kl} = h\frac{v}{2\pi r}$$

Upoštevamo $m_e r v = n\hbar$ in $r = \frac{n^2\hbar}{m_e k Z e^2}$:

$$= h\frac{\left(\frac{n\hbar}{m_e r}\right)}{2\pi r} = \frac{n\hbar^2}{m_e r^2} = \frac{Z^2 m_e k^2 e^4}{\hbar^2 n^3}$$

Torej **velja**.

De Brogliejeva hipoteza

Vedel je, da se svetloba obnaša kot delci (»kvanti energije«). V doktoratu je predpostavil, da obratno velja za delce, ki bi se »**obnašali kot valovanje**«

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad \nu = \frac{E}{h}$$

kjer je p gibalna količina.

Za fotone je to avtomatsko izpolnjeno, kajti za brezmasne delce velja $E = pc = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$
Po de Broglieju naj bi to veljalo tudi za delce z maso.

To je hotel združiti z Bohrovo sliko in kvantizacijo vrtilne količine v H atomu:

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

$$\sigma = 2\pi r = \frac{nh}{m_e v} = n\lambda$$

Glej spet sliko v zvezku
Tega pojava prej niso opazili, ker so te λ za delce res majhne.

Davidon-Germer (glej slike)

Meritev »valovne dolžine« elektrona. Gledala sta interferenco elektronov na kristalu Ni. Podatki so kazali močan maksimum pri $\phi = 50°$ za $T = 54\ eV$. Vemo, da konstruktivno interferenco dobimo pri:

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

Razmik med kristalnimi ravninami:

$$d = D\sin\alpha \Rightarrow n\lambda = 2D\sin\alpha\cos\alpha = D\sin 2\alpha \ \ oz.\ \ n\lambda = D\sin\phi$$

Razmik D sta poznala iz uklona žarkov x: $D = 0.215\ nm$. Iz izmerjenega kota $\phi = 50°$ sledi:

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

Vrednost, ki jo dobimo po de Brogliejevi formuli pa je:

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

Opis »valovanja delcev« (»matter waves«)

Ravni val v klasični fiziki: Interferenca e^- na kristalu bi pojasnili, če bi elektronskemu curku pripisali ravno valovanje:

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

Kaj so valovi pri delčnem valovanju? Odgovor je dal **Max Born**. Valovi so **Valovna funkcija** oz. **verjetnostna amplituda**. in jo označimo s psi:

$$\Psi \in \mathbb{C}$$

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

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

Verjetnostna gostota je realna. Verjetnost da delec ob času t najdemo na $[x, x+\Delta x]$ je:

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

Seveda pa veljata nenegativnost in normalizacija:

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

Za nase ravno valovanje torej:

$$\Psi(x,t) = Ae^{-i(\omega t - kx)}; \quad A \in \mathbb{C}$$
$$\rho(x,t) = \Psi^*\Psi = |A^2|$$
$$A = \frac{1}{\sqrt{l}} \quad \rightarrow \quad \int_0^l \rho(x,t)dx = 1$$

Ta valovna funkcija ne ustreza naši predstavi o delcu (»kroglici«), ki se giblje s hitrostjo v vzdolz osi x
⇒ Delec bi radi **lokalizirali** (*Glej slike*)

Superpozicija valov

Najprej sestavimo dve valovanji z malce različnima k (*Glej slike*)

$$k_1 = k + \Delta k, \quad \omega_1 = \omega + \Delta\omega$$
$$k_2 = k - \Delta k \quad \omega_2 = \omega - \Delta\omega$$

$$\Psi(x,t) = A\left(e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} + e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)}\right) = A\left(e^{-i(\omega t + \Delta\omega t - kx - \Delta kx)} + e^{-i(\omega t - \Delta\omega t - kx - \Delta kx)}\right)$$
$$= Ae^{-i(\omega t - kx)}\left(e^{-i(\Delta\omega t - \Delta kx)} + e^{i(\Delta\omega + \Delta kx)}\right) = 2Ae^{-i(\omega t - kx)}\cos(\Delta\omega t - \Delta kx)$$

$$\rho_{1,2}(x,t) = \left|\Psi_{1,2}(x,t)\right|^2 = 4|A|^2\cos^2(\Delta\omega t - \Delta kx)$$

Pri predavanjih smo potem sešteli se $N = 6$ valov, radi pa bi dosegli limito $N \to \infty$. Napišemo:

$$k_n = k \pm \frac{n\Delta k}{N}, \quad \omega_n = \omega \pm \frac{n\Delta\omega}{N}; \qquad n = 1,2,\dots,N$$

Sedaj zapišemo:

$$\Psi(x,t) = A \lim_{N\to\infty} \sum_{n=-N}^{N} \exp\left[-i\left(\omega t + \frac{n}{N}\Delta\omega t - kx - \frac{n}{N}\Delta k x\right)\right]$$

Uvedemo $u = n/N$, $dn = N du$ in vsoto prevedemo na integral:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= Ae^{-i(\omega t - kx)} N \int_{-1}^{1} \exp[-i(\Delta\omega t - \Delta k x)u] du \\ &= Ae^{-i(\omega t - kx)} \frac{N}{-i(\Delta\omega t - \Delta k x)} \left[e^{-i(\Delta\omega t - \Delta k x)} - e^{i(\Delta\omega t - \Delta k x)}\right]\end{aligned}$$

$A = \frac{a}{2N}$, da bo vsota končna $\left(\approx \frac{1}{N}\right)$.Naredili smo **<u>Valovni paket</u>**:

$$\Psi(x,t) = ae^{-i(\omega t - kx)} \frac{\sin(\Delta\omega t - \Delta k x)}{\Delta\omega t - \Delta k x}$$

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = |a|^2 \frac{\sin^2(\Delta\omega t - \Delta k x)}{(\Delta\omega t - \Delta k x)^2}$$

Gaussov valovni paket

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

$$\psi(x) = \int A(k) e^{ikx} dx; \qquad A(k) = A_0 e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}}$$

kjer je $A(k)$ Gaussovka, σ_k pa negotovost gibalne količine.

$$\psi(x) = A_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + ikx\right] dk$$

To dopolnimo do popolnega kvadrata:

$$\begin{aligned}&= A_0 \int_{\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{k-k_0}{\sqrt{2}\,\sigma_k} - \sqrt{2} i \sigma_k x\right)^2 - \sigma_k^2 x^2 + ik_0 x\right] dk \\ &= A_0 e^{-\sigma_k^2 x^2 + ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{k-k_0}{\sqrt{2}\,\sigma_k} - \sqrt{2} i \sigma_k x\right)^2\right] dk\end{aligned}$$

Za novo spremenljivko vpeljemo $u = \frac{k-k_0}{\sqrt{2}\,\sigma_k} - \sqrt{2} i \sigma_k x,\ du = \frac{dk}{\sqrt{2}\sigma_k}$

$$\psi(x) = \sqrt{2}\sigma_k A_0 e^{-\sigma_k^2 x^2 + ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{2}} du$$

Tako smo dobili **<u>Gaussov valovni paket</u>**:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\sigma_x} A_0 \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) e^{ik_0 x}; \quad \sigma_x = \frac{1}{2\sigma_k}$$

kjer je σ_x negotovost v kraju.

Načelo nedoločenosti (uncertainty principle)

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

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

Širino verjetnostne gostote (po nekem merilu) lahko tolmačimo kot negotovost/nezanesljivost s katero lahko določimo lego tega delca.

Vzemimo običajni valovni paket ob času $t = 0$. Vrh ima v izhodišču, prvi minimum pa ko

$$\sin(\Delta k \Delta x) = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta k \Delta x = \pi \quad \Rightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\Delta k}$$

$$\sigma_p = \hbar \Delta k \qquad \Delta x \equiv \sigma_x = \frac{\pi \hbar}{\sigma_p} \Rightarrow \sigma_x \sigma_p = \pi \hbar = \frac{h}{2}$$

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

$$\sigma_x \sigma_o \geq \frac{\hbar}{2}$$

Enačaj dosežemo pri Gaussovem paketu. Temu pravimo **Heisenbergovo načelo nedoločenosti**.

Zanimiv primer: »Izpeljava« energije osnovnega stanja H atoma (Bohrov model) iz načela nedoločenosti

Imamo energijo:

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

Ce vzamemo za red velikosti negotovost lege kar $\Delta x \approx r$:

$$(\Delta p)^2 = \overline{p^2} \geq \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} = \frac{\hbar^2}{r^2}$$

Dobimo energijo:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{ke^2}{r}$$

Kje ima ta energija minimum in koliko znaša?

$$\frac{\partial E}{\partial r} \Big|_{r=r_{min}} = 0 \Rightarrow r_{min} = \frac{\hbar^2}{ke^2 m_e} = r_B \qquad E_{min} = -\frac{k^2 e^4 m_e}{2\hbar^2} = -13.6\ eV$$

Sipanje delcev na reži

Reža širine a, ki je primerljiva z de Brogliejevo valovno dolžino delcev v curku ki pada na režo. (*Glej sliko*)

Ko pride skozi režo, ima delec:

$$\sigma_y = \frac{a}{2}$$

Gibalno količino lahko ocenimo glede na položaj prvega minimuma:

$$p_y = 0 \pm \delta p_y \qquad \frac{a}{2}\sin\theta\frac{\lambda}{2}$$
$$\delta p_y = p_x \tan\theta \approx p_x \sin\theta = p_x \frac{\lambda}{a} = p_x \frac{h}{p_x}\frac{1}{a} = \frac{h}{a} = \sigma_{p_y}$$
$$\Rightarrow \sigma_y \sigma_{p_y} = \frac{a}{2}\frac{h}{a} = \frac{h}{2}$$

Nedoločenost energije in časa

Spet imejmo valovni paket:

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

ki ima prvi minimum pri $\sin(\Delta\omega t_0) = 0$. Delec mimo nas potuje $\approx$ na $[-t_0, t_0]$. Delec ima energijo $E = \hbar\omega$, toda v valovnem paketu je vec frekvenc $[\omega - \Delta\omega, \omega + \Delta\omega]$. Iz tega sledi da tudi energija ni tocno dolocena!

Nedoločenost energije: $\sigma_E = \hbar\Delta\omega$

$$\sin(\Delta\omega t_0) = 0 \ \Rightarrow \Delta\omega t_0 = \pi$$
$$t_0 \equiv \sigma_t = \frac{\pi}{\Delta\omega} = \frac{\hbar\pi}{\hbar\Delta\omega} = \frac{h}{2\sigma_E} \Rightarrow \quad \sigma_t\sigma_E \geq \frac{h}{2}$$

To je samo **načelo** (nedokazljivo, a deluje). Očitno je v nasprotju z eksaktno napovedjo trajektorij. Napovedujemo lahko samo verjetnosti, da je delec npr. med $x = a$ in $x = b$.

Obnašanje (kvantnih) sistemov je <u>ne</u>deterministično.
Načelo nedoločenosti v makroskopskem svetu ne pride do izraza (fluktuacije tako majhne, da ne igrajo nobene vloge)

Interferenčni poskusi z delci (»two slit experiment«)

λ (de Broglie) mora biti primerljiv z razmikom med režama a.

a) Pod koti θ, kjer velja $a\sin\theta = n\lambda$ pričakujemo konstruktivno interferenco
b) Ce posamezno režo zapremo interferenčni vzorec izgine. Imamo samo uklonsko sliko, kot jo pričakujemo z ene same reze
c) Enako, samo da smo zaprli drugo režo
d) Odpremo obe rezi, nanju pošiljamo posamezne elektrone. Dobimo sliko a). **Delci interferirajo sami s seboj!**

Lahko merimo skozi katero režo je sel elektron:

To res lahko storimo in ugotovimo skozi katero režo je sel (npr. laser kot svetlobna vrata) a **<u>Interferenčna slika izgine</u>**.

<u>Delec se obnaša drugačno, če ga opazujemo, kot če ga ne?! ⇒ Kolaps valovne funkcije</u>

Ce vzamemo večjo λ svetlobe v detektorju reze, da ima manj ennergije in manj moti dobimo spet interferencno sliko, a je λ svetlobe tako velik, da ne ločimo več med režama.

Nerelativistična kvantna mehanika v 1D

Schrödingerjeva enačba

Vse delamo v 1D (smer x), vse nerelativisticno, potencialna energija $V(x)$ in sila $F = -\frac{dV}{dt}$

V klasični mehaniki bi radi $x(0), \dot{x}(0) \rightarrow x(t)\ t > 0$
V kvantni mehaniki, pa bi radi našli valovno funkcijo $\Psi(x,t)$ in potem napovedali **verjetnosti** za detekcijo delca. Potrebujemo »gibalno enačbo«.

Valovna enačba

Poglejmo prej valovno enačbo (npr. valovanje na vrvici $u = u(x,t)$)

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

Hočemo linearnost. To pomeni, da če sta u_1, u_2 rešitvi hočemo $u_1 + u_2$ tudi rešitev. Splošneje $\sum_k a_k u_k$. Radi bi obdržali načelo superpozicije, sicer za nase »snovne valove« ne bomo dobili interferenčnih pojavov. Kasneje bomo tudi videli, da potrebujemo, da bo $\Psi(x,t)$ 1. reda v časovnem odvodu

Najprej prosti delec: $(V = 0, F = -\frac{dV}{dx} = 0)$
Lokaliziran prost delec opisemo kot:

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

Od valovnih paketov vemo:

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

Ce upoštevamo se $p = \hbar k$ lahko potem izpostavimo ω in dobimo **disperzijsko relacijo za delec z maso m** (globlje ozadje: razlika med fazno in grupno hitrostjo valovanja). Torej:

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

Uvidimo lahko:

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

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

Količini $\left(\frac{\hbar i}{2m}\right) \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ in $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ sta identični

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

Časovni odvod 1. reda in odvod 2 reda po x $\Leftrightarrow$ disperzijska relacija $\boldsymbol{\omega \propto k^2}$

To Schrödingerjevo enačbo bi lahko pojmovali kot »delovanje« dveh diferencialnih operatorjev na Ψ:

$$p^2 \rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Ta diferencialna operatorja delujeta na $\Psi(x,t)$ in pomenita reprezentacijsko »pravilo« za količini p in E. To sicer ni stroga izpeljava (se je ne da) ampak je vse konsistentno z našimi željami in zahtevami. Jasno je, da v Newtonovem režimu in pri $v \rightarrow c$ ne bo dobra.

Radi bi vključili se potencial:

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

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

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

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

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

Ce hočemo, $V \neq konst.$ lahko potencial aproksimiramo s stopnicami, da dobimo odsekoma konstantni potencial. Energija je tam ves čas konstantna in velja $E = \hbar\omega$. k je na vsaki stopnički drugačen:

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

To stopničavost pošljemo v limito $\Delta x \rightarrow 0$, torej za poljuben $V(x)$ dobimo **Nestacionarno Schrödingerjevo enačbo:**

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

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

kjer je $\hat{H}$ **Hamiltonov operator (celotna energija)**:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}; \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad \hat{V} = V(x)$$

Rešitve $\cos(kx - \omega t)$ in $\sin(kx - \omega t)$ nista ok za Schrödingerjevo enačbo, ker je ta 1. reda v časovnem odvodu in to nam pove, da mora biti časovna odvisnost $\Psi(x,t)$ **kompleksna**.

Verjetnostna interpretacija $\Psi(x,t)$

Schrödinger je že sam Ψ tolmačil kot fizikalni »val« oz. reprezentacijo.
Born pa je rekel, da je Ψ samo matematicni objekt, edina opazljiva reč je $|\Psi|^2$

Osnovni argument za to je, da je $\Psi(x,t) \in \mathbb{C}$ obvezno zaradi $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$

Tok verjetnosti

Ker imamo v splošnem časovno odvisno $\rho(x,t)$ se lahko vprašamo po **Toku verjetnosti**. Poglejmo kakšnima enačbama zadoščata Ψ in Ψ^*:

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

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

Tako smo dobili **Gostoto verjetnostnega toka $\boldsymbol{j(x,t)}$**:

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

Lahko napišemo **Ohranitveni zakon za verjetnost**:

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

Časovno spremembo verjetnosti kompenzira sprememba toka/fluksa preko lokalnega območja.