

# RAČUNALNIŠKE TEHNOLOGIJE – VAJE

**Učno gradivo za študente drugega letnika Fakultete za računalništvo in informatiko Univerze v Ljubljani**

Milan Ambrožič, Rok Žitko

Verzija **RT–1.1**, februar 2015

## **PREDGOVOR**

Predmet Računalniške tehnologije je precej interdisciplinaren, saj se v njem prepletajo fizika, matematika in računalništvo. Računske naloge pri vajah iz tega predmeta so zato raznovrstne in včasih kar abstraktne, ker vključujejo tudi poglavja iz moderne fizike, predvsem iz kvantne mehanike. Zato je bilo poleg učnega gradiva za teoretični del (Rok Žitko) za pomoč študentom pripravljeno tudi to gradivo, ki vsebuje številne rešene računske zglede. Poglavja si sledijo v istem vrstnem redu kot pri knjigi za teoretični del predmeta.

Recenzent: Samo Kralj

Lektor: Jože Gasperič

Risbe in diagrami: Milan Ambrožič

© Kopiranje in razmnoževanje delov besedila in slik je dovoljeno samo z odobritvijo obeh avtorjev knjige.

## **PRIPOROČENA LITERATURA:**

- J. Strnad: Fizika, 3. del, DZS, Ljubljana 1988.
- J. Strnad: Fizika, 4. del, DZS, Ljubljana 1982.
- D. Halliday, R. Resnick, J. Walker: Fundamentals of Physics, John Wiley & Sons, Inc., New York, ZDA 2000.
- R. Osredkar: Fizika snovi in mikroelektronske tehnologije, Fakulteta za računalništvo in informatiko, Ljubljana 2003.
- M. Ambrožič: Stari kolokviji za študente FRI (spletna učilnica).

- N. W. Ashcroft, N. D. Mermin: Solid State Physics, W. B. Saunders Company, USA 1976.

**KAZALO:**

1 Nihanje in valovanje	03
2 Delci, svetloba, sevanje in interakcije	33
3 Osnovni pojmi kvantne mehanike	42
4 Kvantno računanje	77
5 Dinamika kvantnih delcev	87
6 Kvantna nedoločenost	101
7 Elektronska mikroskopija	108
8 Elektroni v snovi	113
9 Kovine, polprevodniki in izolatorji	121
10 Lastnosti in uporaba polprevodnikov	135
11 Heterostrukture, optični elementi in nanonaprave	134

# 1 NIHANJE IN VALOVANJE

## ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.1

Namesto z enačbo  $x = A \sin(\omega t + \phi)$  lahko odmik pri harmoničnem nihanju v splošnem zapišemo kot vsoto sinusnega in kosinusnega dela:

$$x = A_1 \sin(\omega t) + A_2 \cos(\omega t)$$

Izračunajte delni amplitudi  $A_1$  in  $A_2$  v primeru  $A = 8$  cm in  $\phi = \pi/6$ .

Z uporabo adicijskega izreka,  $\sin(\alpha + \beta) = \sin \alpha \cos \beta + \cos \alpha \sin \beta$ , dobimo zveze med konstantama  $A$  in  $\phi$  ter delnima amplitudama:  $A_1 = A \cos \phi = 6,93$  cm,  $A_2 = A \sin \phi = 4$  cm. ♠

## ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.2

Poiščite direktno zvezo med odmikom  $x = x_0 \cdot \sin(\omega t + \phi)$  in hitrostjo. Kolikšen del maksimalne hitrosti ima nihalo v trenutku, ko je odmik enak četrtini amplitude.

Zapišimo še enkrat odmik in hitrost, ki jo izračunamo z odvajanjem odmika pa času:

$$x = x_0 \sin(\omega t + \phi)$$

$$v = \dot{x} = \omega x_0 \cos(\omega t + \phi) = v_0 \cos(\omega t + \phi)$$

kjer smo uvedli amplitudo hitrosti  $v_0 = \omega x_0$ . Delimo prvo enačbo z  $x_0$ , drugo z  $v_0$ , obe kvadriramo in seštejemo. Dobimo:

$$\left(\frac{x}{x_0}\right)^2 + \left(\frac{v}{v_0}\right)^2 = 1$$

Izračunajmo razmerje hitrosti v primeru  $x = x_0/4$ :

$$\frac{v}{v_0} = \pm \sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} = \pm \frac{\sqrt{3}}{2}$$

Smiselna sta oba predznaka, ker se v trenutku, ko ima nek odmik od ravnovesne lege, nihalo lahko giblje v desno ali pa v levo. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.3

Enačba za odmik pri dušenem sinusnem nihanju je:

$$x = A \exp(-t/\tau) \sin(2\pi t/T + \phi)$$

Pri tem sta nihajni čas  $T$  in »relaksacijski« čas  $\tau$  znana parametra. Izrazite amplitudo  $A$  in fazni premik  $\phi$  z začetnima pogojeva:  $x(0) = x_0$ ,  $v(0) = v_0$ .

Najprej izrazimo hitrost nihala:

$$v = \dot{x} = A \exp(-t/\tau) \left[ -(1/\tau) \sin(2\pi t/T + \phi) + (2\pi/T) \cos(2\pi t/T + \phi) \right]$$

Ne pozabimo na časovno odvisnost obeh faktorjev, zato smo uporabili pravilo za odvod produkta dveh funkcij. Začetna pogoja sta:

$$x(0) = A \sin \phi = x_0$$

$$v(0) = A \left[ -(1/\tau) \sin \phi + (2\pi/T) \cos \phi \right] = v_0$$

Parameter  $A$  eliminiramo tako, da enačbi delimo med seboj, preuredimo in izračunamo  $\phi$ :

$$\phi = \text{arc cot} \left[ \frac{T}{2\pi} \left( \frac{v_0}{x_0} + \frac{1}{\tau} \right) \right]$$

Nato izračunamo še amplitudo:  $A = x_0/\sin \phi$ .

Rešimo nalogo še drugače, z uporabo kompleksnega zapisa. Zaradi Eulerjeve formule  $\exp(i\phi) = \cos \phi + i \sin \phi$  lahko odmik  $x$  zapišemo kot imaginarni del kompleksnega števila  $z$ :  $x = \text{Im}(z)$ . Torej rešujemo nalogo z uporabo kompleksnega odmika, pri čemer sta parametra  $A$  in  $\phi$  še vedno realna:

$$z = A \exp[i(-t/\tau + 2\pi t/T + \phi)]$$

$$z = A \exp[i((-1/\tau + 2\pi/T)t + \phi)]$$

Kompleksna hitrost  $V$  je enaka:

$$V = \dot{z} = A i(-1/\tau + 2\pi/T) \exp[i((-1/\tau + 2\pi/T)t + \phi)]$$

Upoštevajmo začetna pogoja:

$$x(0) = \text{Im}[z(0)] = \text{Im}[A \exp(i\phi)]$$

$$x(0) = A \sin \phi = x_0$$

$$v(0) = \text{Im}[V(0)] = \text{Im}[Ai(-1/\tau + 2\pi/T)\exp(i\phi)] \equiv \text{Re}[A(-1/\tau + 2\pi/T)\exp(i\phi)]$$

$$v(0) = A[-(1/\tau)\sin\phi + (2\pi/T)\cos\phi] = v_0$$

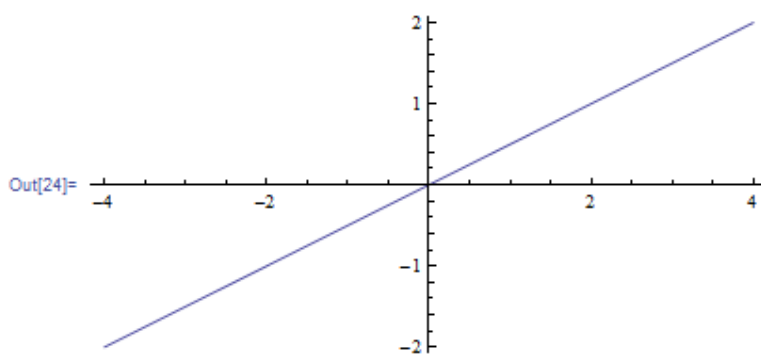
Dobimo enaki enačbi za  $A$  in  $\phi$  kot pri realnem računu zgoraj. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.4

Z osciloskopom lahko spremljamo časovni potek dveh električnih napetosti hkrati. Eno nanese na vodoravno os, drugo pa na navpično os prikazovalnika in dobimo ustrezne diagrame. Narišimo diagrame za fazno premaknjeni sinusni napetosti in racionalnim razmerjem ustreznih nihajnih časov:  $V_x = V_{x0} \cdot \sin(\omega t)$ ,  $V_y = V_{y0} \cdot \sin(k \omega t + \delta)$ . Tu sta  $V_{x0}$  in  $V_{y0}$  v splošnem različni amplitudi,  $k$  racionalno število in  $\delta$  fazno prehitevanje druge napetosti. Čas  $t$  si mislimo kot posredni parameter pri risanju grafov  $V_y(V_x)$ . Nekaj zgledov je prikazanih na slikah R1, dodana pa je tudi koda v programu Mathematica.

---

```
In[19]:= Vx0 = 4;
        Vy0 = 2;
        omega = 1;
        k = 1;
        delta = 0;
        ParametricPlot[{Vx0 * Sin[omega * t], Vy0 * Sin[k * omega * t + delta]}, {t, 0, 2 Pi}]
```

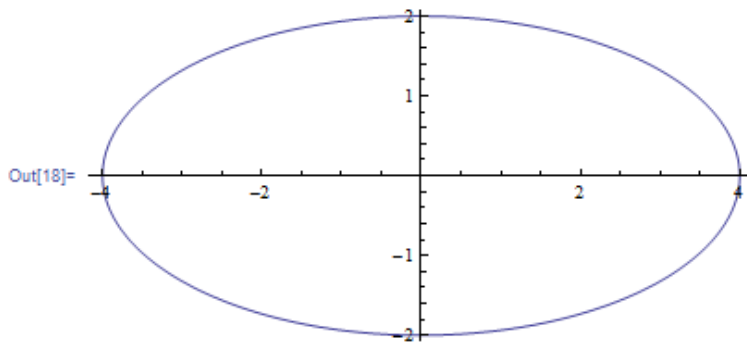


**Slika R1 a:** Graf funkcije  $V_y(V_x)$  pri  $V_{x0} = 2V_{y0}$ ,  $k = 1$  in  $\delta = 0 \rightarrow$  premo nihanje

```

In[13]:= Vx0 = 4;
         Vy0 = 2;
         omega = 1;
         k = 1;
         delta = 0.5 * Pi;
         ParametricPlot[{Vx0 * Sin[omega * t], Vy0 * Sin[k * omega * t + delta]}, {t, 0, 2 Pi}]

```

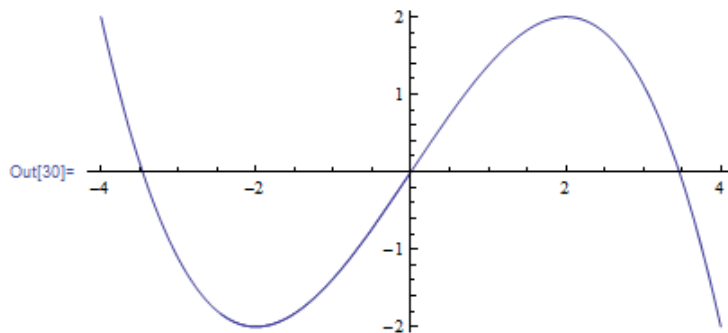


**Slika R1 b:** Graf funkcije  $V_y(V_x)$  pri  $V_{x0} = 2V_{y0}$ ,  $k = 1$  in  $\delta = \pi/2 \rightarrow$  elipsa

```

In[25]:= Vx0 = 4;
         Vy0 = 2;
         omega = 1;
         k = 3;
         delta = 0;
         ParametricPlot[{Vx0 * Sin[omega * t], Vy0 * Sin[k * omega * t + delta]}, {t, 0, 2 Pi}]

```

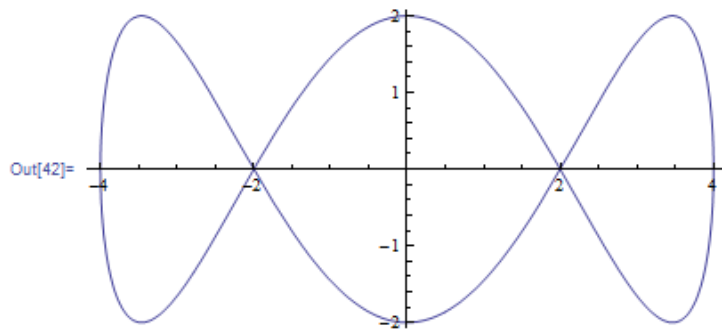


**Slika R1 c:** Graf funkcije  $V_y(V_x)$  pri  $V_{x0} = 2V_{y0}$ ,  $k = 3$  in  $\delta = 0 \rightarrow$  kubična funkcija  $V_y = (V_x/2) \cdot [3 - 4(V_x/V_{x0})^2]$  na omejenem intervalu

```

In[37]:= Vx0 = 4;
         Vy0 = 2;
         omega = 1;
         k = 3;
         delta = 0.5 * Pi;
         ParametricPlot[{Vx0 * Sin[omega * t], Vy0 * Sin[k * omega * t + delta]}, {t, 0, 2 Pi}]

```

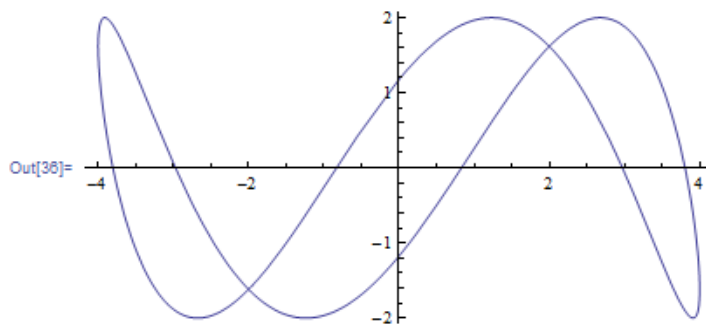


**Slika R1 č:** Graf funkcije  $V_y(V_x)$  pri  $V_{x0} = 2V_{y0}$ ,  $k = 3$  in  $\delta = \pi/2 \rightarrow$  simetrična sklenjena krivulja

```

In[31]:= Vx0 = 4;
         Vy0 = 2;
         omega = 1;
         k = 3;
         delta = 0.2 * Pi;
         ParametricPlot[{Vx0 * Sin[omega * t], Vy0 * Sin[k * omega * t + delta]}, {t, 0, 2 Pi}]

```



**Slika R1 d:** Graf funkcije  $V_y(V_x)$  pri  $V_{x0} = 2V_{y0}$ ,  $k = 3$  in  $\delta = \pi/5 \rightarrow$  nesimetrična sklenjena krivulja ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.5

Izračunajte nihajni čas nihala z maso  $m$  za majhne odmike okrog ravnovesne lege  $x = 0$ , če ima odvisnost potencialne energije (na kratko potenciala) od koordinate obliko hiperboličnega kosinusa:  $V(x) = V_0 \cosh(kx)$ .

Pri zapisu funkcije v bližini značilne točke, npr. okrog minimuma, si pomagamo s Taylorjevim razvojem. Hiperbolični funkciji  $\cosh x$  in  $\sinh x$  (mnogi uporabljajo oznaki  $ch x$  in  $sh x$ ) sta ena drugi odvod:  $(\cosh x)' = \sinh x$ ,  $(\sinh x)' = \cosh x$ . Zato je ustrezna Taylorjeva vrsta:

$$\cosh x = \cosh 0 + \frac{1}{1!} \sinh 0 \cdot x + \frac{1}{2!} \cosh 0 \cdot x^2 + \frac{1}{3!} \sinh 0 \cdot x^3 + \frac{1}{4!} \cosh 0 \cdot x^4 + \dots$$

Upoštevajmo še vrednosti  $\cosh 0 = 1$  in  $\sinh 0 = 0$ , pa je Taylorjev razvoj za hiperbolični kosinus preproste oblike:

$$\cosh x = 1 + \frac{1}{2} \cdot x^2 + \frac{1}{24} \cdot x^4 + \dots$$

Potencial je torej:

$$V(x) = V_0 \left[ 1 + \frac{1}{2} \cdot (kx)^2 + \frac{1}{24} \cdot (kx)^4 + \dots \right]$$

Sila je negativni odvod potenciala po koordinati:

$$F(x) = -V'(x) = -V_0 \left[ k^2 x + \frac{1}{6} k^4 x^3 + \dots \right]$$

Za majhne odmike  $x$  (natančneje to pomeni  $kx \ll 1$ ) obdržimo v izrazu za silo samo prvi člen:  $F \approx -k^2 V_0 x$ . Iz Newtonovega zakona  $ma = F$  sledi diferencialna enačba:

$$\ddot{x} + \frac{k^2 V_0}{m} x = 0$$

To je enačba za sinusno nihanje s krožno frekvenco:  $\omega^2 = k^2 V_0 / m$ . Nihajni čas je  $T = 2\pi / \omega$ :

$$T = \frac{2\pi}{k} \sqrt{\frac{m}{V_0}} \quad \heartsuit$$



♥ RAČUNSKI ZGLED 1.6

Sučno nihalo (vztrajnik na polžasto vzmetjo) niha sinusno po enačbi:  $\varphi = \varphi_0 \cdot \sin(2\pi t/T)$ . Dušenje zanemarimo. Pri tem je  $\varphi$  trenutni kot zasuka poljubne točke nihala iz ravnovesne lege,  $\varphi_0 = 120^\circ = 2\pi/3$  pa amplituda tega kota. Nihajni čas  $T$  je odvisen od vztrajnostnega momenta vztrajnika  $J$  in od koeficienta vzmeti  $D$ :  $T = 2\pi(J/D)^{1/2}$ . Naj bo vztrajnik jeklen valj s polmerom  $R = 10$  cm, višino  $h = 2$  cm in gostoto  $\rho = 7,8$  kg/dm<sup>3</sup>, njegov vztrajnostni moment pa je  $J = mR^2/2$ . Koeficient vzmeti je definiran kot  $D = M_1/\varphi_1$ , kjer je  $M_1$  zunanji navor, potreben, da vzmet deformiramo za kot  $\varphi_1$ . Naj bo v našem primeru:  $\varphi_1 = \varphi_0 = 2\pi/3$ ,  $M_1 = 2$  N m. Izračunajte nihajni čas. Narišite skupaj brezdimenzijska grafa, kako se s časom spreminjata koordinati  $x$  in  $y$  točke na obodu valja, ki je v mirovni legi na osi  $x$ , torej  $x = R \cos \varphi$ ,  $y = R \sin \varphi$ .

Podatki:

$$\varphi_0 = \varphi_1 = 2\pi/3$$

$$R = 10 \text{ cm}$$

$$h = 2 \text{ cm}$$

$$\rho = 7,8 \text{ kg/dm}^3$$

$$M_1 = 2 \text{ N m}$$

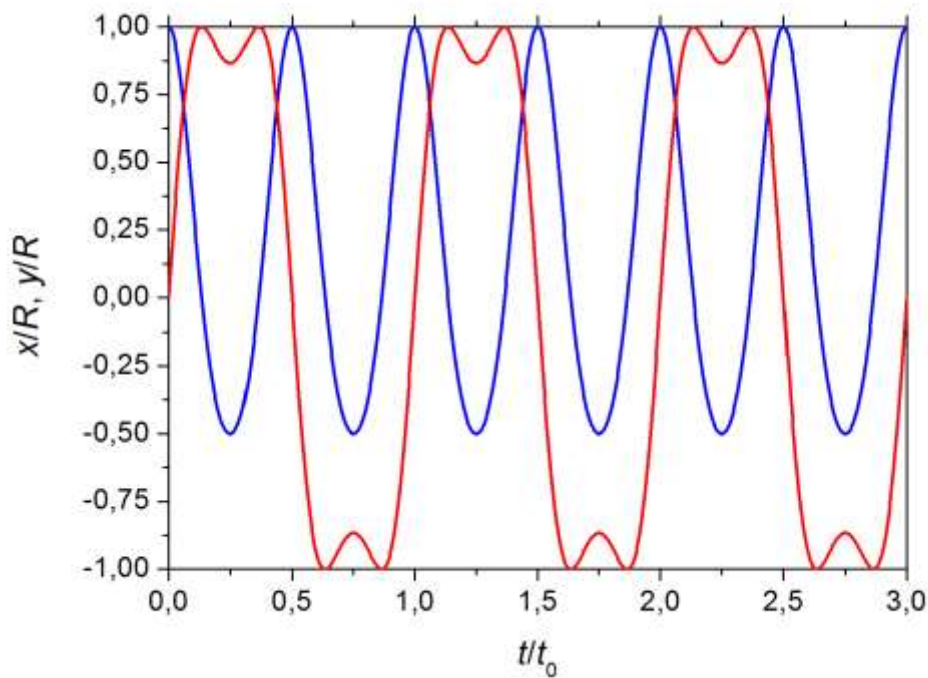
-----

$$T = ?$$

Najprej izračunajmo nihajni čas:

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{J}{D}} = 2\pi \sqrt{\frac{mR^2 \varphi_0}{2M}} = 2\pi \sqrt{\frac{(\rho \pi R^2 h) R^2 \varphi_0}{2M}} = \sqrt{\frac{2\pi^3 \rho h \varphi_0}{M}} \cdot R^2 = 1 \text{ s}$$

Zapišimo enačbi za obe koordinati:  $x = R \cos[\varphi_0 \cdot \sin(2\pi t/T)]$ ,  $y = R \sin[\varphi_0 \cdot \sin(2\pi t/T)]$ . To se zdi nekoliko nenavadno, da imamo v argumentu kotne funkcije spet kotno funkcijo, a to v fiziki ni edini primer. Vsekakor je tako sestavljena funkcija zopet periodična. Grafa sta prikazana na sliki R2. Še komentar: enačbo za nihajni čas sučnega vzmetnega nihala dobimo po analogiji z nihalom na vijačno vzmet, tako da nadomestimo:  $m \rightarrow J$ ,  $k \rightarrow D$ .

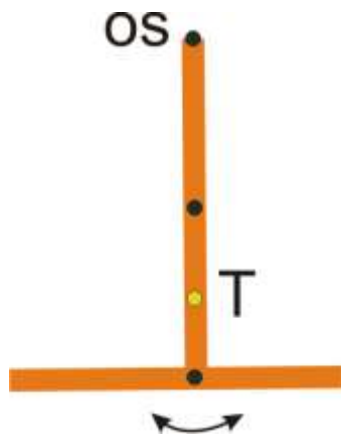


**Slika R2:** Grafa funkcij  $x(t)$  (modra krivulja) in  $y(t)$  (rdeča krivulja) v brezdimenzijski obliki

Zakaj ne sega funkcija  $x/R$  do minimalne vrednosti  $-1$  in zakaj ima krivulja  $y/R$  »vdolbine« v maksimumih in minimumih, naj si razloži s skico nihanja bralec sam. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.7

Fizično nihalo sestavimo iz dveh enakih tankih palic dolžine  $L$ , tako da ju spojimo v črko T. Os vrtenja je na zgornjem koncu zgornje palice (slika R3). Kolikšen je nihajni čas?



**Slika R3:** Fizično nihalo v obliki črke T

Najprej izračunamo lego masnega središča (težišča T) sestava palic, če legi težišči posameznih palic pa glede na vrtilno os označimo z  $y_1$  in  $y_2$ :

$$r^* = \frac{my_1 + my_2}{2m} = \frac{1}{2} \left( \frac{L}{2} + L \right) = \frac{3}{4} L$$

Vztrajnostni moment je vsota vztrajnostnih momentov obeh palic, pri tem pa moramo pri obeh upoštevati Steinerjev izrek:

$$J = 2J^* + my_1^2 + my_2^2 = 2 \cdot \frac{1}{12} mL^2 + m \left( \frac{L}{2} \right)^2 + mL^2 = \frac{1}{2} mL^2$$

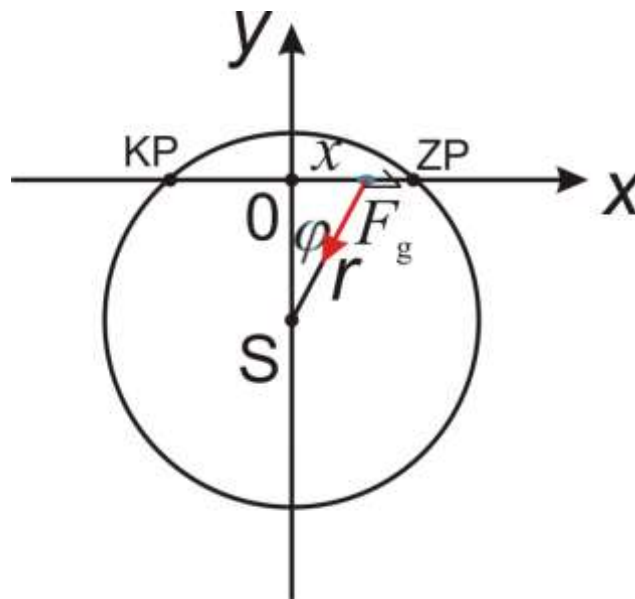
Nihajni čas je:

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{J}{mgr^*}} = 2\pi \sqrt{\frac{2L}{3g}}$$

Enačba spominja na nihajni čas matematičnega nihala, pod korenem je le dodaten faktor  $2/3$ . To podobnost je značilna za fizična nihala iz homogenega materiala. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.8

Futuristični inženirji so si zamislili vlak za dolge proge, ki ga poganja teža. Začetno in končno postajo (brez vmesnih postaj) povezuje raven evakuiran tunel pod tlemi (slika R4). Koliko časa potrebuje vlak od začetne do končne postaje?



**Slika R4:** Lega vlaka in sila teže; ZP in KP sta začetna in končna postaja. Trenutna lega vlaka je označena z modro barvo.

Ravnovesno lego vlaka na pol poti med postajama označimo z 0, središče Zemlje pa je S. Trenutna lega vlaka glede na 0 je podana s koordinato  $x$  na progi, vlak pa je od središča Zemlje oddaljen za  $r$ . V notranjosti Zemlje predpostavimo linearno odvisnost težnega pospeška od razdalje  $r$ :  $g = g_0 r/R$ , kjer je  $g_0$  težni pospešek na Zemljinem površju,  $R$  pa polmer planeta. Na vlak deluje proti središču S sila teže  $F_g = mg_0 r/R$ . Komponento teže, ki je pravokotna na tir, uravnovesi sila tira na vlak, tako da ostane samo komponenta teže v smeri osi  $x$  (v smeri tira), silo trenja in zračnega upora pa zanemarimo. Zapišimo gibalno enačbo:  $ma = F_{gx} = -mg_0 r/R \cdot \sin \varphi = -mg_0 x/R$ . Dobili smo enačbo za sinusno nihanje:

$$\ddot{x} + \frac{g_0}{R} x = 0$$

Kvadrat krožne frekvence je:  $\omega^2 = g_0/R$ . Nihajni čas je  $T = 2\pi/\omega$ :

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{R}{g_0}}$$

Čas od začetne do končne postaje (desna in leva skrajna lega nihanja) je enak polovici nihajnega časa:

$$t = \pi \sqrt{\frac{R}{g_0}} = 42 \text{ min}$$

Uporabili smo podatka:  $g_0 = 9,8 \text{ m/s}^2$ ,  $R = 6400 \text{ km}$ . Izračunani čas je neodvisen od tega, kako blizu središča Zemlje je tunel. O izvedljivosti in praktičnosti te zamisli pa razmislite sami. Kot zanimivost omenimo še, da je nihajni čas takšnega gibanja, 84 min, enak obhodnemu času objekta (satelita), ki bi brez lastnega pogona krožil okrog Zemlje tik nad njenim površjem, če zanemarimo zračni upor. To ni naključje, saj igra v obeh primerih ključno vlogo gravitacija. Bolj znan je morda podatek, da je hitrost takšnega satelita okrog 8 km/s, kar imenujemo prva kozmična hitrost. Okrog Zemlje je veliko umetnih satelitov na res nizkih orbitah, okrog 200 km nad površjem. Ker je ta višina veliko manjša od polmera Zemlje 6400 km, imajo ti sateliti praktično enak čas in hitrost, kot če bi krožili tik ob površju Zemlje. Je pa še nekaj: pri 200 km višine lahko zračni upor popolnoma zanemarimo. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.9

Električni nihajni krog sestavimo iz ravnega ploščatega kondenzatorja z velikostjo plošč  $1 \text{ dm}^2$  v razmiku 1 mm ter tuljave z dolžino 10 cm, 200 ovoji in prerezom  $1 \text{ cm}^2$ . Kolikšna je frekvenca nihanja tega kroga? Kolikšna je začetna energija nihanja, če smo kondenzator napolnili pri napetosti 15 V? V koliko nihajih pade energija nihanja na 1 % začetne vrednosti, če je v krogu tolikšen upor, da je koeficient dušenja  $\beta = \omega/10$ ?

Podatki:

$$S_1 = 1 \text{ dm}^2$$

$$d = 1 \text{ mm}$$

$$l = 10 \text{ cm}$$

$$N = 200$$

$$S_2 = 1 \text{ cm}^2$$

$$U_0 = 15 \text{ V}$$

$$\beta = \omega/10$$

$$W/W_0 = 1 \%$$

-----

$$\nu = ?$$

$$W_0 = ?$$

$$N_{\text{nih}} = ?$$

Kapaciteta kondenzatorja je  $C = \varepsilon_0 S_1/d$ , kjer je  $\varepsilon_0 \approx 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$  influenčna konstanta. Induktivnost tuljave je  $L = \mu_0 N^2 S_2/l$ , kjer je  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Vs/Am}$  matematično natančno definirana indukcijska konstanta. Krožna frekvenca nihajnega kroga je torej:

$$\omega = \frac{1}{\sqrt{LC}} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0 N^2 \frac{S_1 S_2}{dl}}} = 1,5 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1},$$

frekvenca pa je  $\nu = \omega/(2\pi) = 2,4 \text{ MHz}$ . Celotna energija nihajnega kroga je kar enaka začetni električni energiji kondenzatorja, ker se med seboj pretvarjata električna in magnetna energija:

$$W = \frac{CU_0^2}{2} = \frac{\varepsilon_0 S_1 U_0^2}{2d} = 9,96 \text{ nJ}$$

Iz enačbe (1.9 b) izrazimo čas, ko pade energija na 1 % začetne vrednosti:

$$W = W_0 e^{-\beta t} \rightarrow t = \frac{1}{\beta} \ln \frac{W_0}{W} = \frac{10}{\omega} \ln 100 = 3,07 \text{ } \mu\text{s}$$

Ustrezno število nihajev je:

$$N_{nih} = \frac{t}{T} = \frac{1}{\beta} \ln \frac{W_0}{W} \cdot \frac{\omega}{2\pi} = \frac{10}{2\pi} \ln 100 = 7,33$$

V resnici v primeru dušenja krožna frekvenca ni točno tolikšna, kot smo jo izračunali zgoraj, temveč nekoliko manjša. Vendar razlika ni bistvena, če je  $\beta \ll \omega$ . Glede koeficienta  $\beta$  še komentar: tu smo ga definirali tako, da vsebuje enačba za nihajočo fizikalno količino, npr. električni tok v našem električnem nihajnem krogu, poleg sinusnega faktorja še eksponentni faktor  $\exp(-\beta t/2) \equiv \exp(-t/\tau)$ . Dvakrat večji eksponent v enačbi za energijo je zato, ker je energija sorazmerna s kvadratom amplitude toka. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.10

Dokažite, da pri konjugaciji parov kompleksnih števil veljajo relacije: a)  $(z_1 \pm z_2)^* = z_1^* \pm z_2^*$ , b)  $(z_1 z_2)^* = z_1^* z_2^*$ , c)  $(z_1/z_2)^* = z_1^*/z_2^*$ ! Dokažite, da za absolutne vrednosti kompleksnih števil velja: č)  $||z_1| - |z_2|| \leq |z_1 \pm z_2| \leq |z_1| + |z_2|$ , d)  $|z_1 z_2| = |z_1| \cdot |z_2|$ , e)  $|z_1/z_2| = |z_1|/|z_2|$ !

Kompleksni števili  $z_1$  in  $z_2$  sta  $z_1 = a_1 + b_1 i$ ,  $z_2 = a_2 + b_2 i$ . Pri konjugaciji se številu spremeni predznak imaginarne komponente, npr.  $z_1^* = a_1 - b_1 i$ .

Dokazi:

- a)  $(z_1 + z_2)^* = (a_1 + b_1 i + a_2 + b_2 i)^* = ((a_1 + a_2) + (b_1 + b_2)i)^* = a_1 + a_2 - (b_1 + b_2)i = (a_1 - b_1 i) + (a_2 - b_2 i) = z_1^* + z_2^*$ . Podobna izpeljava velja za razliko kompleksnih števil.
- b)  $(z_1 z_2)^* = ((a_1 + b_1 i) \cdot (a_2 + b_2 i))^* = (a_1 a_2 - b_1 b_2 + (a_1 b_2 + a_2 b_1)i)^* = a_1 a_2 - b_1 b_2 - (a_1 b_2 + a_2 b_1)i = (a_1 - b_1 i) \cdot (a_2 - b_2 i) = z_1^* z_2^*$
- c) Pri pravilu za količnik kompleksnih števil je dovolj, da ga pokažemo za poseben primer,  $(1/z)^* = 1/z^*$ , saj ga potem s pravilom (b) posplošimo na poljuben kvocient:

$$\left(\frac{1}{z}\right)^* = \left(\frac{1}{a+bi}\right)^* = \left(\frac{a-bi}{a^2+b^2}\right)^* = \frac{a+bi}{a^2+b^2} = \frac{1}{a-bi} = \frac{1}{z^*}$$

Za absolutno vrednost kompleksnega števila velja  $|z|^2 = z z^*$ . Pokažimo najprej pravilo (d), saj je izpeljava (e) povsem analogna:  $|z_1 z_2|^2 = (z_1 z_2)(z_1 z_2)^* = (z_1 z_2) z_1^* z_2^* = z_1 z_1^* z_2 z_2^* = |z_1|^2 |z_2|^2 \rightarrow |z_1 z_2| = |z_1| \cdot |z_2|$ . Nekoliko težja je izpeljava pravila (č). Spet računajmo najprej s kvadrati absolutnih vrednosti, obravnavajmo pa vsoto kompleksnih števil:

$$|z_1 + z_2|^2 = (a_1 + a_2)^2 + (b_1 + b_2)^2 = a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 + 2(a_1 a_2 + b_1 b_2)$$

$$(|z_1| + |z_2|)^2 = |z_1|^2 + |z_2|^2 + 2|z_1| \cdot |z_2| = a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 + 2|z_1| \cdot |z_2|$$

Izračunajmo razliko obeh izrazov in jo označimo z  $\Delta$ :

$$\Delta = 2(\sqrt{a_1^2 + b_1^2} \cdot \sqrt{a_2^2 + b_2^2} - (a_1 a_2 + b_1 b_2))$$

Da je razlika  $\Delta$  pozitivna, pa najlažje ugotovimo tako, da preverimo, da je prvi člen v oklepaju – produkt korenov večji od drugega. To pa spet preverimo tako, da je kvadrat prvega člena večji od kvadrata drugega člena. Oba kvadrata odštejemo in dobimo popoln kvadrat; podrobnosti naj zapiše bralec sam. Če pravilo splošno velja za  $z_1 + z_2$ , velja tudi za  $z_1 - z_2$ , saj samo nadomestimo  $z_2 \rightarrow -z_2$ . Tako smo dokazali desni neenačaj; dokaz za levega gre podobno. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.11

Eulerjevo relacijo  $\exp(i\theta) = \cos \theta + i \sin \theta$  dokažite z uporabo Taylorjeve vrste za vse tri funkcije. Pri eksponentni funkciji Taylorjevo vrsto za realni argument preprosto posplošimo na poljubno kompleksno število.

Taylorjeva vrsta eksponentne funkcije je:  $e^x = 1 + x + x^2/2 + x^3/6 + \dots$  V našem primeru je to:

$$e^{i\theta} = 1 + (i\theta) + \frac{1}{2!}(i\theta)^2 + \frac{1}{3!}(i\theta)^3 + \frac{1}{4!}(i\theta)^4 + \frac{1}{5!}(i\theta)^5 + \frac{1}{6!}(i\theta)^6 \dots$$

$$e^{i\theta} = 1 + (i\theta) - \frac{1}{2!}\theta^2 - i\frac{1}{3!}\theta^3 + \frac{1}{4!}\theta^4 + i\frac{1}{5!}\theta^5 - \frac{1}{6!}\theta^6 \dots$$

Pri zaporednem potenciranju imaginarne enote smo pač upoštevali  $i \rightarrow -1 \rightarrow -i \rightarrow 1 \rightarrow i \dots$

Posebej pišimo realni in imaginarni del eksponentne funkcije:

$$\operatorname{Re} e^{i\theta} = 1 - \frac{1}{2!}\theta^2 + \frac{1}{4!}\theta^4 - \frac{1}{6!}\theta^6 \dots$$

$$\operatorname{Im} e^{i\theta} = \theta - \frac{1}{3!}\theta^3 + \frac{1}{5!}\theta^5 \dots$$

To pa sta ravno Taylorjevi vrsti za kosinusno in sinusno funkcijo. ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 1.12

Nihanje atomov v ravni molekuli  $\text{CO}_2$  obravnavamo z mehanskim modelom. Na sredini je ogljikov atom z maso  $m$ , levo in desno od njega pa sta kisikova atoma z maso po  $M$ . Med ogljikovim in vsakim kisikovim atomom je vijačna vzmet s koeficientom  $k$  (slika R5). Ravnovesna razdalja C – O je  $a$  (ta podatek pa v računu sploh ne igra nobene vloge) in to je hkrati dolžina nenapete vzmeti. Obravnavajte linearno nihanje teh atomov.

Označimo odmik levega kisikovega atoma od ravnovesne lege v desno z  $x_L$ , odmik desnega kisikovega atoma v desno je  $x_D$ , odmik ogljikovega pa  $y$ . Za lažjo obravnavo enačb si mislimo naraščajoče odmike v desno:  $x_L < y < x_D$ . Tedaj sta obe vzmeti raztegnjeni, tako da se skušata zaradi sile vzmeti spet skrčiti in delujeta z ustreznimi silami na atome (slika). Zapišimo drugi Newtonov zakon za vse tri atome:

$$M\ddot{x}_L = k(y - x_L)$$

$$m\ddot{y} = -k(y - x_L) + k(x_D - y) = k(x_L + x_D - 2y)$$

$$M\ddot{x}_D = k(y - x_D)$$

Pri kisikovem atomu smo morali upoštevati obe vzmeti: leva ga vleče v levo (negativna sil), desna pa v desno (pozitivna sila). Predznaki v enačbah so pravilni, če je pri odmiku, ki ustreza pospešku v isti enačbi, negativen predznak. Pričakujemo, da nihajo vsi trije atomi z enako frekvenco, a različno amplitudo in faznim premikom. Najbolj praktično je odmike zapisati kompleksno:  $x_L = A \exp(i\omega t)$ ,  $y = B \exp(i\omega t)$ ,  $x_D = C \exp(i\omega t)$ , pri čemer so lahko kompleksne tudi amplitude  $A$ ,  $B$  in  $C$ . Še pred uporabo teh nastavkov za odmike vse tri enačbe delimo z ustrežno maso in definiramo:  $\omega_M = (k/M)^{1/2}$ ,  $\omega_m = (k/m)^{1/2}$ ; to so krožne frekvence za vzmetno nihalo s koeficientom vzmeti  $k$  in maso  $M$  ali  $m$ . Kisikova atoma imata večjo maso od ogljikovega,  $M > m$ , zato velja  $\omega_M < \omega_m$ . Tri diferencialne enačbe postanejo navadne enačbe za koeficiente  $A$ ,  $B$  in  $C$ :

$$-\omega^2 A = \omega_M^2 (B - A)$$

$$-\omega^2 B = \omega_m^2 (A + C - 2B)$$

$$-\omega^2 C = \omega_M^2 (B - C)$$

To je sistem treh homogenih linearnih enačb, ki jih prepisemo v matematično jasnejšo obliko:

$$(\omega^2 - \omega_M^2)A + \omega_M^2 B + 0 = 0$$

$$\omega_m^2 A + (\omega^2 - 2\omega_m^2)B + \omega_m^2 C = 0$$

$$0 + \omega_M^2 B + (\omega^2 - \omega_M^2)C = 0$$



V resnici je poleg koeficientov  $A$ ,  $B$  in  $C$  še neznan tudi krožna frekvenca  $\omega$ , ki pa jo v tem sistemu enačb gledamo kot parameter in ne kot neznaniko. Homogeni sistem linearnih enačb ima od nič različne rešitve samo, če je determinanta matrike sistema enaka nič:

$$\det \begin{bmatrix} \omega^2 - \omega_M^2 & \omega_M^2 & 0 \\ \omega_m^2 & \omega^2 - 2\omega_m^2 & \omega_m^2 \\ 0 & \omega_M^2 & \omega^2 - \omega_M^2 \end{bmatrix} = 0$$

Dobimo enačbo tretje stopnje za neznaniko  $\omega^2$ :

$$\omega^2 [\omega^4 - 2(\omega_M^2 + \omega_m^2)\omega^2 + \omega_M^2(\omega_M^2 + 2\omega_m^2)] = 0$$

Prva rešitev,  $\omega^2 = 0$ , pomeni samo translacijo celotne molekule, zato ni zanimiva. Hitro se namreč prepričamo, da ji ustrezajo enaki premiki:  $A = B = C$ . Zapišimo drugi dve rešitvi, ki resnično pomenita nihanje in se izkažeta za zelo enostavni:

$$\omega_1^2 = \omega_M^2$$

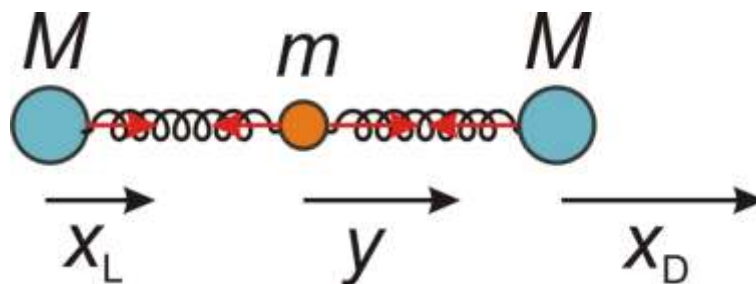
$$\omega_2^2 = \omega_M^2 + 2\omega_m^2$$

Ker pa je krožna frekvenca po definiciji pozitivna, sta končni rešitvi:

$$\omega_1 = \omega_M$$

$$\omega_2 = \sqrt{\omega_M^2 + 2\omega_m^2}$$

Fizikalna interpretacija obeh rešitev je preprosta, če vstavimo ti frekvenci v zgornji sistem enačb in izrazimo zveze med koeficienti. V prvem primeru, za  $\omega = \omega_1 = \omega_M$ , ugotovimo:  $C = -A$ ,  $B = 0$ . To pomeni, da ogljikov atom miruje (zato v enačbi za to krožno frekvenco ni mase tega atoma), kisikova pa nihata v nasprotni fazi; to je fizikalno smiselno, saj ostaja pri takšnem nihanju težišče molekule pri miru. V drugem primeru,  $\omega = \omega_2$ , pa nihajo vsi trije atomi:  $C = A$ ,  $B = -2(\omega_m^2/\omega_M^2)A = -2(M/m)A$ . Kisikova atoma nihata z enako fazo, ogljikov atom pa gre v nasprotno smer in njegov odmik ima večjo amplitudo. Spet ostaja težišče molekule pri miru:  $AM + Bm + CM = 0$ .



**Slika R5:** Molekula  $\text{CO}_2$  kot sistem treh teles in dveh vzmeti; prikazani so odmiki v desno. Vsi trije odmiki hkrati v desno so dovoljeni, če poleg nihanja vključimo še translacijo molekule. Sile vzmeti na telesa so prikazane z rdečimi puščicami.

Čprav lastnih frekvenc  $\omega_1$  in  $\omega_2$  ne moremo izračunati direktno, ker moramo poznati koeficient vzmeti  $k$  oziroma ustrezne medatomske sile, pa je razmerje obeh frekvenc neodvisno od  $k$ :

$$\frac{\omega_2}{\omega_1} = \sqrt{1 + 2 \frac{\omega_m^2}{\omega_M^2}} = \sqrt{1 + 2 \frac{M}{m}}$$

Razmerje frekvenc, ki ga lahko preverimo eksperimentalno, npr. z absorpcijo elektromagnetnega valovanja primernih valovnih dolžin, je odvisno le od razmerja znanih mas atomov obeh vrst:

$$\frac{\omega_2}{\omega_1} = \sqrt{1 + 2 \cdot \frac{16}{12}} = 1,91 \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.13

Pokažite, da splošna funkcija  $\psi(x, t) = \psi_1(x - ct) + \psi_2(x + ct)$  res zadošča valovni enačbi:

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

za poljubni funkciji  $\psi_1$  in  $\psi_2$ .

Pri dokazu bomo upoštevali, da sta funkciji  $\psi_1$  in  $\psi_2$  navadni funkciji posrednih spremenljivk  $\varphi_1 = x - ct$  in  $\varphi_2 = x + ct$ . Izračunajmo postopno oba druga odvoda (pozor na oznake za navadne in parcialne odvode!):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{d\psi_1}{d\varphi_1} \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \frac{d\psi_2}{d\varphi_2} \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} = \frac{d\psi_1}{d\varphi_1} \cdot (-c) + \frac{d\psi_2}{d\varphi_2} \cdot c$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{d^2 \psi_1}{d\varphi_1^2} \cdot (-c)^2 + \frac{d^2 \psi_2}{d\varphi_2^2} \cdot c^2 = c^2 \left( \frac{d^2 \psi_1}{d\varphi_1^2} + \frac{d^2 \psi_2}{d\varphi_2^2} \right)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{d\psi_1}{d\varphi_1} \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} + \frac{d\psi_2}{d\varphi_2} \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} = \frac{d\psi_1}{d\varphi_1} \cdot 1 + \frac{d\psi_2}{d\varphi_2} \cdot 1$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi_1}{d\varphi_1^2} \cdot 1^2 + \frac{d^2 \psi_2}{d\varphi_2^2} \cdot 1^2 = \frac{d^2 \psi_1}{d\varphi_1^2} + \frac{d^2 \psi_2}{d\varphi_2^2}$$

Drugi odvod valovne funkcije po času in koordinati res zadoščata valovni enačbi. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.14

Izpeljite valovno enačbo in ustrezno hitrost za prečno valovanje strune (prožne vrvice), ki je napeta z vzdolžno silo  $F$ . Struna je homogena: njen prerez je  $S$ , gostota materiala pa  $\rho$ .

Poglejmo sile, ki delujejo na kratek košček strune z dolžino  $dx$  in maso  $dm = \rho S dx$ . Os  $x$  naj bo usmerjena v smeri nedeformirane strune (slika R6). Zaradi geometrijske nazornosti odmik strune od osi  $x$  raje označimo s koordinato  $y$  namesto s simbolom  $\psi$ . Poudarimo, da je pri izpeljavi pravzaprav bolj kot (povprečni) odmik koščka strune in njen nagib glede na os  $x$  pomembna njena oblika (ukrivljenost). Košček na sliki ima obliko konveksne naraščajoče funkcije, tako da je njen nagib na levem koncu,  $\tan \alpha(x) \equiv \partial y / \partial x(x)$  (gl. definicijo odvoda funkcije), manjši kot na desnem koncu,  $\tan \alpha(x + dx) \equiv \partial y / \partial x(x + dx)$ . Kako je z (ne)ravnovesjem sil na takšen košček strune? Navadno so odmiki strune od osi  $x$  majhni, zato je povsod majhen tudi kot  $\alpha$ . Komponenta natezne sile  $F$  v smeri osi  $x$  je po velikosti enaka  $F_x = F \cos \alpha \approx F$ . Glede na smer  $x$  sta si torej komponenti sile na obeh koncih koščka strune približno nasprotno enaki, torej v ravnovesju, zato lahko gibanje strune v smeri osi  $x$  zanemarimo. Drugače je glede smeri  $y$ : razlika komponent obeh sil na obeh koncih koščka strune je:  $\Delta F_y = F \sin \alpha(x + dx) - F \sin \alpha(x)$ . Po Newtonovem zakonu  $dm \cdot a_y = \Delta F_y$  sledi:

$$dm \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = F \cdot [\sin \alpha(x + dx) - \sin \alpha(x)]$$

Ker je kor  $\alpha$  majhen, lahko nadomestimo  $\sin \alpha \approx \tan \alpha = \partial y / \partial x$ :

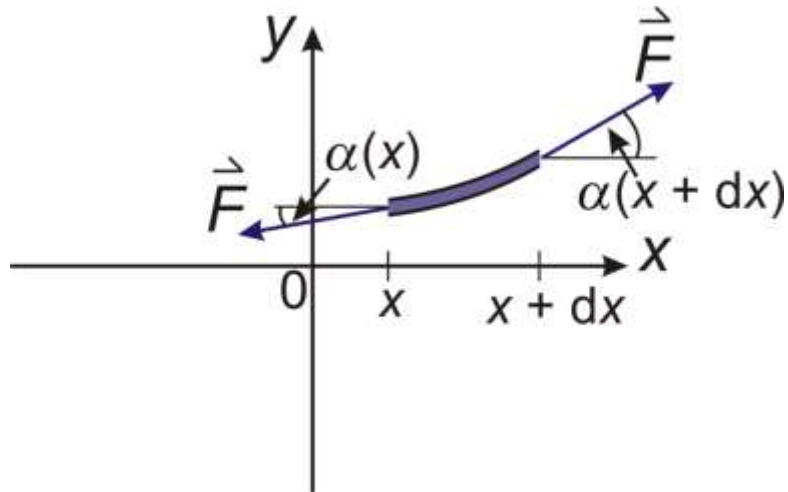
$$\rho S dx \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = F \cdot \left[ \frac{\partial y}{\partial x}(x + dx) - \frac{\partial y}{\partial x}(x) \right]$$

Nazadnje delimo enačbo z maso  $dm = \rho S dx$  in upoštevajmo, da pomeni deljenje razlike prvih odvodov v bližnjih točkah z razliko njunih koordinat  $dx$  na desni strani enačbe definicijo drugega odvoda po koordinati  $x$ :

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \frac{F}{\rho S} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$$

Res smo dobili valovno enačbo s hitrostjo valovanja:

$$c = \sqrt{\frac{F}{\rho S}}$$



**Slika R6:** Sile na košček strune pri izpeljavi valovne enačbe za njeno nihanje; zaradi nazornosti so prikazani odmiki strune in ustrezni koti pretirano veliki. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.15

Jeklena struna dolžine 80 cm ima premer 0,2 mm. Gostota jekla je  $7,8 \text{ kg/dm}^3$ . S koliko silo moramo napeti struno, da bo njena osnovna frekvenca 400 Hz?

Podatki:

$$l = 80 \text{ cm}$$

$$r = 0,1 \text{ mm}$$

$$\rho = 7,8 \text{ kg/dm}^3$$

$$\nu_1 = 400 \text{ Hz}$$

-----

$$F = ?$$

Hitrost valovanja po struni izrazimo na dva načina:

$$c = \lambda_1 \nu_1 = 2l \nu_1$$

$$c = \sqrt{\frac{F}{\rho\pi r^2}}$$

Iz obeh enačb izrazimo silo:

$$F = 4\pi\rho \cdot l^2 r^2 v_1^2 = 100,4 \text{ N} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.16

Kolikšna je mehanska energija nihanja na obeh koncih vpete strune v  $n$ -tem nihajnem načinu? Enačba za odklik je:  $\psi_n = A_n \sin(k_n x) \sin(\omega_n t)$ , koordinata  $x$  pa leži v intervalu  $0 \leq x \leq L$ . Za časovni faktor je vseeno, ali vzamemo sinusno ali kosinusno funkcijo. Energijo izrazite s podatki za amplitudo  $A_n$ , silo  $F$ , s katero je napeta, dolžino  $L$ , gostoto  $\rho$  in debelino  $D$ .

Mehanska energija nihanja (stojnega valovanja) je v poljubnem trenutku vsota prožnostne in kinetične energije. Praktično pa jo izračunamo kot maksimalno prožnostno energijo (v skrajni legi) ali pa kot maksimalno kinetično energijo (v ravnovesni legi). Najbolj neposreden je račun maksimalne kinetične energije strune, še prej pa moramo zapisati hitrost (v prečni smeri) vsakega koščka strune:  $v = \partial\psi/\partial t = \omega_n A_n \sin(k_n x) \cos(\omega_n t)$ . V trenutku  $t = 0$  je hitrost vsakega delčka strune maksimalna:  $v_0 = \omega_n A_n \sin(k_n x)$ , še vedno pa je odvisna od koordinate  $x$ , kjer se delček nahaja. Celotno kinetično energijo izračunamo z integralom:

$$E_n = \frac{1}{2} \int_m dm v_0^2 = \frac{1}{2} \int_0^L (\rho S dx) [\omega_n A_n \sin(k_n x)]^2$$

$$E_n = \frac{\rho S \omega_n^2 A_n^2}{2} \int_0^L \sin^2(k_n x) dx$$

Z integralom se nam ni treba ukvarjati, saj je znano, da še integriramo kvadrat sinusne ali kosinusne funkcije po območju  $L$ , ki je večkratnik polovične periode (kar za na obeh koncih vpeto strune velja), je rezultat integriranja kar  $L/2$ . Krožna frekvenca pa je:  $\omega_n = 2\pi\nu_n = 2\pi c/\lambda_n = 2\pi c/(2L/n) = n\pi c/L$ . Zato je energija:

$$E_n = \frac{\rho S A_n^2}{2} \cdot \left(\frac{n\pi c}{L}\right)^2 \cdot \frac{L}{2} = \frac{\rho S A_n^2 n^2 \pi^2}{4L} \cdot \frac{F}{\rho S} = \frac{n^2 \pi^2 F}{4L} \cdot A_n^2$$

Za osnovni nihajni način ( $n = 1$ ) torej:  $E_1 = (\pi^2/4)FA_1^2/L \approx 2,47 FA_1^2/L$ . Čeprav struna zaniha hkrati v mnogo nihajnih načinih, odvisno od začetnih pogojev, pa energija osnovnega načina prevladuje, ker je amplituda  $A_1$  navadno neprimerno večja od drugih amplitud. Morda je videti nekoliko presenetljivo, da mehanska energija nihanja ni direktno odvisna niti od gostote niti od debeline strune. Če pogledamo na dogajanje natančneje, ugotovimo, da ima struna

prožnostno energijo tudi v »ničelni legi«  $\psi = 0$ , saj je napeta s silo  $F$  (pri čemer se je tudi nekoliko podaljšala), vendar lahko prožnostno energijo »resetiramo«, tako da je enaka nič pri  $\psi = 0$ .

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.17

Ta zgled naj nam bo v potrditev računa maksimalne kinetične energije in s tem celotne mehanske energije strune v prejšnjem zgledu. Izračunajmo resnično prožnostno energijo strune v »ničelni legi« in v poenostavljeni skrajni legi za  $n = 1$ , ki ni sinusne, temveč trikotne oblike (slika R7). Razlika teh dveh energij nam je lahko merilo za maksimalno kinetično energijo.

Pomagamo si lahko kar s prožnostno energijo vijačne vzmeti:  $E_{\text{pr}} = Kx^2/2 = F^2/(2K)$ , če je vzmet napeta s silo  $F$  in je njen razteg enak  $x$ . Koeficient vzmeti smo označili s  $K$  in ne s  $k$ , da ga ne zamenjujemo z valovnim vektorjem. Ravna žica z Youngovim modulom  $E$  sicer ni vzmet, lahko pa uporabimo analogijo med njima za zvezo med natezno silo in raztezek:  $F = Kx$  za vzmet in  $F = ESx/L_0$  za žico. Po tej analogiji lahko vpeljemo koeficient žice:  $K = ES/L_0$ , kjer je  $L_0$  dolžine žice pred raztegom. Torej je prožnostna energija napete žice enaka:  $E_{\text{pr}} = Kx^2/2 = ESx^2/(2L_0)$  ali  $E_{\text{pr}} = F^2/(2K) = F^2L_0/(2ES)$ . Ne pozabimo, da ko je struna vpeta pod natezno silo, velja:  $L > L_0$ . Zapišimo torej:  $L = L_0 + x_0$ , kjer je  $x_0$  raztezek strune v ničelni legi, »ničelna« prožnostna energija pa je  $E_{\text{pr}0} = ESx_0^2/(2L_0)$ . Odmaknimo zdaj struno na sredini v prečni smeri za odmik  $A$ . Iz enakokrakega trikotnika izračunamo novo dolžino strune:  $L' = (L^2 + 4A^2)^{1/2}$ . Nov raztezek je tedaj  $x = L' - L_0$  in nova prožnostna energija  $E_{\text{pr}} = ESx^2/(2L_0)$ . Razlika prožnostnih energij je:

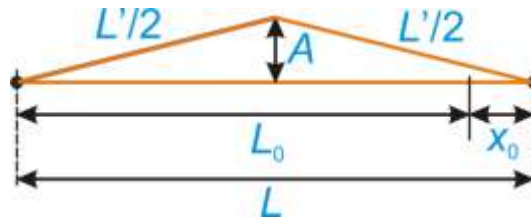
$$\Delta E_{\text{pr}} = \frac{ES}{2L_0}(x^2 - x_0^2) = \frac{ES}{2L_0}[(L' - L_0)^2 - (L - L_0)^2] = \frac{ES}{2L_0}[L'^2 - L^2 - 2L_0(L' - L)]$$

$$\Delta E_{\text{pr}} = \frac{ES}{2L_0} \left[ 4A^2 - 2L_0(\sqrt{L^2 + 4A^2} - L) \right]$$

Upoštevajmo  $A \ll L$  in približek  $(1 + \varepsilon)^{1/2} \approx 1 + \varepsilon/2$  za  $\varepsilon \ll 1$ , pa dobimo:

$$\Delta E_{\text{pr}} \approx \frac{2ES}{L_0} \left(1 - \frac{L_0}{L}\right) A^2 = \frac{2ESx_0}{L_0L} A^2 = \frac{2ES}{L_0L} \cdot \frac{FL_0}{ES} \cdot A^2 = \frac{2F}{L} \cdot A^2$$

Rezultat je podoben tistemu iz prejšnjega zgleda za  $n = 1$ , le da imamo sedaj faktor 2 namesto 2,47, ker je oblika strune v skrajni legi drugačna. Tudi v računu prožnostne energije nimamo več materialnih parametrov, kot sta gostota in elastični modul, temveč razen kvadrata odmika le natezno silo in dolžino strune.



**Slika R7:** Podaljšanje strune pri računu njene prožnostne energije ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.18

Izpeljite valovno enačbo in ustrezno hitrost za zvok kot vzdolžno valovanje snovi. Snov ima modul stisljivosti  $K$  in gostoto  $\rho$ . Modul stisljivosti je fizikalno najbolj nazorno definiran takole: če majhen košček snovi s prostornino  $V$  dodatno stisnemo z zunanjimi okoliškimi silami (negativna sprememba prostornine  $\Delta V$ ), potem se v njem pojavi dodaten tlak, sorazmeren z relativno spremembo prostornine koščka:  $\Delta p = -K\Delta V/V$ . Modul  $K$  je torej sorazmernostni koeficient med povečanjem tlaka in relativnim zmanjšanjem prostornine snovi.

Bistvo izpeljave je bilo pravzaprav že nakazano s sistemom kroglic in vmesnih vzmeti, kjer smo z limitnim preходом  $a \rightarrow 0$  ( $a$  je razdalja med kroglicami) prešli iz diskretne slike v zvezno (kontinuumsko). Tu pa že v izhodišču začnimo s snovjo kot kontinuumom. Izpeljava spominja na tisto pri prečnem valovanju napete strune, le da gre zdaj za longitudinalno valovanje: tako motnja kot odmiki potekajo vzdolž osi  $x$  (slika).

Spet pogledjmo sile, ki delujejo na kratek košček snovi z dolžino  $dx$  in maso  $dm = \rho S dx$ . Pri tem je  $S$  poljubni prečni presek snovi. Tokrat odmik snovi od ravnovesne lege  $x$  v vsaki točki označimo s funkcijo  $\psi$ . Tudi tu poudarimo, da je bolj kot povprečni premik koščka snovi pomembna to, kako se premik spreminja vzdolž koščka. Kako je z (ne)ravnovesjem sil na takšen košček snovi? Pomembna je razlika tlakov na levem in desnem koncu koščka! Ta razlika je namreč sorazmerna z rezultanto zunanjih sil (z leve in desne strani) na košček. Naj bo v našem primeru sila z leve strani  $F_L = S\Delta p(x)$  večja kot sila z desne strani  $F_D = S\Delta p(x + dx)$ , ki kaže v nasprotno smer. To hkrati pomeni, da je dodaten tlak v levem koncu koščka večji kot v desnem koncu, torej je snov na levi strani koščka snovi bolj stisnjena (v danem trenutku). Po Newtonovem zakonu  $dm \cdot a = F_L - F_D$  sledi:

$$dm \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = S \cdot [\Delta p(x) - \Delta p(x + dx)]$$

Uporabimo definicijo modula stisljivosti:

$$\rho S dx \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = SK \cdot \left[ -\frac{\Delta V}{V}(x) + \frac{\Delta V}{V}(x+dx) \right]$$

Pozor, tu moramo biti pri interpretaciji relativnih prostornin na desni strani enačbe zelo previdni. Na primer, simbol  $V$  zdaj ne označuje celotne prostornine obravnavanega koščka snovi, kot je prikazan na sliki, temveč samo njegov majhen del, na levi ali na desni strani koščka. Enako velja za  $\Delta V$ : to ni sprememba prostornine celotnega koščka na sliki, ampak to spet velja samo za del koščka na njegovem levem in desnem koncu. Predpostavimo, da se snov v prečnih smereh glede na smer valovanja nič ne premika (pozor, tudi to je le približek in ne nekaj samo po sebi razumljivega!). Zato se pojavijo razlike v prostornini samo zaradi premikov v smeri  $x$ :  $\Delta V/V = \Delta b/b \equiv \partial \psi / \partial x$ . Pri tem je  $b$  še precej manjši košček intervala  $dx$ . Opomba: tu je težko nazorno in na dolgovezno razlagati natančen pomen zadnje enačbe, zato bomo to skicirali na vajah. Torej:

$$\rho S dx \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = SK \cdot \left[ \frac{\partial \psi}{\partial x}(x+dx) - \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) \right]$$

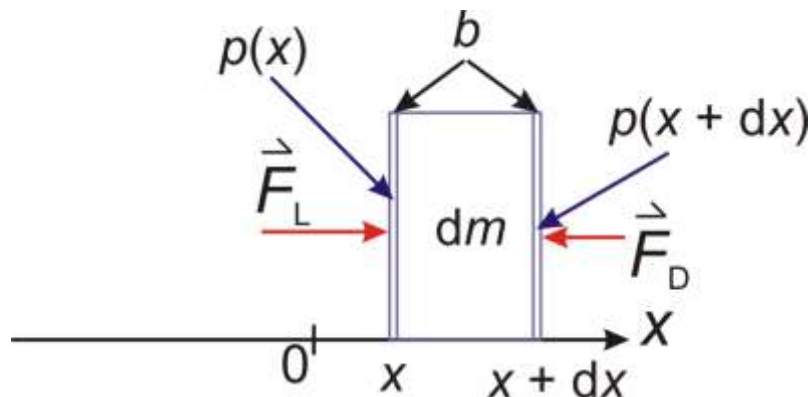
Nazadnje delimo enačbo z maso  $dm = \rho S dx$  in upoštevajmo, da pomeni deljenje razlike prvih odvodov v bližnjih točkah z razliko njunih koordinat  $dx$  na desni strani enačbe definicijo drugega odvoda po koordinati  $x$ :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{K}{\rho} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

Res smo dobili valovno enačbo s hitrostjo valovanja:

$$c = \sqrt{\frac{K}{\rho}}$$

Nazadnje omenimo, da pri kapljevinah in plinih za modul  $K$  res lahko uporabimo modul adiabatne stisljivosti, za elastično trdno snov pa moramo  $K$  nadomestiti z Youngovim modulom  $E$ .



**Slika R8:** Sile na košček snovi pri izpeljavi valovne enačbe za zvok ♠



♥ RAČUNSKI ZGLED 1.19

Podrobneje obravnavajte zvok v idealnim plinu. Za izračun modula adiabatne stisljivosti  $K_{\text{ad}}$  in potem hitrosti zvoka si pomagajte z enačbo za adiabatno spremembo:  $pV^\kappa = C$ , kjer je  $p$  tlak,  $V$  prostornina,  $C$  konstanta (podana z maso in vrsto plina) in  $\kappa = c_p/c_V$  razmerje specifičnih toplot pri konstantnem tlaku in prostornini. Izračunajte hitrost zvoka v dušiku pri temperaturi 273 K. Napišite enačbe za odmike lege, tlaka in gostote delov plina, skozi katere gre zvočni val.

Enačbo za stiskanje tekočine,  $\Delta p = -K_{\text{ad}}\Delta V/V$ , zapišimo v diferencialni obliki:  $dp = -K_{\text{ad}}dV/V$ . Tako lahko izračunamo  $K$  iz odvoda tlaka po prostornini pri adiabatni spremembi:

$$K_{\text{ad}} = -V \cdot \frac{dp}{dV} = -V \cdot \frac{d(CV^{-\kappa})}{dV} = -V \cdot (-\kappa CV^{-\kappa-1}) = \kappa CV^{-\kappa} = \kappa p$$

Modul stisljivosti je pri idealnem plinu sorazmeren tlaku. Upoštevajmo še plinsko enačbo  $pV = (m/M)RT$ , kjer je  $m$  masa plina,  $M$  kilomolska masa,  $T$  absolutna temperatura in  $R = 8314 \text{ J/(kmol K)}$  splošna plinska konstanta. Iz plinske enačbe izrazimo gostoto plina:  $\rho = m/V = Mp/(RT)$ . Zvočna hitrost v plinu je torej:

$$c = \sqrt{\frac{K_{\text{ad}}}{\rho}} = \sqrt{\frac{\kappa RT}{M}}$$

Dušikova molekula  $\text{N}_2$  je sestavljena iz dveh atomov z atomsko maso po 14, zato je kilomolska masa  $M = 28 \text{ kg/kmol}$ . Razmerje specifičnih toplot pri dvoatomnih plinih je  $\kappa = 1,4$ . Hitrost zvoka v dušiku pri 273 K je potem 337 m/s. Kot zanimivost naj omenimo še, da iz kinetične teorije plinov izhaja naslednja ocena za povprečno hitrost posameznih molekul plina:

$$v_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$$

Pri dušiku pri 273 K je to 493 m/s. Termična hitrost molekul in zvočna hitrost sta torej pri plinih istega velikostnega reda. Če smo natančnejši: povprečna hitrost, ki smo jo izračunali, je pravzaprav koren iz povprečja kvadrata hitrosti; od tod oznaka RMS (root mean square).

Obravnavajmo zvok v plinu kot harmonični val in zapišimo enačbo za odmik delov zraka iz mirovne lege v obliki sinusne funkcije:

$$\psi = \psi_0 \sin(\omega t - kx)$$

Če se delu plina z določeno maso  $m$  poveča prostornina za majhen delež, se za enak delež zmanjša gostota plina; v diferencialni obliki:  $d\rho/\rho = -dV/V$ . To lahko dokaže bralec sam z

zvezo  $\rho = m/V$  in uporabo diferenciala. Pri prejšnjem računskem zgledu (izpeljava zvočne hitrosti skozi snov) smo pri stiskanju ali razširjanju snovi uporabili naslednjo zvezo med premiki in relativnimi spremembami prostornine delov snovi:  $\Delta V/V = \partial\psi/\partial x$ . Uporabimo to za gostoto:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = -\frac{\partial\psi}{\partial x} = -k\psi_0 \cos(\omega t - kx)$$

Pri tem lahko na količino  $\Delta\rho$  gledamo kot na odmik gostote plina od ravnovesne (povprečne) gostote  $\rho_0$ , to je gostote plina brez zvočnega vala. Gostota se torej spreminja takole:

$$\rho = \rho_0 + \Delta\rho = \rho_0 - k\psi_0\rho_0 \cos(\omega t - kx) = \rho_0 + k\psi_0\rho_0 \sin(\omega t - kx - \pi/2)$$

Amplituda nihanja gostote je sorazmerna z amplitudo odmika lege,  $(\Delta\rho)_0 = k\rho_0\psi_0$ , fazni premik med nihanjem lege in gostote pa je  $\pi/2$ , to je četrt nihaja. Tlak niha z enako fazo kot gostota plina:

$$\Delta p = K_{\text{ad}} \frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \kappa p_0 k \psi_0 \sin(\omega t - kx - \pi/2)$$

Pri tem je  $\Delta p$  odmik tlaka od normalnega zračnega tlaka  $p_0$  brez zvočne motnje. Zato nihanje tlaka zapišemo tudi takole:

$$p = p_0 + \Delta p = p_0 + \kappa p_0 k \psi_0 \sin(\omega t - kx - \pi/2)$$

Tako kot pri nihanju gostote je tudi amplituda nihanja tlaka sorazmerna z amplitudo nihanja lege:  $(\Delta p)_0 = \kappa k p_0 \psi_0$ .

Nazadnje še nekaj o zvočni energiji. Gostota energijskega toka ravnega potujočega mehanskega vala je  $j = P/S = (1/2)\rho\omega^2\psi_0^2c$ . Pri potovanju zvoka skozi plin je  $\rho$  gostota plina,  $\omega = 2\pi\nu$ ,  $c$  zvočna hitrost,  $\psi_0$  pa amplituda nihanja lege delcev zraka zaradi zvoka; gostoto energijskega toka  $j$  imenujemo tudi jakost zvoka. Vzemimo spet dušik,  $p = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$ ,  $T = 273 \text{ K}$ . Frekvenca zvoka naj bo  $\nu = 1 \text{ kHz}$ , jakost pa  $j = 10^{-12} \text{ W/m}^2$ , na meji slišnosti za povprečen sluh človeka. S temi podatki izračunamo vse tri omenjene amplitude:  $\psi_0 \approx 10^{-11} \text{ m}$ ,  $(\Delta\rho)_0 \approx 2 \cdot 10^{-10} \text{ kg/m}^3$ ,  $(\Delta p)_0 \approx 3 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} = 3 \cdot 10^{-10} \text{ bar}$ . To so fantastično majhne vrednosti, ki dokazujejo občutljivost človeškega ušesa. Mimogrede: pri izračunu amplitud nihanja gostote in tlaka smo uporabili  $k = 2\pi/\lambda = 2\pi\nu/c$ . ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 1.20

Odmik pri harmoničnem potujočem valu je:  $\psi(x, t) = A \cos[2\pi(x/\lambda - t/T)]$ , kjer je  $\lambda$  valovna dolžina in  $T = 5$  ms nihajni čas. Poiščite vse pozitivne rešitve za čas  $t$ , tako da je pri  $x = \lambda/4$  odmik  $\psi = A/2$ .

Nalogo lahko rešimo na pamet, a najprej preuredimo izraz za  $\psi$  pri  $x = \lambda/4$ :  $\psi = A \cos(\pi/2 - 2\pi t/T) = A \sin(2\pi t/T)$ . Dve rešitvi dobimo takole:

$$\frac{2\pi t}{T} = \arcsin \frac{\psi}{A} = \arcsin \frac{1}{2}$$

Ena rešitev je:  $2\pi t_1/T = \pi/6 \rightarrow t_1 = T/12$ , druga pa  $2\pi t_2/T = 5\pi/6 \rightarrow t_2 = 5T/12$ . Vse druge rešitve, tudi za negativne čas, dobimo s prištevanjem celega mnogokratnika nihajnega časa tema rešitvama. Vendar nas tu zanimajo samo pozitivni časi; rešitve so po velikosti:  $T/12, 5T/12, 13T/12, 17T/12 \dots$  ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 1.21

Sinhronizirana zvočnika oddajata zvok s frekvenco 100 Hz. Hitrost zvoka je 340 m/s. Na kolikšni razdalji morata biti zvočnika, da je ojačitev zvoka prvega reda pri kotu  $40^\circ$  glede na simetralo? Kolikšni so drugi koti ojačitev?

Podatki:

$$\nu = 100 \text{ Hz}$$

$$c = 340 \text{ m/s}$$

$$\beta_1 = 40^\circ$$

-----

$$a = ?$$

$$\beta_2, \dots = ?$$

Naloga je preprosta:

$$a \sin \beta_1 = \lambda = \frac{c}{\nu} \rightarrow a = \frac{c}{\nu \sin \beta_1} = 5,29 \text{ m}$$

Druge kote lahko izračunamo direktno iz prvega:

$$\sin \beta_N = N \sin \beta_1$$

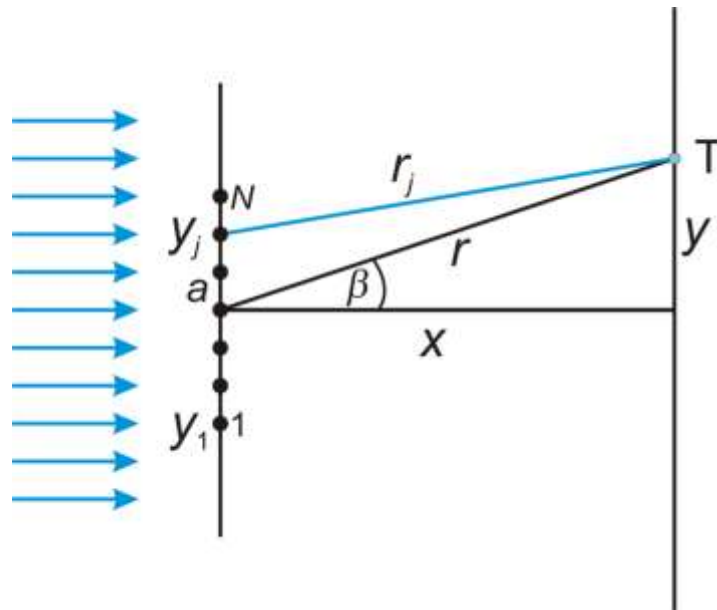
Vendar pa drugih rešitev ni. To vidimo tudi iz enačbe (1.26):

$$N_{\max} = \frac{a}{\lambda} = \frac{1}{\sin \beta_1} = 1,56 \rightarrow 1$$

Če bi hoteli dobiti vsaj še drugi kot ojačitve, bi moralo veljati  $\beta_1 < 30^\circ$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 1.22

Izpeljite odvisnost intenzitete svetlobe (v splošnem valovanja) v odvisnosti od kota  $\beta$  glede na simetralo pri Youngovem poskusu z  $N$  podolgovatimi ozkimi režami v enakih razmikih  $a$ . Uporabite enačbo za krožni delni val iz vsake reže:  $\psi_j = \exp(ikr_j)$ ,  $j = 1 - N$ , kjer je  $k = 2\pi/\lambda$  valovno število,  $r_j$  pa razdalja med posamezno režo in zaslonom (slika R9).



**Slika R9:** Geometrija interferenčnega poskusa z  $N$  režami v enakih razmikih; zaradi nazornosti so reže prikazane kot točkasti izviri valovanja (črni krožci), v resnici pa so podolgovate in potekajo pravokotno na ravnino risbe.

Časovnega dela valovne funkcije nismo zapisali, ker vpade na uklonsko mrežico koherenten val z valovnimi frontami vzporednimi z mrežico, zato je časovni faktor pri vseh delnih valih enak in se nazadnje krajša v izrazu za intenziteto. Skupna valovna funkcija v izbrani točki na zaslonu je vsota delnih funkcij:

$$\psi = \sum_{j=1}^N \exp(ikr_j)$$

Da bi poenostavili račun, moramo ob določenem privzetku zapisati razdalje  $r_j$  na čim enostavnejši način. Naj bo velikost uklonske mrežice (tudi pri večjem številu rež  $N$ ) majhna v primerjavi s koordinatama  $x$  in  $y$ , ki določata lego obravnavane točke T na zaslonu. Označimo tudi razdaljo med T in sredino mrežice:  $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$ . Koordinato vsake reže glede na sredino mrežico za zdaj označimo z  $y_j$ . Zapišimo in poenostavimo izraz za razdaljo  $r_j$ :

$$r_j = \sqrt{x^2 + (y - y_j)^2} \approx \sqrt{x^2 + y^2 - 2yy_j} = \sqrt{r^2 - 2yy_j} = r\sqrt{1 - 2yy_j/r^2}$$

Zanemarili smo najmanjši člen  $y_j^2$ . Spet upoštevajmo stari trik  $(1 \pm \epsilon)^{1/2} \approx 1 \pm \epsilon/2$ :

$$r_j \approx r(1 - yy_j/r^2) = r - y_j \cdot y/r = r - y_j \cdot \sin \beta$$

Valovna funkcija je:

$$\psi = \sum_{j=1}^N \exp[ik(r - y_j \sin \beta)]$$

Seštevanje po indeksu  $j$  poenostavimo, da vse  $y$ -koordinate rež zapišemo glede na koordinato »spodnje« reže na sliki:  $y_j = y_1 + (j - 1)a$ . Nadaljujmo:

$$\psi = \sum_{j=1}^N \exp[ik(r - (y_1 + (j - 1)a) \sin \beta)] = \exp[ik(r - y_1 \sin \beta)] \cdot \sum_{j=1}^N \exp[-ika(j - 1) \sin \beta]$$

Faktor, ki smo ga izpostavili, ima absolutno vrednost 1 in ne vpliva na končni izračun intenzitete, zato ga izpustimo:

$$\psi = \sum_{j=1}^N \exp[-ika(j - 1) \sin \beta]$$

To pa je vsota členov geometrijskega zaporedja:  $1 + q + q^2 + \dots + q^{N-1}$ , kjer je faktor  $q = \exp(-ika \sin \beta)$ . Ta vsota je enaka  $(q^N - 1)/(q - 1)$ , v našem primeru je to:

$$\psi = \frac{\exp(-Nikas \sin \beta) - 1}{\exp(-ikas \sin \beta) - 1}$$

Intenziteta svetlobe na določenem mestu je sorazmerna kvadratu absolutne vrednosti valovne funkcije. S sorazmernostnim faktorjem se ne bomo ukvarjali, saj tudi valovna funkcija sama ni normalizirana na ustrezen način. Zato ima tudi sorazmernostni faktor kar enoto intenzitete in ga označimo z  $I_0$ , torej:

$$I = I_0 \psi \psi^* = I_0 \cdot \frac{\exp(-Nikas \sin \beta) - 1}{\exp(-ikas \sin \beta) - 1} \cdot \frac{\exp(+Nikas \sin \beta) - 1}{\exp(+ikas \sin \beta) - 1}$$

Z množenjem in upoštevanjem Eulerja ( $\exp(iz) = \cos z + i \sin z$ ) dobimo:

$$I = I_0 \cdot \frac{2 - 2\cos(Nk\sin\beta)}{2 - 2\cos(k\sin\beta)}$$

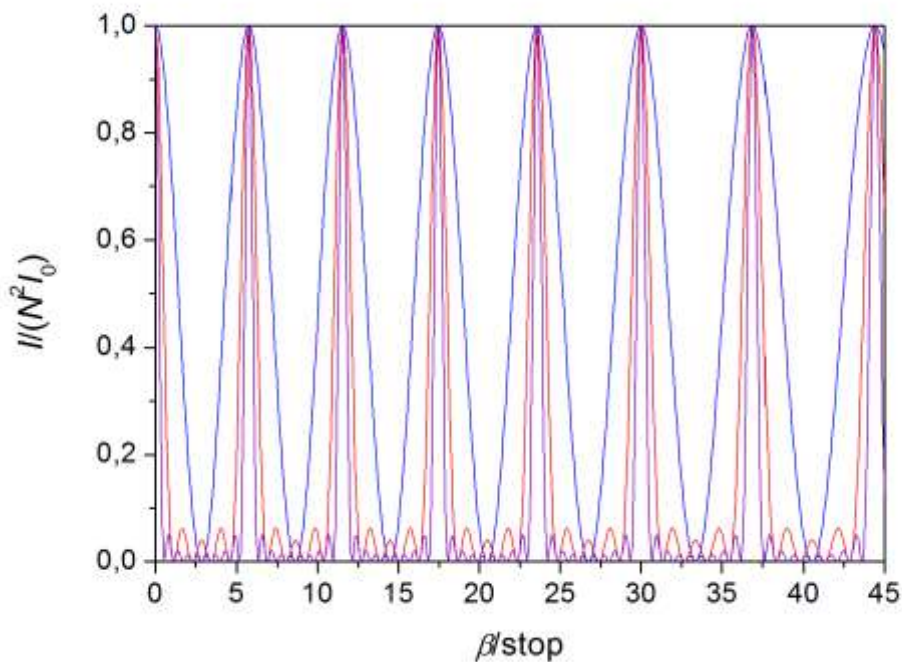
Krajšamo 2 in upoštevajmo še  $\sin^2\alpha = (1 - \cos(2\alpha))/2$ , pa še  $k = 2\pi/\lambda$  in smo končali:

$$I = I_0 \cdot \left[ \frac{\sin\left(\frac{1}{2}Nk\sin\beta\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}k\sin\beta\right)} \right]^2 = I_0 \cdot \left[ \frac{\sin\left(N\pi\frac{a}{\lambda}\sin\beta\right)}{\sin\left(\pi\frac{a}{\lambda}\sin\beta\right)} \right]^2$$

Grafi  $I(\beta)$  v primeru  $a = 10\lambda$  in za različno število rež  $N$  so prikazani na sliki spodaj. V primeru pogoja  $a \sin\beta = M\lambda$  ( $M$  je celo število) je imenovalc v izrazu za  $I$  enak nič. To je znani pogoj za ojačitve valovanja, le da smo tu za red ojačitve uporabili oznako  $M$ , ker  $N$  označuje število rež. Ocenimo intenziteto pri ojačitvah! Naletimo na problem deljenja  $0/0$  v oglatemu oklepaju. Zato si pomagamo z limitnim postopkom in L'Hospitalovim pravilom: pri deljenju  $0/0$  lahko posebej odvajamo števec in imenovalc po limitni spremenljivki in dobimo pravo vrednost limite; če je izraz še vedno nedoločen,  $0/0$ , lahko pravilo uporabimo ponovno itd. Pozor: odvajanje števca in imenovalca posebej po L'Hospitalovem pravilu ni isto kot odvajanje ulomka! Pred zapisom celotne intenzitete limitirajmo samo izraz v oglatem oklepaju in raje uvedimo posredno spremenljivko  $x = a \sin\beta/\lambda$ :

$$\lim_{x \rightarrow M} \left[ \frac{\sin(N\pi x)}{\sin(\pi x)} \right] = \lim_{x \rightarrow M} \left[ \frac{N\pi \cos(N\pi x)}{\pi \cos(\pi x)} \right] = \frac{N \cdot (-1)^{NM}}{(-1)^M}$$

Kosinus večkratnika  $\pi$  je pač  $\pm 1$ , odvisno od tega, ali gre za sodi ali lihi večkratnik; a tu predznak ne igra nobene vloge. Rezultat za intenziteto v maksimumih je preprost:  $I = N^2 I_0$ . Vsi maksimumi so enako močni, v resnici pa nanje vpliva tudi širina vsake reže, ki smo jo tu zanemarili; v splošnem se z redom ojačitve maksimumi nižajo. Na sliki R10 je razvidno, da se z večanjem števila rež maksimumi višajo in ožijo, pojavijo pa se še dodatni, majhni lokalni maksimumi.



**Slika R10:** Grafi normalizirane intenzitete kot funkcije kota za tri različna števila rež:  $N = 2$  (modra krivulja),  $N = 5$  (rdeča krivulja) in  $N = 10$  (vijolična krivulja). Zaradi lažje primerjave so bile vrednosti intenzitet deljene z  $N^2$ . ♠

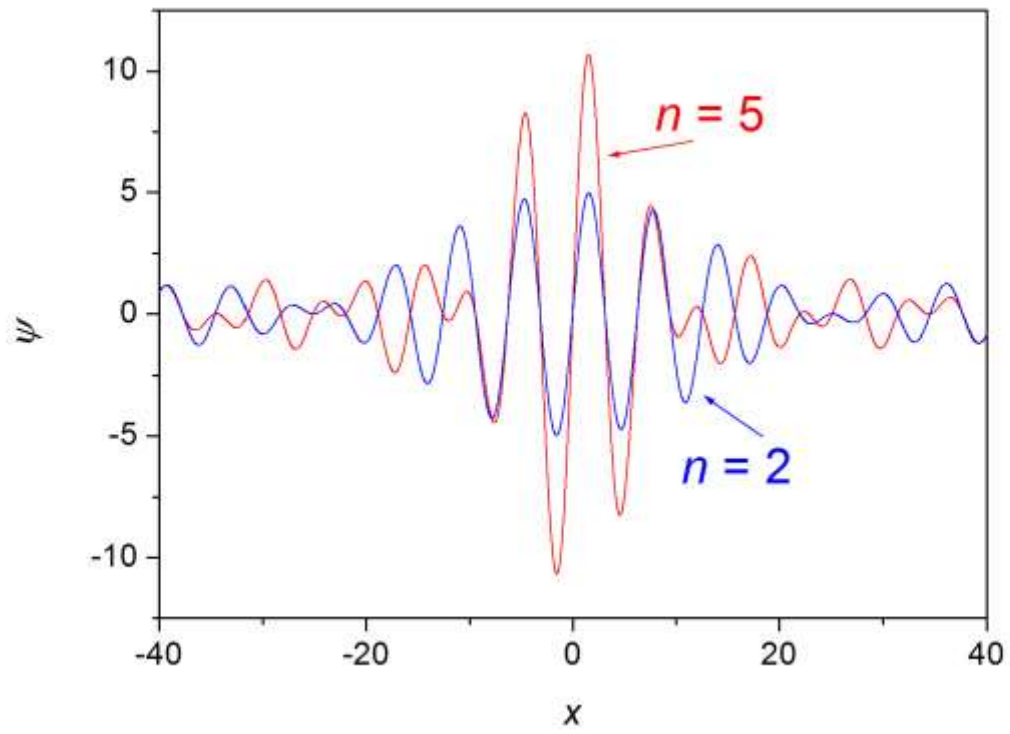
### ♥ RAČUNSKI ZGLED 23

Valovni paket lahko predstavimo kot vsoto mnogih delnih valovanj z nekoliko različnimi valovnimi dolžinami in frekvencami. Vzemimo normalizirane (brezdimenzijske) vrednosti vseh parametrov, tako da valovni paket z  $2n + 1$  delnimi valovi zapišemo kot:

$$\psi = \sum_{i=-n}^n \sin[k_i(x - ct)]$$

Pri tem naj bodo valovni vektorji »centrirani« okrog vrednosti 1:  $k_i = 1 + i\Delta k$ ,  $\Delta k \ll 1$ . Predpostavite, da ni disperzije,  $c = 1$  (hitrost je neodvisna od valovnega števila  $k$ ).

Grafe narišemo numerično, npr. z uporabo Mathematice ali kakega drugega programa. Na sliki sta prikazana primera za  $n = 2$  (5 delnih valov) in  $n = 5$  (11 delnih valov) ter  $\Delta k = 0,05$ . V primeru brez disperzije valovni paket s časom ohranja obliko, samo v celoti se giblje v desno, zato je dovolj prikazati trenutno sliko paketa v času  $t = 0$ .



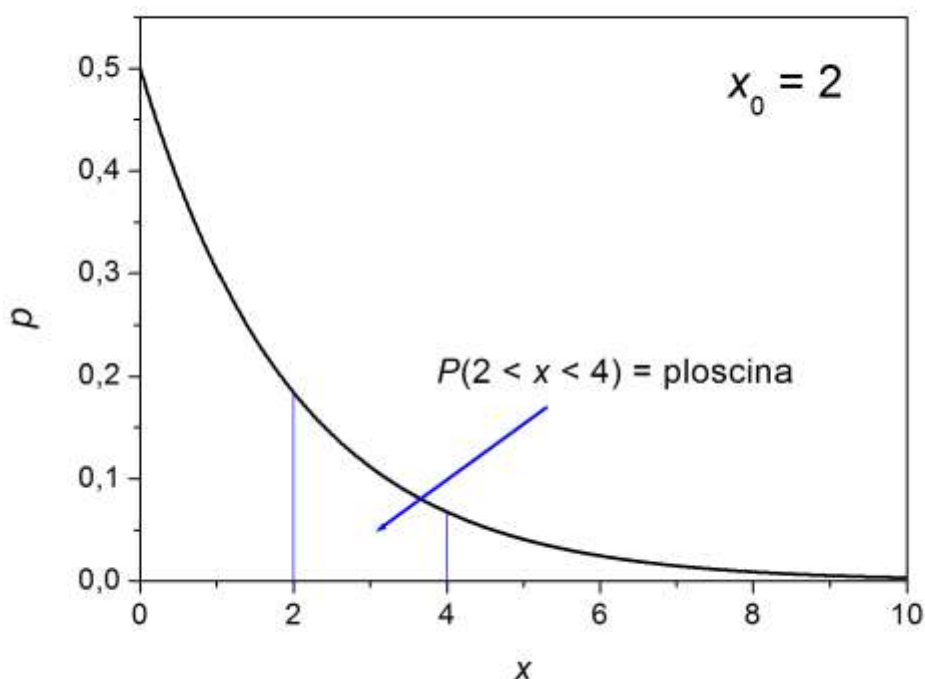
**Slika R11:** Dva valovna paketa brez disperzije v trenutku  $t = 0$  ♠



## 2 DELCI, SVETLOBA, SEVANJE IN INTERAKCIJE

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 2.1

Porazdelitev neke naključne fizikalne spremenljivke  $x$  opisuje eksponentna verjetnostna gostota (slika R12):  $p(x) = C \exp(-x/x_0)$ . Pri tem je  $x_0$  značilni (skalni) parameter (z enako fizikalno enoto kot  $x$ ),  $C$  ustrežna normalizacijska konstanta, dovoljene vrednosti  $x$  pa ležijo v območju  $0 \leq x < \infty$ . Pomen funkcije  $p(x)$  je naslednji:  $p(x)dx$  je (majhna) verjetnost, da bo naključno izbrana vrednost spremenljivke  $x$  ležala v intervalu  $(x, x + dx)$ , če je  $dx$  zelo majhna širina intervala. Normalizirajte funkcijo  $p(x)$  s pravo vrednostjo konstante  $C$ . Kolikšna je verjetnost, da se  $x$  nahaja v območju  $0 \leq x \leq x_0$ ? Kaj pa v območju  $x_0 \leq x \leq 2x_0$ ? Kolikšna je povprečna vrednost  $x$ ? Kolikšna je povprečna vrednost  $x^2$ ? Kolikšna je standardna deviacija  $x$ ?



**Slika R12:** Eksponentna porazdelitvena funkcija z brezdimenzijsko spremenljivko  $x$ ;  $x_0 = 2$ . Nakazan je račun verjetnosti za  $x_0 \leq x \leq 2x_0$ .

Geometrijski pomen dane porazdelitvene funkcije je prikazan na sliki. Če pomeni  $p(x)dx$  verjetnost za nahajanje spremenljivke  $x$  v ozkem intervalu, izračunamo verjetnost za širši interval z integralom. Na primer, verjetnost za  $a \leq x \leq b$  je enaka:

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b p(x) dx$$

Verjetnost, da bomo našli  $x$  kjerkoli na dovoljenem območju vrednosti, je enaka 1, zato v skladu s tem normaliziramo integral po celotnem območju spremenljivke. V našem primeru:

$$\int_0^{\infty} C \exp(-x/x_0) dx = 1$$

$$-Cx_0 \exp(-x/x_0) \Big|_0^{\infty} = 1$$

$$Cx_0 = 1 \rightarrow C = \frac{1}{x_0}$$

Glede na definicijo lahko zapišemo tudi  $p(x) = dP/dx$ . Izračunajmo verjetnost za podani območji:

$$P(0 \leq x \leq x_0) = \frac{1}{x_0} \int_0^{x_0} \exp(-x/x_0) dx = -\exp(-x/x_0) \Big|_0^{x_0} = 1 - \frac{1}{e}$$

$$P(x_0 \leq x \leq 2x_0) = \frac{1}{x_0} \int_{x_0}^{2x_0} \exp(-x/x_0) dx = -\exp(-x/x_0) \Big|_{x_0}^{2x_0} = \frac{1}{e} - \frac{1}{e^2}$$

$$P(x_0 \leq x \leq 2x_0) = \frac{1}{e} \cdot P(0 \leq x \leq x_0)$$

Podobno bi ugotovili za naslednje intervale širine  $x_0$ . Povprečno (pričakovano) vrednost katerekoli funkcije  $f(x)$  lahko s podano verjetnostno gostoto  $p(x)$  izračunamo z naslednjim integralom:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x) p(x) dx$$

kjer sta  $x_{\min}$  in  $x_{\max}$  najmanjša in največja dovoljena vrednost spremenljivke  $x$ . V našem primeru bomo skušali izraziti povprečje  $\langle x^n \rangle$  za poljubni naravni eksponent  $n$ , da ne ponavljamo računa.

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{x_0} \int_0^{\infty} x^n \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right) dx$$

Pomagamo si z integriranjem per partes, zato da znižamo potenco faktorja  $x^n$  za 1:  $u = x^n$ ,  $dv = \exp(-x/x_0) \rightarrow du = nx^{n-1}$ ,  $v = -x_0 \exp(-x/x_0)$ . Tako izračunamo:

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{x_0} \left[ -x_0 x^n \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right) \Big|_0^\infty + n x_0 \int_0^\infty x^{n-1} \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right) dx \right]$$

Prvi, integrirani del, je enak nič pri obeh mejah, zato velja:

$$\langle x^n \rangle = n x_0 \langle x^{n-1} \rangle$$

Prišli smo do koristne rekurzivne relacije, zato lahko računamo po vrsti:  $\langle x^0 \rangle = 1$ ;  $\langle x \rangle = x_0 \cdot \langle x^0 \rangle = x_0$ ,  $\langle x^2 \rangle = 2x_0 \cdot \langle x \rangle = 2x_0^2$ ;  $\langle x^3 \rangle = 3x_0 \cdot \langle x^2 \rangle = 6x_0^3$  itd. Standardno deviacijo lahko izračunamo direktno iz povprečij  $\langle x \rangle$  in  $\langle x^2 \rangle$ :

$$\delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{2x_0^2 - x_0^2} = x_0$$

Torej je pri eksponentni porazdelitvi standardna deviacija spremenljivke kar enaka njeni povprečni vrednosti. To seveda lahko s primernimi parametri dosežemo tudi pri drugih porazdelitvah z vsaj dvema prostima parametroma, npr. pri Gaussovi. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 2.2

Za spektralno gostoto sevanja črnega telesa s površinsko temperaturo  $T$  velja enačba:

$$\frac{dj}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 \left( \exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right) - 1 \right)}$$

Pomen simbolov:  $j$  je gostota svetlobnega toka  $j = P/S$ ,  $\lambda$  je valovna dolžina,  $h$  Planckova konstanta,  $c$  svetlobna hitrost,  $k$  pa Boltzmannova konstanta. Temperatura površja zvezde je 8000 K. Pri kolikšni valovni dolžini ima spektralna gostota  $dj/d\lambda$  maksimum? Kolikšna je gostota svetlobnega toka samo v intervalu  $\lambda_m \pm 50$  nm okrog maksimuma  $\lambda_m$ ? Kolikšen del celotne gostote svetlobnega toka je to?

Preden rešimo nalogo, še opozorilo. Funkcija  $dj/d\lambda$  ima analogen pomen kot verjetnostna gostota  $p(x)$  v prejšnjem zgledu, a ne povsem enakega. Z integriranjem  $p(x)$  po nekem intervalu smo dobili verjetnost, medtem ko z integriranjem  $dj/d\lambda$  po intervalu valovnih dolžin dobimo fizikalno količino gostoto toka v območju teh valovnih dolžin. Enota za spektralno gostoto je  $W/m^3$ . Vendar pa lahko s ustrezno normalizacijo tudi iz spektralne gostote naredimo neke vrste verjetnostno gostoto, kot bomo pokazali v nadaljevanju.

Maksimum spektralne gostote podaja Wienov zakon:  $\lambda_m = k_W/T = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ m K}/(8000 \text{ K}) = 362 \text{ nm}$ . Označimo  $\Delta\lambda = 50 \text{ nm}$ . Gostoto  $j$  v območju  $\lambda_m \pm 50 \text{ nm}$  formalno izračunamo z integralom:

$$j = \int_{\lambda_m - \Delta\lambda}^{\lambda_m + \Delta\lambda} \left( \frac{dj}{d\lambda} \right) d\lambda$$

Izračunati ga moramo numerično, saj obstaja analitična rešitev samo za celotno integracijsko območje  $(0, \infty)$ , od koder tudi izhaja Stefanov zakon. Vendar če je integracijski interval dovolj ozek, lahko integral izračunamo približno:  $j \approx (dj/d\lambda)(\lambda = \lambda_m) \cdot 2\Delta\lambda$ . To je takrat, ko lahko ozko območje lika pod grafom nadomestimo kar s pravokotnikom, torej če se spektralna gostota v danem intervalu valovnih dolžin le malo spreminja. Primerjajmo torej najprej  $dj/d\lambda$  pri vseh treh ključnih valovnih dolžinah: 312 nm, 362 nm in 412 nm. Spektralno gostoto je bolj praktično napisati v obliki:

$$\frac{dj}{d\lambda} = \frac{2\pi(kT)^5}{h^4 c^3} \cdot \frac{x^5}{e^x - 1} \equiv A \cdot \frac{x^5}{e^x - 1}$$

kjer je  $x = hc/(kT\lambda)$ . Dovolj je opazovati le relativne razlike v spektralni gostoti zaradi različnih valovnih dolžin, torej primerjamo samo spreminjanje izraza  $x^5/(e^x - 1)$ . Pri omenjenih valovnih dolžinah je ta faktor enak po vrsti 20,07, 21,20 (maksimum) in 20,37. Vzemimo kar aritmetično sredino vseh treh vrednosti: 20,55. Upravičeno lahko uporabimo približek:  $j = 20,55 \cdot A \cdot 100 \text{ nm} = 4,13 \cdot 10^7 \text{ W/m}^2$ . Celotno gostoto svetlobnega toka za vse valovne dolžine  $j_{\text{tot}}$  izračunamo po Boltzmann-Stefanovem zakonu:  $j_{\text{tot}} = \sigma T^4 = 2,32 \cdot 10^{10} \text{ W/m}^2$ . Razmerje  $j/j_{\text{tot}}$  je enako  $1,78 \cdot 10^{-3}$ . Če spektralno gostoto normaliziramo (delimo s faktorjem  $j_{\text{tot}}$ ), dobimo zares porazdelitveno funkcijo po valovnih dolžinah:

$$p_\lambda(\lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\sigma T^4 \lambda^5 \left( \exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right) - 1 \right)}$$

tako da velja:

$$\int_0^\infty p_\lambda(\lambda) d\lambda = 1$$

Omenimo še, da porazdelitvene funkcije po frekvencah (namesto po valovnih dolžinah) ne dobimo preprosto tako, da v funkciji  $p_\lambda(\lambda)$  nadomestimo  $\lambda = c/\nu$ . Vendar pa vseeno lahko izvedemo pretvorbo  $p_\lambda(\lambda) \rightarrow p_\nu(\nu)$  s preprostim trikom:

$$p_\nu(\nu) = \frac{dP}{d\nu} = \frac{dP}{d\lambda} \cdot \left| \frac{d\lambda}{d\nu} \right| = p_\lambda(\lambda) \cdot \left| \frac{d(c/\nu)}{d\nu} \right| = p_\lambda(\lambda) \cdot \frac{c}{\nu^2} = p_\lambda\left(\frac{c}{\nu}\right) \cdot \frac{c}{\nu^2}$$

Torej ni dovolj le substitucija  $\lambda = c/\nu$ , temveč moramo funkcijo  $p_\lambda$  pomnožiti še s faktorjem  $c/\nu^2$ . Rezultat je:

$$p_\nu(\nu) = \frac{2\pi h \nu^3}{\sigma T^4 c^2 \left( \exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right)}$$

tako da velja:

$$\int_0^\infty p_\nu(\nu) d\nu = 1 \quad \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 2.3

Energija fotona svetlobe z valovno dolžino  $\lambda$  je  $E_f = hc/\lambda$ , gostota svetlobnega toka enobarvne svetlobe z valovno dolžino 500 nm pa je  $500 \text{ W/m}^2$ . Koliko fotonov pade v času 1 min na zaslon s ploščino  $1 \text{ cm}^2$ , ki je postavljen pravokotno na svetlobni curek? Kolikšna amplituda jakosti električnega polja in gostote magnetnega polja ustreza temu svetlobnemu valovanju?

Podatki:

$$\lambda = 500 \text{ nm}$$

$$j = 500 \text{ W/m}^2$$

$$S = 1 \text{ cm}^2$$

$$t = 60 \text{ s}$$

-----

$$N = ?$$

$$E_0 = ?$$

$$B_0 = ?$$

Število fotonov je količnik med celotno vpadno svetlobno energijo na zaslon v času  $t$  in energijo enega samega fotona:

$$N = \frac{E}{E_f} = \frac{jSt}{hc/\lambda} = \frac{jSt\lambda}{hc} = 7,6 \cdot 10^{18}$$

Amplitudo jakosti električnega polja označimo z  $E_0$  in pazimo, da oznake ne zamenjamo z energijo. Gostota svetlobnega toka je takole povezano z amplitudo  $E_0$ :  $j = \epsilon_0 E_0^2 c/2$ , kjer je  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ A s/V m}$ . Amplituda jakosti električnega polja je:

$$E_0 = \sqrt{\frac{2j}{\epsilon_0 c}} = 614 \text{ V/m}$$

Amplituda gostote magnetnega polja je:

$$B_0 = \frac{E_0}{c} = 2,05 \cdot 10^{-6} \text{ Vs/m}^2 = 2,05 \text{ } \mu\text{T} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 2.4

Z dimenzijsko analizo izpeljite zvezo med svetlobno hitrostjo  $c$  in drugima dvema osnovnima fizikalnima konstantama v elektromagnetizmu,  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ A s/(V m)}$  in  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ V s/(A m)}$ . Dimenzijska analiza nam sama sicer ne poda tudi dodatnega brezdimenzijskega številskega faktorja, vendar je ta v našem primeru kar enak 1. Svetlobno hitrost na osnovi izpeljane enačbe izračunajte.

Svetlobno hitrost izrazimo z drugima dvema konstantama z nastavkom:  $c = \epsilon_0^x \cdot \mu_0^y$ , kjer sta  $x$  in  $y$  še neznan eksponenta. Postavimo ustrezno enačbo za fizikalne enote teh količin:

$$\frac{\text{m}}{\text{s}} = \left(\frac{\text{As}}{\text{Vm}}\right)^x \cdot \left(\frac{\text{Vs}}{\text{Am}}\right)^y$$

Iz te enačbe zlahka razberemo, da sta eksponenta enaka, tako da se krajšata enoti A in V na desni strani enačbe. Primerjava enot m in s na obeh straneh enačba pa pokaže:  $x = y = -1/2$ . Nazadnje izračunamo:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

Kot zanimivost naj omenimo, da sta danes konstanti  $c$  in  $\mu_0$  določeni matematično natančno, iz njiju pa izračunamo  $\epsilon_0$  na poljubno število mest natančno. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 2.5

Izstopno delo za elektrone v neki kovini je 2 eV ( $\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ ). Kolikšni mejni valovni dolžini fotonov  $\lambda_m$  ustreza to? Na kovino posvetimo s svetlobo s trikrat manjšo valovno dolžino od mejne. Kolikšna je hitrost najhitrejših izbitih elektronov? Kolikšno je razmerje med energijo fotonov in kinetično energijo teh elektronov? Kolikšno je razmerje ustreznih gibalnih količin? S kolikšno zaporno napetostjo ustavimo najhitrejše elektrone, usmerjene proti nasprotni elektrodi?

Podatki:

$$\Phi = 2 \text{ eV} = 3,2 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$\lambda = \lambda_m/3$$

$$m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

-----

$$\lambda_m = ?$$

$$v = ?$$

$$E_f/E_{\text{kin}} = ?$$

$$p_f/p_e = ?$$

$$U_{\text{zap}} = ?$$

Mejna valovna dolžina fotonov ustreza ničelni kinetični energiji izbitih elektronov. Zato velja:  $hc/\lambda_m = \Phi$ , tako da dobimo  $\lambda_m = hc/\Phi = 620 \text{ nm}$ . Fotonom s 3–krat krajšo valovno dolžino ustreza 3–krat večja energija:  $E_f = 6 \text{ eV}$ . Torej preostane elektronom kinetična energija  $E_{\text{kin}} = 4 \text{ eV}$ . Tako imamo razmerje energij  $E_f/E_{\text{kin}} = 1,5$ . Elektrone s kinetično energijo 4 eV zaustavimo z zaporno napetostjo  $U_{\text{zap}} = 4 \text{ V}$  (ni treba energije pretvarjati iz enot eV v J in potem deliti z osnovnim nabojem!). Da dobimo hitrost elektronov, pa moramo energijo računati v joulih:

$$E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2} \rightarrow v = \sqrt{\frac{2E_{\text{kin}}}{m}} = 1,2 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

Nazadnje izračunamo še razmerje gibalnih količin:

$$\frac{p_f}{p_e} = \frac{E_f/c}{mv} = 3 \cdot 10^{-3}$$

Čeprav ima foton večjo energijo kot elektron kinetično energijo, pa je njegova gibalna količina veliko manjša kot pri elektronu. To sta si namreč zelo različna delca. Zgodba bo še bolj poučna, če jo malo povežemo s posebno teorijo relativnosti. Po njej je mirovna energija delca z maso  $m$  enaka  $E_0 = mc^2$ ; to ni kinetična energija! Najprej pa gibalno količino elektrona izrazimo direktno s kinetično energijo:  $p_e = mv$  in  $E_k = mv^2/2 \rightarrow p_e = (2mE_k)^{1/2}$ .

Razmerje gibalnih količin izrazimo malo drugače kot zgoraj:

$$\frac{p_f}{p_e} = \frac{E_f}{c\sqrt{2mE_{\text{kin}}}} = \sqrt{\frac{E_f^2}{2mc^2E_{\text{kin}}}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{E_f}{E_{\text{kin}}}\right)\left(\frac{E_f}{E_0}\right)}$$

Če sta energiji  $E_f$  in  $E_{\text{kin}}$  istega reda velikosti, tako kot v našem primeru, podaja razmerje obeh gibalnih količin predvsem razmerje med energijo fotona in mirovno energijo elektrona,  $E_f/E_0$ . Mirovna energija elektrona je  $E_0 \sim 0,5 \text{ MeV}$ , kar je precej več kot  $E_f = 6 \text{ eV}$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 2.6

Celotna (kinetična in mirovna) energija relativističnega delca je dvakrat večja od njegove mirovne energije. Kolikšna je njegova gibalna količina? Kolikšna je njegova hitrost?

Velja Einsteinova enačba:

$$E^2 = (2mc^2)^2 = (mc^2)^2 + p^2c^2$$

Gibalna količina delca je:

$$p = \sqrt{3}mc$$

Hitrost delca lahko izračunamo iz enačbe za energijo,  $E = \gamma mc^2$ , ali pa iz enačbe za gibalno količino  $p = \gamma mv$ , kjer je relativistični faktor:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$$

Nekoliko lažje izrazimo hitrost iz enačbe za energijo:

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \rightarrow v = c\sqrt{1 - \left(\frac{mc^2}{E}\right)^2} = \frac{\sqrt{3}}{2}c \approx 86,6\% c \quad \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 2.7

Pri Comptonovem sipanju fotona rentgenske svetlobe z valovno dolžino 0,1 nm na praktično mirujočem elektronu se fotonu poveča valovna dolžina za  $\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos \theta)$ , odvisno od kota sipanja fotona. Comptonova valovna dolžina v enačbi je  $\lambda_c = 2,43 \text{ pm}$ . Kolikšna je sprememba valovne dolžine pri kotih  $\theta = 45^\circ$ ,  $90^\circ$  in  $180^\circ$ ? Izračunajte še hitrost elektrona po trku (uporabite lahko nerelativistično kinetično energijo). Pri računu spremembe energije fotona po trku si pomagajte z diferencialom, saj je sprememba njegove valovne dolžine veliko manjša od začetne valovne dolžine.



Posebej izrazimo spremembo valovne dolžine pri kotu  $\theta = 90^\circ$ , katerega kosinus je enak nič:  $\Delta\lambda = \lambda_C = 2,43$  pm. Pri kotu  $180^\circ$  je ta sprememba dvakrat večja, pri kotu  $45^\circ$  pa je manjša:  $\Delta\lambda \approx 0,293 \lambda_C = 0,71$  pm. Kinetična energija elektrona po trku je:

$$E_{\text{kin}} = |\Delta E_f| \approx \left| \frac{dE_f}{d\lambda} \right| \cdot \Delta\lambda = \left| \frac{d(hc/\lambda)}{d\lambda} \right| \cdot \Delta\lambda = \frac{hc\Delta\lambda}{\lambda^2}$$

Hitrost elektrona je potem:

$$v = \sqrt{\frac{2E_{\text{kin}}}{m_e}} = \sqrt{\frac{2hc\Delta\lambda}{m_e\lambda^2}} = \sqrt{\frac{2hc\lambda_C(1 - \cos\theta)}{m_e\lambda^2}}$$

Upoštevajmo še zvezo  $\lambda_C = h/(m_e c)$ :

$$v = \frac{h}{m_e\lambda} \cdot \sqrt{2(1 - \cos\theta)}$$

Največja je hitrost elektrona pri »centralnem trku«, ko se foton odbije direktno nazaj in je sipalni kot  $\theta = 180^\circ$ :

$$v_{\text{max}} = \frac{2h}{m_e\lambda} = 1,46 \cdot 10^7 \text{ m/s}$$

To je okrog  $c/20$ , torej še v nerelativističnem območju hitrosti. Pri kotu  $90^\circ$  je hitrost elektrona  $1,03 \cdot 10^7$  m/s, pri kotu  $45^\circ$  pa  $5,57 \cdot 10^6$  m/s. ♠

### 3 OSNOVNI POJMI KVANTNE MEHANIKE

Opomba: veliko nalog v tem poglavju ni neposredno povezanih s snovjo predmeta, temveč so koristne za utrjevanje potrebnih matematičnih orodij; predvsem gre za kompleksna števila in operacije z vektorji in matrikami.

#### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.1

Vektor v Hilbertovem prostoru je  $x = (1 + i, 1 - i, 1, i)$ . Izračunajte njegovo velikost. Drugi vektor je  $y = (1 - i, i, i, y_4)$ . Kolikšna mora biti njegova komponenta  $y_4$ , da bosta vektorja  $x$  in  $y$  pravokotna med seboj?

Kvadrat velikosti vektorja  $x$  zapišemo v formalnem matematičnem zapisu:

$$\langle x|x \rangle = \begin{bmatrix} 1-i & 1+i & 1 & -i \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1+i \\ 1-i \\ 1 \\ i \end{bmatrix} = 2 + 2 + 1 + 1 = 6$$

Torej je  $x = 6^{1/2}$ . Vektorja  $x$  in  $y$  sta si pravokotna, ko je:

$$\langle x|y \rangle = \begin{bmatrix} 1-i & 1+i & 1 & -i \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1-i \\ i \\ i \\ y_4 \end{bmatrix} = (1-i)^2 + (1+i)i + i - iy_4 = 0$$

To velja takrat, ko je  $y_4 = i$ . ♠

#### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.2

Poiščite vseh 5 kompleksnih rešitev enačbe  $z^5 = 1$ . Napišite program za numerično reševanje te enačbe po Newtonovi metodi, če začnemo s poljubno kompleksno začetno točko  $z_0 = x_0 + iy_0$ . Iteracijo za naslednji kompleksni približek  $z_{n+1}$  iz predhodnega približka  $z_n$  zapišemo z enačbo:

$$z_{n+1} = \frac{4z_n^5 + 1}{5z_n^4} = \frac{1}{5} \left( 4z_n + \frac{1}{z_n^4} \right)$$

Zapišite to enačbo z realnimi in imaginarnimi komponentami obeh števil. Preverite, h kateri od 5 rešitev konvergira iterativni postopek za izbrano začetno točko  $z_0$ .

Enačbo  $z^5 = 1$  lahko zapišemo v polarni obliki, vemo pa tudi, da je absolutna vrednost rešitve kar enaka 1. Zato je  $z = \exp(i\varphi)$  in ustrezna enačba:  $\exp(5i\varphi) = 1 = \exp(2\pi)$ . Pri eni od rešitev torej za polarni kot vzamemo kar  $\varphi_1 = 2\pi/5$ , pri drugih rešitvah (vključno s preprosto rešitvijo  $z = 1$ ) pa vzamemo večkratnik tega kota. Rešitve označimo s  $\xi_j$  ( $j = 1 - 5$ ), torej:

$$\xi_j = \exp\left(j \cdot \frac{2\pi}{5} i\right) = \cos\left(j \cdot \frac{2\pi}{5}\right) + i \cdot \sin\left(j \cdot \frac{2\pi}{5}\right)$$

Če zapišemo  $n$ -ti približek po Newtonovi metodi kot  $z_n = a_n + ib_n$ , potem je zgornja enačba po komponentah:

$$a_{n+1} = \frac{1}{5} \left( 4a_n + \frac{\cos(4\varphi_n)}{(a_n^2 + b_n^2)^2} \right)$$

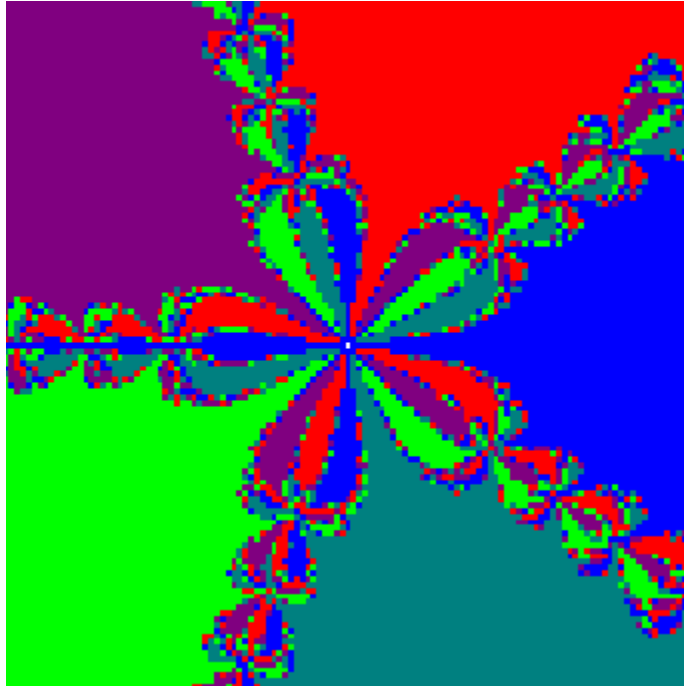
$$b_{n+1} = \frac{1}{5} \left( 4b_n - \frac{\sin(4\varphi_n)}{(a_n^2 + b_n^2)^2} \right)$$

kjer je

$$\varphi_n = \arctan \frac{b_n}{a_n}$$

paziti pa moramo tudi, da »faza«  $\varphi_n$  res ustreza pravemu kvadrantu števila  $z_n$  v kompleksni ravnini, pač glede na predznaka komponent  $a_n$  in  $b_n$ .

Kot zanimivost naj omenimo, da se da z opisano Newtonovo iterativno metodo lepo narisati fraktalni vzorec (v našem primeru 5-kraki fraktal). Trik je preprost: glede na to, h kateri končni rešitvi  $\xi_j$  konvergira metoda za dani  $z_0$ , pobarvamo točko, ki ustreza  $z_0$  v kompleksni ravnini, z eno od 5 barv. Tu seveda zadostuje, če se približek toliko približa končni rešitvi, da glede izida konvergence ni več nobenega dvoma – tedaj iterativno metodo ustavimo. Peterokraki fraktal je prikazan na sliki R13, seveda pa se moramo odločiti tudi za resolucijo točk (ena točka predstavlja cel kvadrant v kompleksni ravnini). Takšen program bo spretni programer znal napisati sam.



**Slika R13:** Peterokraki fraktal; na primer, azurno modra barva na desni in v vmesnih »rožicah« ustreza tistim začetnim točkam, ki konvergirajo k trivialni kompleksni rešitvi  $z = 1$  na vodoravni realni osi v kompleksni ravnini. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.3

Kolikšne so lastne vrednosti, determinanta in sled rotacijske matrike ter matrike zrcaljenja prek ravnine? Pomagajte si s konkretnim zgledom obeh matrik.

Ker je znano, da so lastne vrednosti matrike kot resničnega fizikalnega tenzorja drugega reda neodvisne od izbire (torej tudi rotacije) koordinatnega sistema, si za obe matriki izberemo čim preprostejša primera. Za rotacijsko matriko vzamemo matriko sukanja za kot  $\varphi$  okrog osi  $z$ :

$$R = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Vse tri (kompleksne) lastne vrednosti izračunamo tako, da postavimo na nič determinanto po diagonalni spremenjene matrike,  $\det(R - \lambda I) = 0$ :

$$\begin{vmatrix} \cos \varphi - \lambda & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

To nam da kubično enačbo:

$$(1 - \lambda)[(\cos \varphi - \lambda)^2 + \sin^2 \varphi] = 0$$

ali:

$$(1 - \lambda)[\lambda^2 - 2 \cos \varphi \cdot \lambda + 1] = 0$$

Njene rešitve so:

$$\lambda_1 = 1$$

$$\lambda_{2,3} = \cos \varphi \pm i \sin \varphi$$

Prva lastna vrednost,  $\lambda_1 = 1$ , ima nazoren matematično-fizikalni pomen: vektorje, ki ležijo na rotacijski osi (v našem primeru na osi  $z$ ), pusti množenje s to matriko nespremenjene. Druga in tretja lastna vrednost sta konjugirano kompleksni, razen v primeru, ko je  $\varphi = 0$  (enotska matrika) ali  $\varphi = \pi$  (zasuk za  $180^\circ$ ). Kot smo že omenili, popolnoma enak rezultat bi dobili, če bi gledali zasuk za enak kot okrog katerekoli druge rotacijske osi.

Determinanta matrike je produkt njenih lastnih vrednosti:  $\det R = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1$ . Sled matrike pa izračunamo kot vsoto diagonalnih elementov ali pa kot vsoto lastnih vrednosti (bralec naj se prepriča, da v našem primeru na oba načina dobimo pravi rezultat):  $\text{sl } R = 1 + 2 \cos \varphi$ .

Preprosta zrcalna matrika zrcali prek ravnine  $(x, y)$ , zato samo koordinati  $z$  poljubnega vektorja spremeni predznak:

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Tu ni kaj računati. Lastne vrednosti matrike  $Z$  so kar njeni diagonalni elementi:  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$ ,  $\lambda_3 = -1$ . Determinanta matrike je  $-1$  in prav tako njena sled. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.4

Kaj dobimo, če na poljuben 3D vektor zaporedoma delujeta matrika  $R$  iz računskega zglada 3.3 in matrika  $A$  spodaj? Ali je pomemben vrstni red delovanja obeh matrik na vektor? Za dodatni dokaz geometrijske interpretacije delovanja matrik uporabite kak preprost vektor in ga zmnožite z obema matrikama.

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}$$

Zaradi asociativnosti produkta je vseeno, ali najprej zmnožimo vektor z eno in potem z drugo matriko, ali pa prej zmnožimo matriki med seboj in potem z novo matriko zmnožimo vektor. Zato lahko sklepamo naslednje: če matriki med seboj komutirata, to je, če za njun produkt velja  $AR = RA$ , potem je vrstni red delovanja matrik na vektor nepomemben. Naši matriki  $A$  zgoraj, ki je diagonalna, pri čemer so vsi diagonalni elementi enaki, lahko rečemo tudi skalarna matrika. To pomeni: če z njo pomnožimo vektor, je enako, kot če bi ga pomnožili kar s skalarjem (v našem primeru s faktorjem  $-2$ ). Matrika  $A$  torej poveča velikost poljubnega vektorja za faktor 2, hkrati pa ga zaradi negativnega predznaka obrne v nasprotno smer. Z direktnim množenjem matrik se lahko tudi hitro prepričamo, da skalarne matrike, kot je  $A$ , komutirajo z vsemi matrikami. Torej je vrstni red delovanja obeh matrik na vektor nepomemben. Matriki na vektor delujeta tako, da se ta zasuče za kot  $\varphi$  okrog osi  $z$ , potem se poveča za faktor 2, nazadnje pa se še prezrcali prek koordinatnega izhodišča (vrstni red teh treh operacij je nepomemben).

Za konkreten zgled vzemimo vektor:  $\vec{a} = (1,0,0)$ . Najprej delujmo nanj z matriko  $R$ , potem še z  $A$ . Prvič bomo pisali množenje matrike in vektorja na dolgo, da se bralec spomni matričnega množenja:

$$R\vec{a} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \cdot 1 + (-\sin \varphi) \cdot 0 + 0 \cdot 0 \\ \sin \varphi \cdot 1 + \cos \varphi \cdot 0 + 0 \cdot 0 \\ 0 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$A(R\vec{a}) = \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \cos \varphi \\ -2 \sin \varphi \\ 0 \end{bmatrix}$$

Bralec naj stari in novi vektor skicira v kartezičnem koordinatnem sistemu. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.5

Pokažite, da rotacijska matrika ohranja skalarni produkt transformiranih vektorjev.

Geometrijsko je ohranitev skalarnega produkta, če vse vektorje zasukamo z isto matriko, nazorna, saj se pri zasuku ohranijo tako velikosti vektorjev kot koti med njimi. To dokažimo

še formalno z računom. Ker je skalarni produkt neodvisen od izbire koordinatnega sistema (saj je skalar), izberemo koordinatni sistem spet tako, da dana matrika suče vektorje za kot  $\varphi$  okrog osi  $z$ , to je:

$$R = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Pomnožimo s to matriko poljubna vektorja:

$$R\vec{a} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \cdot a_x - \sin \varphi \cdot a_y \\ \sin \varphi \cdot a_x + \cos \varphi \cdot a_y \\ a_z \end{bmatrix}$$

$$R\vec{b} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \cdot b_x - \sin \varphi \cdot b_y \\ \sin \varphi \cdot b_x + \cos \varphi \cdot b_y \\ b_z \end{bmatrix}$$

Skalarni produkt med novima vektorjema zapišemo za spremembo v načinu matričnega množenja, tedaj moramo zapisati en vektor kot vrstico, drugega pa kot stolpec:

$$R\vec{a} \cdot R\vec{b} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \cdot a_x - \sin \varphi \cdot a_y & \sin \varphi \cdot a_x + \cos \varphi \cdot a_y & a_z \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos \varphi \cdot b_x - \sin \varphi \cdot b_y \\ \sin \varphi \cdot b_x + \cos \varphi \cdot b_y \\ b_z \end{bmatrix}$$

$$R\vec{a} \cdot R\vec{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = \vec{a} \cdot \vec{b}$$

Tu nam je zmanjkovalo prostora za pisanje vsote treh produktov komponent, vendar lahko bralec sam na dolgo preveri, da se sinusi in kosinusi kota zasuka pri množenju in seštevanju prvih dveh parov komponent obeh vektorjev lepo poenostavijo. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.6

Kateri matriki ustreza zaporedna operacija zasuka najprej za kot  $\varphi_1$ , potem še za kot  $\varphi_2$ , okrog osi  $x$ ?

Naj bo nova matrika  $X$ . Sklepamo, da jo to matrika zasuka za kot  $\varphi_1 + \varphi_2$  okrog osi  $x$ , vendar pokažimo to formalno z matričnim množenjem matrik:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_1 & -\sin \varphi_1 \\ 0 & \sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_2 & -\sin \varphi_2 \\ 0 & \sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 \end{bmatrix}$$

Z množenjem hitro uvidimo  $x_{11} = 1$ ,  $x_{12} = x_{13} = x_{21} = x_{31} = 0$ . Preverimo še spodnji desni  $2 \times 2$  del matrike  $X$ , zaradi podobnosti členov je pravzaprav dovolj preveriti le dve komponenti:

$$x_{22} = \cos \varphi_1 \cdot \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cdot \sin \varphi_2 = \cos(\varphi_1 + \varphi_2)$$

$$x_{32} = \sin \varphi_1 \cdot \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cdot \sin \varphi_2 = \sin(\varphi_1 + \varphi_2)$$

Torej je matrika  $X$ :

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi_1 + \varphi_2) & -\sin(\varphi_1 + \varphi_2) \\ 0 & \sin(\varphi_1 + \varphi_2) & \cos(\varphi_1 + \varphi_2) \end{bmatrix}$$

in res ustreza rotaciji za kot  $\varphi_1 + \varphi_2$  okrog osi  $x$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.7

Pokažite, da je v splošnem (tudi pri vrtenju okrog dveh različnih osi v 3D prostoru) produkt dveh rotacijskih matrik spet rotacijska matrika. Potem izračunajte, kateri rotaciji (os in kot vrtenja) ustreza naslednje delovanje rotacijskih matrik na poljubni vektor: najprej rotacija za kot  $30^\circ$  okrog osi  $x$  in potem rotacija za kot  $45^\circ$  okrog osi  $z$  (obe vrtenji sta v pozitivnem smislu).

To je zelo poučen zgled in bralcu priporočamo, da si ga temeljito ogleda, saj se v njem pojavi več splošno pomembnih matematičnih prijemov.

Osnovni lastnosti vsake rotacijske matrike sta dve: 1) ohranja skalarni produkt transformiranih vektorjev 2) njena determinanta je enaka 1. Iz teh dveh lastnosti namreč



sledijo tudi druge, npr. da je ena od lastnih vrednosti rotacijske matrike enaka 1. Dokaza, da ima tudi produkt rotacijskih matrik ti dve lastnosti, sta dokaj preprosta. Vzemimo rotacijski matriki  $R_1$  in  $R_2$  in poljubna vektorja  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$ . Produkt matrik je  $R = R_1R_2$ . Preverimo naslednji skalarni produkt:  $R\mathbf{a} \cdot R\mathbf{b} \equiv (R\mathbf{a}, R\mathbf{b})$ . Upoštevajmo, da obe matriki,  $R_1$  in  $R_2$ , ustrezata lastnosti ohranitve skalarnega produkta vektorjev:

$$(R\mathbf{a}, R\mathbf{b}) = (R_1R_2\mathbf{a}, R_1R_2\mathbf{b}) = (R_1(R_2\mathbf{a}), R_1(R_2\mathbf{b})) = (R_2\mathbf{a}, R_2\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b}).$$

V vmesnem koraku smo pač upoštevali, da sta  $R_2\mathbf{a}$  in  $R_2\mathbf{b}$  prav tako vektorja, katerih skalarni produkt mora delovanje matrike  $R_1$  ohraniti.

Dokaz drugega pravila je še preprostejši:  $\det(R) = \det(R_1R_2) = \det(R_1) \cdot \det(R_2) = 1 \cdot 1 = 1$ .

Sedaj pa vzemimo zgoraj omenjeni rotacijski matriki:

$$R_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \frac{\pi}{6} & -\sin \frac{\pi}{6} \\ 0 & \sin \frac{\pi}{6} & \cos \frac{\pi}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}$$

$$R_2 = \begin{bmatrix} \cos \frac{\pi}{4} & -\sin \frac{\pi}{4} & 0 \\ \sin \frac{\pi}{4} & \cos \frac{\pi}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Pri množenju obeh matrik moramo paziti; pravi vrstni red je  $R = R_2R_1$ , če na vektor najprej deluje matrika  $R_1$ . To nazorno vidimo, če izvedemo celotno množenje za poljubni vektor  $\mathbf{a}$ :  $R\mathbf{a} = (R_2R_1)\mathbf{a} = R_2(R_1\mathbf{a})$ . Ob tem množenju se spomnimo še enega pomembnega pravila množenja matrik in vektorjev. Čeprav množenje v splošnem **ni komutativno**, torej vrstni red zapisa faktorjev **je pomemben**, pa je množenje **asociativno**, kar pomeni, da lahko postavimo oklepaje, ki povejo, kaj najprej zmnožimo skupaj, poljubno. V našem primeru dobimo enak rezultat, če najprej zmnožimo matriki in potem produkt matrik (ki je nova matrika  $R$ ) z vektorjem  $\mathbf{a}$ , kot če najprej zmnožimo matriko  $R_1$  z vektorjem, potem pa nov vektor še z matriko  $R_2$ .

Katero rotacijo nam da zaporedje poljubnih dveh rotacij, lahko izračunamo tudi drugače, z vektorskim računom brez uporabe matrik, mi pa bomo tu pogledali, kaj nam pove nova matrika  $R$ :

$$R = R_2 R_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{2}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{4}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}$$

Kako iz nove matrike preberemo kot vrtenja in rotacijsko os? Pri obravnavi Računskega zгледа 3.3 smo videli, da je sled rotacijske matrike enaka:  $\text{sl } R = 1 + 2\cos\varphi$ . Torej iz sledi nove matrike, ki je enaka vsoti njenih diagonalnih elementov, neposredno izračunamo kot vrtenja  $\varphi$ :

$$\varphi = \arccos\left[\frac{1}{2}(\text{sl } R - 1)\right] = \arccos\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{\sqrt{6}}{4} + \frac{\sqrt{3}}{2} - 1\right)\right] = 53,65^\circ$$

Tu je dobro komentirati različne rešitve za kot  $\varphi$ . Zaradi sodosti kosinusne funkcije bi lahko kot rešitev vzeli tudi kot z nasprotnim predznakom, vendar pa je v 3D prostoru to isto, kot da bi obrnili pozitivni poltrak osi vrtenja v nasprotno smer. Torej si kot rešitev lahko vedno izberemo pozitivni kot v območju  $0 \leq \varphi \leq \pi$ , moramo pa potem paziti, da izberemo pravilno orientacijo rotacijske osi.

Rotacijska os ustreza lastnim vektorjem z lastno vrednostjo  $\lambda = 1$ . Ti se razlikujejo med seboj samo po velikosti in kar je tu pomembnejše, po tem, da so obrnjeni v eno ali pa v nasprotno smer. Zato si bomo izbrali lastni vektor  $\mathbf{x}$  z velikostjo 1, glede njegove prave smeri pa bo treba še premisliti. Zapišimo torej enačbo  $R\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} = \mathbf{x}$  v polni matrični obliki, če označimo za sedaj komponente vektorja z  $x_1$ ,  $x_2$  in  $x_3$ . Ustrezna matrična enačba je:

$$\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{4}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

Običajno zapišemo enačbo za iskanje lastnih vektorjev pri dani lastni vrednosti (v našem primeru 1) še malo drugače:

$$\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} - 1 & -\frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{4}{\sqrt{6}} - 1 & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} - 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

To je homogeni sistem linearnih enačb (desna stran vsake enačbe je enaka nič) za neznanke  $x_1$ ,  $x_2$  in  $x_3$ . Iz teorije je znano, da ima takšen sistem netrivialne rešitve (to je, da niso vse tri neznanke enake nič, kar je seveda tudi ena od rešitev) samo, če je determinanta ustrezne matrike enaka nič. Mi pa vemo, da res velja  $\det(R - \lambda I) = 0$ , kjer je  $I$  enotska matrika, saj s to zahtevo lastne vrednosti tudi izračunamo. Tedaj pa tudi velja, da so ustrezne tri enačbe med seboj odvisne (v praksi to pomeni, da zadostujeta dve enačbi in je ena nepotrebna), hkrati pa, da tudi rešitve  $x_1$ ,  $x_2$  in  $x_3$  niso enolično določene (v praksi lahko poljubno izberemo eno od treh neznanek). Možnosti za nadaljnji postopek reševanja problema je veliko, mi pa si bomo za sedaj izbrali  $x_3 = 1$ , obdržali pa bomo prvo in tretjo enačbo (ignorirali bomo torej drugo enačbo), ki ju sedaj zapišemo eksplicitno, ne v matrični obliki:

$$\left(\frac{\sqrt{2}}{2} - 1\right)x_1 - \frac{\sqrt{6}}{4}x_2 + \frac{\sqrt{2}}{4} \cdot 1 = 0$$

$$\frac{1}{2}x_2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - 1\right) \cdot 1 = 0$$

Iz druge enačbe takoj izračunamo komponento vektorja  $x_2$ :

$$x_2 = 2 - \sqrt{3}$$

Vstavimo to v prvo enačbo in izračunajmo še  $x_1$ :

$$x_1 = \frac{2\sqrt{2} - \sqrt{6}}{2 - \sqrt{2}} = \frac{(2\sqrt{2} - \sqrt{6})(2 + \sqrt{2})}{(2 - \sqrt{2})(2 + \sqrt{2})} = 2 + 2\sqrt{2} - \sqrt{3} - \sqrt{6}$$

Naš »začasni« lastni vektor je torej:

$$\bar{x} = (2 + 2\sqrt{2} - \sqrt{3} - \sqrt{6}, 2 - \sqrt{3}, 1)$$

Še normalizirajmo ga na velikost 1, bolj za matematično vajo, saj imamo o rotacijski osi, ki vsebuje ta vektor, enako predstavo, pa naj bo vektor normaliziran ali ne. Je pa res, da je pri marsikaterem geometrijskem problemu praktično računati z normaliziranimi smernimi vektorji. Če vektor že ni sam po sebi normaliziran, ga normaliziramo takole:

$$\bar{x}_N = \frac{(x_1, x_2, x_3)}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}}$$

V našem primeru:

$$\bar{x}_N = \frac{1}{\sqrt{29 + 14\sqrt{2} - 16\sqrt{3} - 8\sqrt{6}}} \cdot (2 + 2\sqrt{2} - \sqrt{3} - \sqrt{6}, 2 - \sqrt{3}, 1)$$

Za boljšo predstavo ga zapišimo v decimalni obliki, zaokroženo na dve decimalki za decimalno vejico:  $\mathbf{x}_N \approx (0,53, 0,22, 0,82)$ . Bralec naj se sam prepriča, da ima v decimalkah zapisani vektor v okviru zaokrožitvene napake res velikost 1.

Vendar pa še ne vemo, ali ni morda pravi enotski lastni vektor, ki podaja pravo smer pozitivnega poltraka rotacijske osi, ravno nasprotno usmerjen, kot je zapisani vektor  $\mathbf{x}_N$  – torej tisti, pri katerem imajo vse komponente nasproten predznak od zapisanega. Bodimo natančnejši: pozitivni poltrak rotacijske osi je tisti, da če pogledamo v smeri osi od »zgoraj navzdol«, to je od pozitivnega poltraka k negativnemu, vidimo vrtenje vektorjev okrog dane osi v projekcijski ravnini v smeri nasprotno od urnega kazalca za oster kot  $53,65^\circ$ .

En način preveritve je, da si izberemo nek vektor  $\mathbf{a}$ , ki je pravokoten na vektor  $\mathbf{x}_N$ , za kar je seveda neskončno možnosti. Na primer, izberimo si komponenti vektorja  $\mathbf{a}$ ,  $a_x = 1$ ,  $a_y = 0$ , potem pa določimo še tretjo komponento  $a_z$ , da bo skalarni produkt med vektorjema enak nič. Torej, pri našem vektorju  $\mathbf{x}_N \approx (0,53, 0,22, 0,82)$  dobimo  $\mathbf{a} \approx (1, 0, -0,65)$ . Ni ga treba normalizirati. Potem izračunamo vektor  $\mathbf{b}$ , v katerega ga zasučje rotacijska matrika:

$$\bar{\mathbf{b}} = R\bar{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -0,65 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,48 \\ 0,94 \\ -0,56 \end{bmatrix}$$

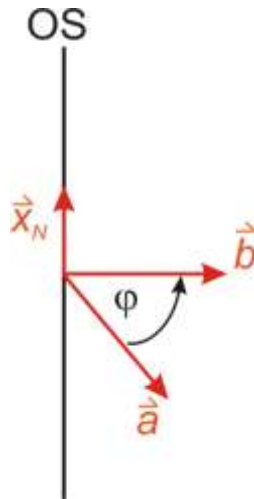
Potem poiščemo vektorski produkt:

$$\bar{\mathbf{c}} = \bar{\mathbf{a}} \times \bar{\mathbf{b}} = \begin{vmatrix} \bar{i} & \bar{j} & \bar{k} \\ 1 & 0 & -0,65 \\ 0,48 & 0,94 & -0,56 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} 0,61 \\ 0,25 \\ 0,94 \end{bmatrix}$$

Glede na sliko R14 mora biti vektor  $\mathbf{c}$ , ki je pravokoten na oba vektorja,  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$ , vzporeden z vektorjem  $\mathbf{x}_N$  na rotacijski osi. To pomeni:  $\mathbf{c}$  mora kazati v isto ali v nasprotno smer kot  $\mathbf{x}_N$ ; če je smer ista, potem smo  $\mathbf{x}_N$  zapisali prav, v nasprotnem primeru pa ga moramo pomnožiti z  $-1$ . Kot kaže, sta vektorja  $\mathbf{x}_N$  in  $\mathbf{c}$  res v isti smeri, saj imata vse komponente pozitivne. Da je stvar še bolj gotova, se prepričamo, da so si vse komponente obeh vektorjev v istem razmerju:  $c_x/x_{Nx} \approx 1,15$ ,  $c_y/x_{Ny} \approx 1,14$ ,  $c_z/x_{Nz} \approx 1,15$ . Vse se ujema, majhna razlika je le zaradi vmesnega zaokroževanja. Torej ima vektor  $\mathbf{x}_N$  zares smer pozitivnega poltraka rotacijske osi. Nazadnje za »hec« izračunajmo še kot med vektorjema  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$ , ki mora seveda biti  $53,65^\circ$ .

$$\varphi = \arccos \frac{\bar{\mathbf{a}} \cdot \bar{\mathbf{b}}}{ab} = \arccos \frac{1 \cdot 0,48 + 0 \cdot 0,94 + (-0,65) \cdot (-0,56)}{\sqrt{[1 + 0,65^2]} \cdot \sqrt{[0,48^2 + 0,94^2 + 0,56^2]}} = 53,68^\circ$$

Majhna razlika je zaradi vmesnega zaokroževanja komponent vektorjev.



**Slika R14:** Vektor  $\vec{x}_N$  v smeri rotacijske osi in zasuk nanj pravokotnega vektorja  $\vec{a}$  v vektor  $\vec{b}$ . Hkrati velja:  $\vec{a} \times \vec{b} \parallel \vec{x}_N$ . Sliko si morate predstavljati v 3D. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.8

Obravnavajte problem rotacije koordinatnih osi okrog osi  $z$  »starega« kartezičnega koordinatnega sistema, pri čemer fizični vektorji ostanejo nespremenjeni. Ker pa se zasukata osi  $x$  in  $y$ , se morata glede na novi osi spremeniti tudi obe komponenti vektorjev. Ker se v smeri osi  $z$  nič ne spremeni, lahko problem obravnavate v 2D. Naj se osi  $x$  in  $y$  zasučeta za kot  $\varphi = \pi/6$  v pozitivni smeri, to je nasprotno od urnega kazalca. Izpeljite transformacijsko matriko na novo, ne da bi upoštevali rotacijske matrike, kot smo jih obravnavali doslej. Delovanje matrike preverite na enotskih vektorjih  $\vec{a} = (1, 0)$ ,  $\vec{b} = (0, 1)$  in  $\vec{c} = (1/2)(3^{1/2}, 1)$ . Interpretirajte matematično ekvivalentnost matrik za fizični zasuk vektorjev in matrik za zasuk koordinatnih sistemov.

Zasuk koordinatnih osi je prikazan na sliki R15. Prvotni koordinatni sistem je  $S$ , zasukani pa  $S'$ . Enotska vektorja na starih oseh sta  $\vec{i}$  in  $\vec{j}$ , na novih pa  $\vec{e}$  in  $\vec{f}$ . Glede na sistem  $S$  so ti štirje vektorji po komponentah enaki:  $\vec{i} = (1, 0)$ ,  $\vec{j} = (0, 1)$ ,  $\vec{e} = (\cos \varphi, \sin \varphi)$ ,  $\vec{f} = (-\sin \varphi, \cos \varphi)$ . Vzemimo poljubni vektor  $\vec{v} = (x, y)$  glede na  $S$ . Transformacijo tega vektorja v vektor  $\vec{v}' = (x', y')$  glede na  $S'$  ugotovimo tako, da izračunamo nove komponente vektorja kot pravokotne projekcije vektorja na novi koordinatni osi. Pomagamo si s skalarnim produktom ustreznih vektorjev:

$$x' = \vec{e} \cdot \vec{v} = (\cos \varphi, \sin \varphi) \cdot (x, y) = (\cos \varphi)x + (\sin \varphi)y$$

$$y' = \vec{f} \cdot \vec{v} = (-\sin \varphi, \cos \varphi) \cdot (x, y) = (-\sin \varphi)x + (\cos \varphi)y$$

Obe relaciji zapišemo v matrični obliki kot:  $\vec{v}' = T\vec{v}$ , kjer je transformacijska matrika:

$$T = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}$$

Matrika  $T$  je zelo podobna rotacijski matriki (njeni skrčitvi na 2D):

$$R = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}$$

Zveza je še tesnejša – matriki sta si inverzni:  $T = R^{-1}$ . Geometrijski pomen te relacije je razviden na sliki R15: tudi  $T$  je v resnici rotacijska matrika (samo da jo označimo s  $T$  namesto z  $R$  in z oznako poudarimo, da ne gre za pravo rotacijo vektorja). Če zavrtimo npr. os  $x$  za kot  $\varphi$  v smeri nasprotno od urnega kazalca, potem se spremeni projekcija vektorja na to os (kar je isto kot njegova komponenta  $x$ ) povsem enako, kot če bi os  $x$  pustili pri miru in namesto nje zavrteli sam vektor v nasprotno smer – v smer urnega kazalca. Zaradi tega sta si matriki  $T$  in  $R$  inverzni.

Interpretacija postane še jasnejša, če zapišemo splošni vektor  $\mathbf{v}$  s kotom glede na staro koordinatno os  $x$ :  $\mathbf{v} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$ . Poglejmo, kako ga »spremenita« matriki  $T$  in  $R$ :

$$T\bar{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \cos \alpha + \sin \varphi \sin \alpha \\ -\sin \varphi \cos \alpha + \cos \varphi \sin \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha - \varphi) \\ \sin(\alpha - \varphi) \end{bmatrix}$$

$$R\bar{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \cos \alpha - \sin \varphi \sin \alpha \\ \sin \varphi \cos \alpha + \cos \varphi \sin \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha + \varphi) \\ \sin(\alpha + \varphi) \end{bmatrix}$$

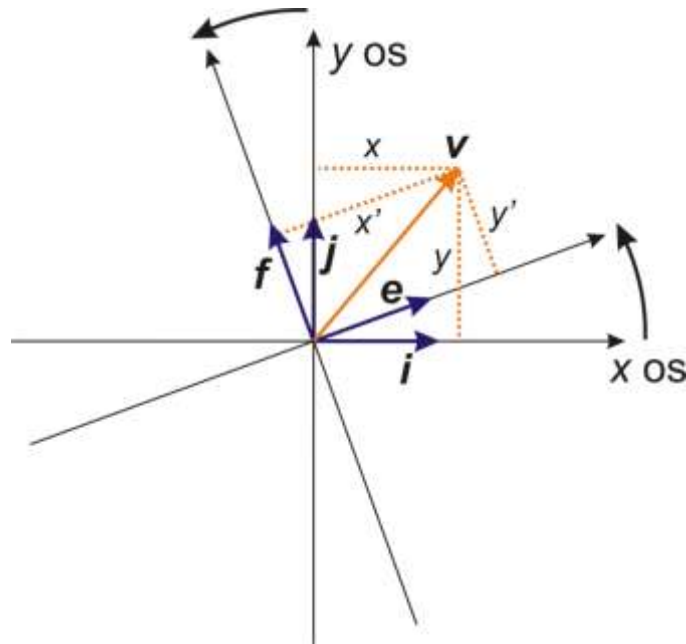
Za test pomnožimo z matriko  $T$  omenjene tri vektorje in vzemimo  $\varphi = \pi/6$ :

$$T\bar{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \\ -\sin \varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 \\ -1/2 \end{bmatrix}$$

$$T\bar{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \varphi \\ \cos \varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}$$

$$T\bar{\mathbf{c}} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & 1/2 \\ -1/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Vektorja  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$  sta enaka vektorjema  $\mathbf{i}$  in  $\mathbf{j}$ . Vendar ju transformacija  $T$  ne zavrti v vektorja  $\mathbf{e}$  in  $\mathbf{f}$  zgoraj kot rotacija  $R$ , temveč ravno v nasprotno smer, ker zdaj ne gre za fizično rotacijo vektorjev  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$ . Vektor  $\mathbf{c}$  oklepa v sistemu  $S$  kot  $30^\circ$  z osjo  $x$  in je v prvem kvadrantu. Ker pa se tudi os  $x$  zavrti za kot  $30^\circ$ , pride vektor  $\mathbf{c}$  ravno na novo os  $x$ .



**Slika R15:** 2D prikaz rotacija koordinatnih osi in spremembe komponent vektorja ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.9

3D vektorja  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$  transformiramo v vektorja  $\mathbf{a}'$  in  $\mathbf{b}'$  pri zasuku koordinatnega sistema za kot  $\varphi$  okrog osi  $z$ . Kako se transformira njun vektorski produkt  $\mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$ ? Obravnavajte še fizikalni primer navora:  $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$ .

Po definiciji je  $\mathbf{c}' = \mathbf{a}' \times \mathbf{b}'$ . Če je  $\mathbf{a}' = T\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}' = T\mathbf{b}$ , je smiselno pričakovati  $\mathbf{c}' = T\mathbf{c}$ , ali zapisano direktno  $T\mathbf{a} \times T\mathbf{b} = T(\mathbf{a} \times \mathbf{b})$ . Z besedami: enak vektor glede na sistem  $S'$  dobimo, če najprej transformiramo vektorja  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$  in potem izračunamo njun vektorski produkt, kot če najprej izračunamo vektorski produkt vektorjev v sistemu  $S$  in šele potem dobljeni vektor transformiramo v  $S'$ .

Preverimo, ali je to res. Najprej zapišemo transformacijo obeh vektorjev, tokrat z vsemi tremi komponentami:

$$a_x' = a_x \cos \varphi + a_y \sin \varphi, \quad a_y' = -a_x \sin \varphi + a_y \cos \varphi, \quad a_z' = a_z$$

$$b_x' = b_x \cos \varphi + b_y \sin \varphi, \quad b_y' = -b_x \sin \varphi + b_y \cos \varphi, \quad b_z' = b_z$$

Komponente njunega vektorskega produkta so:

$$c_x' = a_y' b_z' - a_z' b_y' = (a_y b_z - a_z b_y) \cos \varphi + (a_z b_x - a_x b_z) \sin \varphi$$

$$c_y' = a_z' b_x' - a_x' b_z' = -(a_y b_z - a_z b_y) \sin \varphi + (a_z b_x - a_x b_z) \cos \varphi$$

$$c_z' = a_x'b_y' - a_y'b_x' = a_xb_y - a_yb_x = c_z$$

Enake komponente dobimo, če najprej izračunamo vektorski produkt  $\mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$  in potem naredimo transformacijo  $\mathbf{c}' = T\mathbf{c}$ . Zapišimo na dolgo, da bo vse jasno:

$$c_x = a_yb_z - a_zb_y$$

$$c_y = a_zb_x - a_xb_z$$

$$c_z = a_xb_y - a_yb_x$$

$$c_x' = c_x \cos \varphi + c_y \sin \varphi = (a_yb_z - a_zb_y)\cos \varphi + (a_zb_x - a_xb_z)\sin \varphi$$

$$c_y' = -c_x \sin \varphi + c_y \cos \varphi = -(a_yb_z - a_zb_y)\sin \varphi + (a_zb_x - a_xb_z)\cos \varphi$$

$$c_z' = c_z$$

Dokaz je končan.

To, da je transformacija vektorskega produkta enaka vektorskemu produktu že transformiranih vektorjev, je povezano s tem, da transformacija vseh vektorjev ohranja kote med njimi, kot smo že pokazali pri fizični rotaciji vektorjev. Vemo pa, da je vektorski produkt pravokoten na oba prvotna vektorja, torej ta pravokotnost ostane tudi pri transformiranih vektorjih.

Pri računu in transformaciji navora vzemimo za ilustracijo preprosto geometrijo. Za spremembo ne bomo računali s komponentami vektorjev, ampak direktno s smernimi vektorji »starega« koordinatnega sistema  $S$ :  $\mathbf{i} = (1, 0, 0)$ ,  $\mathbf{j} = (0, 1, 0)$ ,  $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$ . Uporabili bomo zveze:  $\mathbf{i} \times \mathbf{j} = \mathbf{k}$ ,  $\mathbf{j} \times \mathbf{k} = \mathbf{i}$ ,  $\mathbf{k} \times \mathbf{i} = \mathbf{j}$  in seveda  $\mathbf{i} \times \mathbf{i} = \mathbf{j} \times \mathbf{j} = \mathbf{k} \times \mathbf{k} = 0$ . Ročica naj bo v smeri osi  $x$ :  $\mathbf{r} = x\mathbf{i}$ , sila pa je  $\mathbf{F} = F_x\mathbf{i} + F_y\mathbf{j}$ . Navor je:  $\mathbf{M} = (x\mathbf{i}) \times (F_x\mathbf{i} + F_y\mathbf{j}) = xF_y\mathbf{k}$ . Če zasukamo koordinatni sistem okrog osi  $z$ , se sicer komponente vektorjev  $\mathbf{r}$  in  $\mathbf{F}$  zapišejo v  $S'$  drugače, navor, ki kaže v smeri osi  $z$ , pa ostane nespremenjen. Pa zavrtimo koordinatni sistem okrog osi  $x$  za kot  $90^\circ$ , tako da je nova os  $y$  v smeri prejšnje osi  $z$  (pozitivna smer vrtenja). Povejmo kar z besedami: ročica ostane na osi  $x$  tudi v zasukanem sistemu, sila pa bomo zapisali drugače, čeprav je fizično seveda to še vedno vektor v isti smeri. Vektorje v smereh novih osi označimo z  $\mathbf{i}'$ ,  $\mathbf{j}'$  in  $\mathbf{k}'$  in očitno velja:  $\mathbf{i}' = \mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}' = \mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k}' = -\mathbf{j}$  (skicirajte sami!). Ali v nasprotni smeri:  $\mathbf{i} = \mathbf{i}'$ ,  $\mathbf{j} = -\mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{k} = \mathbf{j}'$ . V »napol novih koordinatah« lahko potem navor zapišemo tudi takole:  $\mathbf{M}' = (x\mathbf{i}') \times (F_x\mathbf{i}' - F_y\mathbf{k}') = xF_y\mathbf{j}'$ . To se sklada s tem, če »transformiramo« že zgoraj izračunani navor:  $\mathbf{M}' = xF_y\mathbf{k} = xF_y\mathbf{j}'$ . Če pa želimo imeti popoln zapis navora v sistemu  $S'$ , moramo ustrezno preimenovali tudi obe komponenti vektorjev:  $x = x'$  in  $F_y = -F'_z$ , torej  $\mathbf{M}' = xF_y\mathbf{k} = x'F'_z\mathbf{j}'$ . ♠



♥ RAČUNSKI ZGLED 3.10

Če se pri rotaciji koordinatnega sistema vektorji transformirajo kot  $\mathbf{x}' = T\mathbf{x}$ , se matrike transformirajo tako:  $A' = TAT^{-1}$ . To je v skladu s tem, da transformacija ohranja zveze med vektorji in matrikami:  $\mathbf{y} = A\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}' = A'\mathbf{x}'$ . Dokažite pravilnost transformacije za matrike. Transformirajte diagonalni tenzor vztrajnostnega momenta pri zasuku koordinatnega sistema za kot  $\pi/4$  okrog osi  $z$ .

Dokaz ni težak, če upoštevamo enačbe:  $\mathbf{y} = A\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}' = A'\mathbf{x}'$ ,  $\mathbf{x}' = T\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} = T^{-1}\mathbf{x}'$ ,  $\mathbf{y}' = T\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{y} = T^{-1}\mathbf{y}'$ . Gremo:

$$\mathbf{y}' = A'\mathbf{x}' \rightarrow T\mathbf{y}' = A'T\mathbf{x}' \rightarrow T^{-1}T\mathbf{y}' = T^{-1}A'T\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{y} = T^{-1}A'T\mathbf{x}$$

Ker pa hkrati velja  $\mathbf{y} = A\mathbf{x}$ , mora za matrike veljati:  $A = T^{-1}A'T$ . Zadnjo enačbo pomnožimo z leve strani z matriko  $T$ , z desne pa z matriko  $T^{-1}$  in nazadnje res ugotovimo:  $A' = TAT^{-1}$ .

Naredimo transformacijo na diagonalni matriki:

$$J = \begin{bmatrix} J_{11} & 0 & 0 \\ 0 & J_{22} & 0 \\ 0 & 0 & J_{33} \end{bmatrix}$$

kjer je transformacijska matrika (najprej za poljubni kot):

$$T = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Tenzor  $J$  v sistemu  $S'$  je:

$$J' = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} J_{11} & 0 & 0 \\ 0 & J_{22} & 0 \\ 0 & 0 & J_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Z množenjem matrik se prebijemo do:

$$J' = \begin{bmatrix} J_{11} \cos^2 \varphi + J_{22} \sin^2 \varphi & (J_{22} - J_{11}) \sin \varphi \cos \varphi & 0 \\ (J_{22} - J_{11}) \sin \varphi \cos \varphi & J_{11} \sin^2 \varphi + J_{22} \cos^2 \varphi & 0 \\ 0 & 0 & J_{33} \end{bmatrix}$$

To je še vedno simetrična matrika, tako kot večina fizikalnih tenzorjev drugega reda. V primeru sučnega kota  $45^\circ$  je transformirani tenzor dokaj preprost:

$$J' = \begin{bmatrix} (J_{11} + J_{22})/2 & (J_{22} - J_{11})/2 & 0 \\ (J_{22} - J_{11})/2 & (J_{11} + J_{22})/2 & 0 \\ 0 & 0 & J_{33} \end{bmatrix}$$

Lastne vrednosti transformirane matrike so  $J_{11}$ ,  $J_{22}$  in  $J_{33}$ , tako kot pri prvotni matriki  $J$ , saj transformacija koordinatnega sistema ne spremeni lastnih vrednosti. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.11

Pri zapisu vektorskega produkta  $\mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$  si pri nekaterih splošnih izpeljavah, npr. v kvantni mehaniki, pomagamo z antisimetričnim tenzorjem ranga tri. To pomeni, da za označevanje njegovih komponent potrebujemo 3 indekse:  $\varepsilon_{ijk}$ . Ti elementi so različni od nič samo, če so vsi trije indeksi različni; od 27 komponent tenzorja je takšnih 6 komponent;  $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1$ ,  $\varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = -1$ . S tem tenzorjem zapišemo komponente vektorja  $\mathbf{c}$  takole:  $c_i = \varepsilon_{ijk} a_j b_k$  (z Einsteinovo konvencijo seštevanja po indeksu, če se pojavi v izrazu dvakrat; torej moramo v našem primeru vzeti vsoto po indeksih  $j$  in  $k$ ). Dokažite pravilnost te enačbe.

Tu je bolj praktično biti konkreten. Vzemimo kar komponento  $c_1$ . V vsoti po indeksih  $j$  in  $k$  se pojavijo komponente tenzorja  $\varepsilon$ , ki se začnejo z indeksom 1. Od nič sta različni le dve:  $\varepsilon_{123} = 1$ ,  $\varepsilon_{132} = -1$ . Torej:  $c_1 = \varepsilon_{123} a_2 b_3 + \varepsilon_{132} a_3 b_2 = a_2 b_3 - a_3 b_2$ , kar je pravilno. Podobno preverimo drugi dve komponenti:  $c_2 = \varepsilon_{231} a_3 b_1 + \varepsilon_{213} a_1 b_3 = a_3 b_1 - a_1 b_3$ ,  $c_3 = \varepsilon_{312} a_1 b_2 + \varepsilon_{321} a_2 b_1 = a_1 b_2 - a_2 b_1$ .

Za vajo uporabimo ta zapis pri operatorju tirne vrtilne delca v kvantni mehaniki. V klasični mehaniki je vrtilna količina glede na izbrano izhodišče koordinatnega sistema vektorski produkt krajevnega vektorja in gibalne količine delca:  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ , kjer je  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  in  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ . V kvantni mehaniki uporabimo operatorje za te količine:

$$\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{r}} \times \widehat{\mathbf{p}}$$

kjer sta vektorska operatorja faktorjev:

$$\widehat{\mathbf{r}} \equiv \vec{\mathbf{r}} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$$

$$\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}\right)$$

Zaradi praktičnosti pri seštevanju smo koordinate označili drugače:  $x \equiv x_1$ ,  $y \equiv x_2$ ,  $z \equiv x_3$ . Zdaj že lahko zapišemo vsako komponento vektorskega operatorja vrtilne količine z uporabo tenzorja  $\varepsilon$ :

$$\hat{L}_j = -i\hbar \varepsilon_{jmn} x_m \frac{\partial}{\partial x_n}$$

Raje nismo uporabili indeksa  $i$ , ker je  $i$  v enačbi imaginarna enota. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.12

V kvantni mehaniki se v nekaterih enačbah pojavi izraz  $\exp[-2\pi i H t / \hbar]$ , kjer je  $i$  imaginarna enota,  $H$  Hamiltonova (energijska) matrika,  $t$  čas in  $\hbar$  Planckova konstanta. Kaj pomeni eksponentna funkcija matrike? Pomagajte si s Taylorjevo vrsto, tako da z njo posplošite navadne funkcije ene skalarne spremenljivke na funkcije matrik. Najprej za matriko  $H$  vzemite diagonalno matriko poljubne dimenzije. Potem poskusite izraz posplošiti tudi na nedagonalne matrike.

Ker lahko kvadratno matriko (ki ima enako število vrstic in stolpcev) lahko poljubno mnogokrat množimo samo s seboj, lahko v Taylorjevo vrsto poljubne funkcije namesto skalarja vstavimo kar matriko. Taylorjev razvoj navadne eksponentne funkcije je:

$$\exp(x) = 1 + x + x^2/2 + x^3/6 + \dots + x^n/n! + \dots$$

Zato lahko zapišemo tudi za kvadratno matriko  $A$ :

$$\exp(A) = I + A + A^2/2 + A^3/6 + \dots + A^n/n! + \dots$$

Namesto enke je pri matrikah prvi člen enotska matrika  $I$ .

Vzemimo zdaj diagonalno matriko  $D$  velikosti  $k \times k$ , njene diagonalne elemente pa označimo z  $\lambda_i$ ,  $i = 1 - k$ . Poljubna ( $m$ -ta) potenca diagonalne matrike je spet diagonalna matrika, njeni diagonalni elementi pa so kar  $\lambda_i^m$ ,  $i = 1 - k$ . Tako v Taylorjevi vrsti za diagonalno matriko dobimo posamezne skalarne Taylorjeve vrste za njene diagonalne elemente, te Taylorjeve vrste pa ustrezajo prvotni funkciji. Zato sklepamo naslednje: Poljubna funkcija diagonalne matrike, ki se da razviti v Taylorjevo vrsto, je kar enaka novi diagonalni matriki, katere diagonalni elementi so ista funkcija diagonalnih elementov prvotne matrike. Bodimo zdaj konkretni in vzemimo eksponentno funkcijo diagonalne matrike  $4 \times 4$ :

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{bmatrix} \rightarrow \exp(D) = \begin{bmatrix} \exp(\lambda_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(\lambda_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(\lambda_3) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(\lambda_4) \end{bmatrix}$$

Vzemimo zdaj diagonalno matriko  $H$  dimenzij  $n \times n$  z diagonalnimi elementi, ki ustrezajo energijam  $E_i$  različnih stacionarnih kvantnih stanj, pri računanju njene eksponentne funkcije

pa lahko seveda dodatne skalarne faktorje damo kar k njenim elementom. Zato nazadnje dobimo zvezo:

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_n \end{bmatrix} \rightarrow \exp(-2\pi Ht/h) = \begin{bmatrix} \exp(-2\pi E_1 t/h) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(-2\pi E_n t/h) \end{bmatrix}$$

V principu lahko računamo tudi z matrikami  $n \times n$ ,  $n \rightarrow \infty$ .

Včasih pa si v kvantni mehaniki izberemo »koordinatni sistem« (v resnici gre za sistem ustreznih funkcij, glede na katere računamo matrične elemente), v katerem matrika  $H$  ni diagonalna. V tem primeru jo vedno lahko diagonaliziramo z že zgoraj omenjeno ustrežno transformacijo  $T$  (gl. računski zgled 7.18):  $H = T^{-1}H_d T$ , kjer je  $H_d$  diagonalna matrika z elementi  $E_i$ . Preden uporabimo Taylorjevo vrsto za matrično funkcijo, pogledajmo, kaj je s poljubno potenco nediagonalne matrike  $H$ :

$$H^m = H \cdot H \cdot \dots \cdot H = T^{-1}H_d T \cdot T^{-1}H_d T \cdot \dots \cdot T^{-1}H_d T$$

Pri vmesnih množenjih pride po poenostavitve  $T \cdot T^{-1} = I$ , zato se izraz poenostavi:

$$H^m = T^{-1}H_d^m T$$

Zato imamo tudi v Taylorjevi vrsti v vsakem členu, ne glede na potenco, najprej faktor  $T^{-1}$ , vmes so potence diagonalne matrike, za katere Taylorjev razvoj že poznamo, na koncu pa je še faktor  $T$ . Zato že lahko zapišemo končni rezultat:

$$\exp(-2\pi Ht/h) = T^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \exp(-2\pi E_1 t/h) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(-2\pi E_n t/h) \end{bmatrix} \cdot T \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.13

Nek 2-nivojski kvantni sistem ima v osnovnem stanju energijo  $E_0$ , v vzbujenem stanju pa  $E_1 > E_0$  (slika R16). Naj bo razlika obeh energij enaka  $\Delta E_{10} = E_1 - E_0 = 5$  eV. Osnovno stanje je nedegenerirano (eno samo kvantno stanje), degeneracija vzbujenega stanja pa je  $g = 3$ : to pomeni, da gre za 3 različna kvantna stanja z enako energijo  $E_1$ . Naj bo število vseh kvantnih delcev v obeh energijskih nivojih skupaj enako  $N$ , od tega 70 % v osnovnem stanju in 30 % v vzbujenem stanju (to je po 10 % v vsakem od treh kvantnih stanj z energijo  $E_1$ , slika levo). Če kvantni delci niso preblizu skupaj, tako da se ne pozna njihov fermionski ali bozonski značaj), potem njihovo številčno porazdelitev po energijskih nivojih opisuje Boltzmanova

porazdelitev. Najpreprosteje podamo to porazdelitev z razmerji števil delcev v posameznih kvantnih stanjih (recimo  $i$ -to in  $j$ -to stanje z energijama  $E_i$  in  $E_j$ ):

$$\frac{N_i}{N_j} = \exp\left(\frac{E_j - E_i}{kT}\right)$$

Pri tem je  $k$  Boltzmannova konstanta,  $T$  pa absolutna temperatura kvantnega sistema. Enačba pove, da je število delcev v kvantnem stanju z višjo energijo manjše kot v tistem z nižjo energijo. Še enkrat poudarimo: če gre za degenerirani energijske nivoje, velja enačba za vsako kvantno stanje posebej. Ker pa so stanja z enako energijo enako številčna, lahko enačbo prepišemo tudi drugače:

$$\frac{N(E_i)}{N(E_j)} = \frac{g_i}{g_j} \cdot \exp\left(\frac{E_j - E_i}{kT}\right)$$

Tukaj seštejemo skupaj delce za vsa kvantna stanja pri isti energiji, števili  $g_i$  in  $g_j$  pa sta ustrezni degeneriranosti. Da ne bo dvoumnosti, bomo tu šteli delce po posameznih kvantnih stanjih in bomo uporabljali prvo enačbo. Kolikšna mora biti temperatura, da veljajo podatki za zgoraj naštetih zasedenosti stanj? Kaj se zgodi s posameznimi števili delcev, če sistem zmotimo z neko zunanjo motnjo (npr. z magnetnim poljem), tako da ostane osnovno stanje še vedno degenerirano, energija vzbujenega stanja pa se razcepi na tri vrednosti:  $E_1 - \Delta E/2$ ,  $E_1$  in  $E_1 + \Delta E/2$  (slika desno)? Pri tem naj bo  $\Delta E = \Delta E_{10}/10$ . Ali se prerazporedijo števila delcev samo v zgornjih treh kvantnih stanjih (zdaj vsako z drugačno energijo), ali pa se kaj delcev »preseli« tudi iz vzbujenega stanja v osnovno ali pa v nasprotno smer?

Rešimo najprej prvi del naloge z degeneriranim vzbujenim stanjem. Število delcev v osnovnem stanju označimo z  $N_0$ , število v vsakem od treh višjih kvantnih stanj pa z  $N_1$ . Velja:

$$\frac{N_1}{N_0} = \frac{1}{7} = \exp\left(-\frac{\Delta E_{10}}{kT}\right) \rightarrow T = \frac{\Delta E_{10}}{k \ln 7} = 2,98 \cdot 10^4 \text{ K}$$

Po energijskem razcepu obravnavamo vse štiri energijske nivoje. Naj bo novo število delcev v osnovnem nivoju enako  $N_0'$  (zanj še ne vemo, ali je enako  $N_0$  ali ne). Seštejmo vsa štiri (zdaj različna!) števila delcev in upoštevajmo razmerja po Boltzmannovi formuli:

$$N_0' + N_{1a} + N_{1b} + N_{1c} = N$$

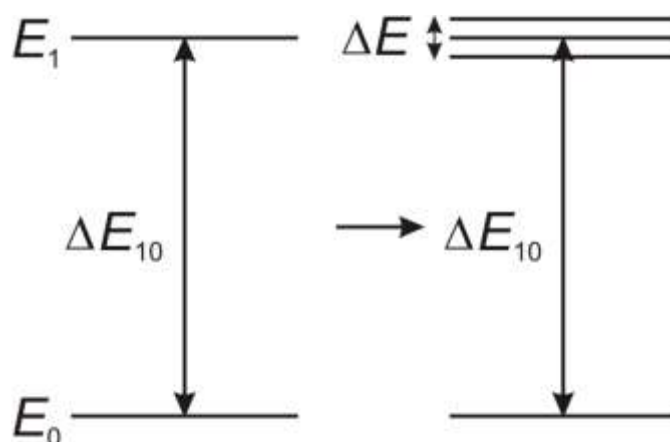
$$N_0' \left[ 1 + \exp\left(-\frac{\Delta E_{10} - \Delta E/2}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E_{10}}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E_{10} + \Delta E/2}{kT}\right) \right] = N$$

$$N_0' \left[ 1 + \frac{1}{7} \left\{ 1 + \exp\left(\frac{\Delta E_{10}/20}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E_{10}/20}{kT}\right) \right\} \right] = N$$

Pri treh členih smo namreč izpostavili  $\exp(-\Delta E_{10}/(kT)) = 1/7$ . Nadaljujmo:  $\exp(\Delta E_{10}/(20kT)) = \exp(\Delta E_{10}/(kT))^{1/20} = 7^{1/20}$ . Tako zapišemo:

$$N_0' \left[ 1 + \frac{1}{7} \left\{ 1 + 7^{1/20} + 7^{-1/20} \right\} \right] = N \rightarrow N_0' \approx 69,934 \% N$$

Pred razcepitvijo zgornjega energijskega nivoja pa je bilo v osnovnem stanju 70 %  $N$  delcev, torej jih je zaradi novega ravnovesja prešlo 0,066 %  $N$  iz osnovnega v višja kvantna stanja. Koliko natančno (namesto po 10 %) jih je zdaj v vsakem od teh treh stanj, pa naj za vasjo izračuna bralec sam. Omenimo še, da so pri navadnih temperaturah ravnovesne zasedenosti višjih kvantnih stanj v primerjavi z osnovnim povsem zanemarljive. Na primer, pri  $T = 300$  K bo bralec preveril, da je  $N_1/N_0$  pri energijski razliki 5 eV samo  $1,2 \cdot 10^{-84}$ . Na višja energijska stanja moramo kvantne delce »črpati« na umeten način, če jih želimo tam imeti veliko (npr. pri delovanju laserjev).



**Slika R16:** Razcep višjega energijskega nivoja ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.14

1D dvojno potencialno jamo predstavimo npr. z neskončno potencialno jamo, ki ima na sredini ozko in dovolj visoko potencialno stopnico (slika R17). Izbrali smo priročni koordinatni sistem, tako da je  $x = 0$  na sredini jame, potencial  $V(x)$  pa soda funkcija. Tedaj se izkaže, da imata stacionarni stanji z najnižjima energijama nasprotno od prvih dveh stanj za 1D neskončno jamo brez stopnice lastni energiji, ki sta blizu skupaj. Najnižje kvantno stanje ima sodo (simetrično) valovno funkcijo  $\psi_S$  in energijo  $E_S$ , drugo stanje pa liho (antisimetrično) valovno funkcijo  $\psi_A$  in višjo energijo  $E_A$ . Za visoko stopnico velja:  $\Delta E = E_A - E_S \ll E_S$ , sicer pa funkciji spominjata na sinusne stacionarne rešitve navadne neskončne 1D potencialne jame, ki jo bomo natančno obravnavali pozneje (le v bližini stopnice in v njej sta malo popačeni). Funkciji pa spominjata tudi na prva dva nihajna načina na obeh koncih vpete strune. Predznak pred funkcijo sicer fizikalno ničesar ne spremeni, a ga izberimo pri antisimetrični funkciji  $\psi_A$  tako, da bo pozitivna v desni polovici jame in negativna v levi

polovici. Za funkcijo osnovnega stanja pa je značilno, da v notranjosti območja (izključimo robni točki  $x = \pm a/2$ ) nima ničel; torej ima  $\psi_S$  povsod isti predznak in izberimo pozitivnega. Funkciji in  $\psi_S$  in  $\psi_A$  sta normalizirani in ker pripadata dvema različnima energijama, tudi »pravokotni« med seboj. Iz njiju sestavimo dve novi funkciji:

$$\psi_D = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S + \psi_A)$$

$$\psi_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S - \psi_A)$$

ki pa ne ustrezata stacionarnemu stanju, saj smo ju sestavili iz stacionarnih stanj z različnima energijama. V zvezi z novima funkcijama naredite naslednje:

- Dokažite njuno zvezo:  $\psi_L(-x) = \psi_D(x)$ .
- Dokažite, da sta normirani tako kot  $\psi_S$  in  $\psi_A$ .
- Izračunajte njun »prekrivalni integral«, ki pomeni medsebojni skalarni produkt.
- Izrazite povprečno koordinato  $x$  za vsako od njiju in komentirajte rezultat.
- Izračunajte 2D Hamiltonovo matriko za ta par funkcij.

Kjer je to praktično in smiselno, uporabite »bra-ket« zapis. Zaradi enostavnosti naj bodo vse funkcije realne, kar se da v 1D problemih vedno narediti (če ne vključimo kompleksnega časovnega faktorja).

Gremo po vrsti:

$$\psi_L(-x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S(-x) - \psi_A(-x)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S(x) + \psi_A(x)) = \psi_D(x)$$

Upoštevali smo, da pri spremembi predznaka  $x$  simetrična funkcija ohrani vrednost, antisimetrični pa se spremeni predznak. Normiranost preverimo s kvadratom skalarnega produkta funkcije same s seboj:

$$\langle \psi_D | \psi_D \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi_S + \psi_A | \psi_S + \psi_A \rangle$$

$$\langle \psi_D | \psi_D \rangle = \frac{1}{2} [\langle \psi_S | \psi_S \rangle + \langle \psi_S | \psi_A \rangle + \langle \psi_A | \psi_S \rangle + \langle \psi_A | \psi_A \rangle]$$

Upoštevajmo »ortonormiranost« prvotnih funkcij:

$$\langle \psi_D | \psi_D \rangle = \frac{1}{2} [1 + 0 + 0 + 1] = 1$$

Na podoben način dokažemo normiranost funkcije  $\psi_L$ . Njun prekrivalni integral (skalarni produkt) pa je:

$$\langle \psi_D | \psi_L \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi_S + \psi_A | \psi_S - \psi_A \rangle$$

$$\langle \psi_D | \psi_L \rangle = \frac{1}{2} [\langle \psi_S | \psi_S \rangle - \langle \psi_S | \psi_A \rangle + \langle \psi_A | \psi_S \rangle - \langle \psi_A | \psi_A \rangle]$$

$$\langle \psi_D | \psi_L \rangle = \frac{1}{2} [1 - 0 + 0 - 1] = 0$$

Tudi račun  $\langle x \rangle$  najprej predstavimo s formalnim »bra-ket« zapišom, potem pa nadaljujemo z integralom, da dobimo podrobnejše predstavo. Dovolj je to narediti za funkcijo  $\psi_D$ :

$$\langle x \rangle = \langle \psi_D | x | \psi_D \rangle = \langle \psi_D | x \psi_D \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi_S + \psi_A | x (\psi_S + \psi_A) \rangle$$

Tokrat upoštevajmo še simetričnost skalarnega produkta za realne funkcije, da bo manj pisanja:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2} [\langle \psi_S | x \psi_S \rangle + 2 \langle \psi_S | x \psi_A \rangle + \langle \psi_A | x \psi_A \rangle]$$

Skalarni produkt je v resnici integral, npr.:

$$\langle \psi_S | x \psi_A \rangle = \int_{-a/2}^{+a/2} x \psi_S \psi_A dx$$

V splošnem sta integracijski meji  $\pm\infty$ , vendar sta v našem primeru zunaj intervala  $(-a/2, +a/2)$  funkciji identično enaki nič, ker je tam potencial neskončen. Velja:

$$\langle \psi_S | x \psi_S \rangle = \int_{-a/2}^{+a/2} x \psi_S^2 dx = 0$$

$$\langle \psi_A | x \psi_A \rangle = \int_{-a/2}^{+a/2} x \psi_A^2 dx = 0$$

ker integriramo lihi funkciji. Torej:

$$\langle x \rangle = \langle \psi_S | x \psi_A \rangle = \int_{-a/2}^{+a/2} x \psi_S \psi_A dx$$

Zdaj je pod integralom soda funkcija (produkt dveh lih in ene sode), zato:

$$\langle x \rangle_D = 2 \int_0^{+a/2} x \psi_S \psi_A dx$$



Povprečna vrednost koordinate  $x$  za funkcijo  $\psi_D$  je torej pozitivna, kar pomeni, da se delec, ki ga funkcija opiše, nahaja pretežno v desni polovici jame (od tod oznaka za funkcijo). Podobno ugotovimo za funkcijo  $\psi_L$  za delec, ki je pretežno v levi polovici jame:  $\langle x \rangle_L = -\langle x \rangle_D$ .

Ostane nam še račun štirih elementov Hamiltonove matrike:

$$H_{11} = \langle \psi_D | \hat{H} | \psi_D \rangle = \langle \psi_D | \hat{H} \psi_D \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi_S + \psi_A | \hat{H} (\psi_S + \psi_A) \rangle$$

Upoštevajmo, da sta  $\psi_S$  in  $\psi_A$  lastni funkciji Hamiltoniana, potem pa še njuno ortonormiranost:

$$H_{11} = \frac{1}{2} \langle \psi_S + \psi_A | E_S \psi_S + E_A \psi_A \rangle = \frac{E_S + E_A}{2} = \bar{E}$$

Podobno ugotovimo za drugi diagonalni element matrike:

$$H_{22} = \langle \psi_L | \hat{H} | \psi_L \rangle = \frac{E_S + E_A}{2} = \bar{E}$$

Tudi elementa izven diagonale sta enaka, saj je  $H$  simetrična matrika:

$$H_{12} = \langle \psi_D | \hat{H} | \psi_L \rangle = H_{21} = \langle \psi_L | \hat{H} | \psi_D \rangle$$

Izračunajmo ju:

$$H_{12} = \frac{1}{2} \langle \psi_S - \psi_A | \hat{H} (\psi_S + \psi_A) \rangle$$

$$H_{12} = \frac{1}{2} \langle \psi_S - \psi_A | E_S \psi_S + E_A \psi_A \rangle = \frac{E_S - E_A}{2} = \frac{\Delta E}{2}$$

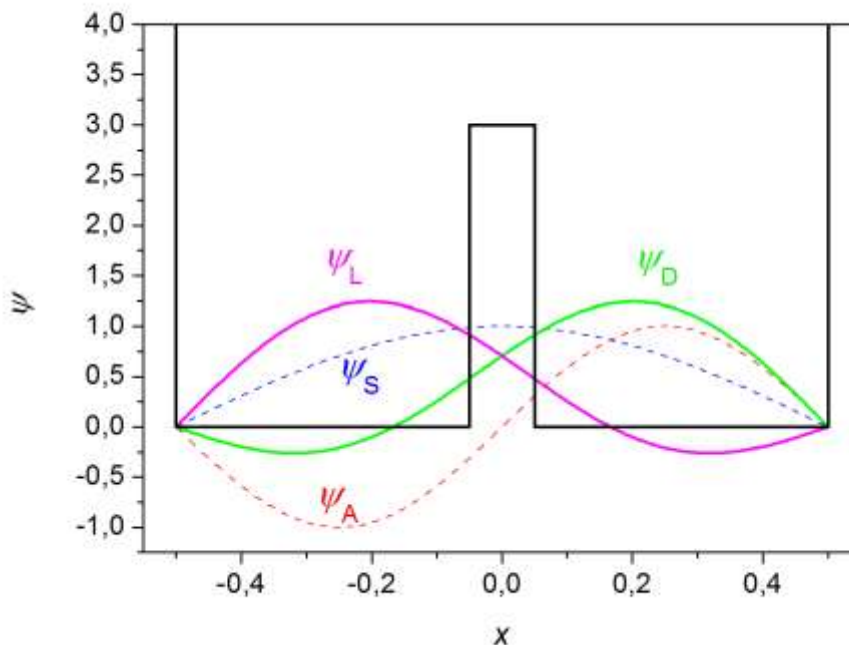
Zapišimo matriko eksplicitno:

$$H = \begin{bmatrix} \bar{E} & \frac{\Delta E}{2} \\ \frac{\Delta E}{2} & \bar{E} \end{bmatrix}$$

Nediagonalna elementa sta majhna v primerjavi z diagonalnima.

V zvezi s sliko dodajmo še par komentarjev. Ugotovili smo, da je »prekrivalni integral« funkcij  $\psi_D$  in  $\psi_L$  enak nič. Pojem je lahko rahlo zavajajoč, saj je na sliki R17 razvidno, da se funkciji delno prekrivata. Če pa upoštevamo tudi predznake produktov obeh funkcij na različnih mestih, so tako pozitivni kot negativni in se med seboj prispevki ravno izničijo.

Razvidno je tudi, kako je mogoče, da imata stanji s funkcijama  $\psi_S$  in  $\psi_A$  podobni vrednosti energije. Če ne bi bilo vmesne stopnice, bi imela funkcija  $\psi_A$  precej višjo energijo kot  $\psi_S$ , ker račun v preprosti neskončni 1D jami pokaže, da ima večjo kinetično energijo. Vendar moramo zdaj upoštevati tudi prispevek potencialne energije zaradi stopnice, ta pa je večji pri funkciji  $\psi_S$ , ker ima v območju stopnice precej večjo absolutno vrednost kot  $\psi_A$ .



**Slika R17:** Shematski prikaz 1D neskončne potencialne jame s potencialno stopnico na sredini in približnih valovnih funkcij  $\psi_S$  in  $\psi_A$  (črtkani barvni krivulji) ter  $\psi_D$  in  $\psi_L$  (črtkani barvni krivulji), ki jih konstruiramo kar iz sinusnih funkcij. Račun z valovno enačbo pokaže, da bi morale rešitve v območju stopnice sestaviti iz eksponentnih in ne sinusnih funkcij (vendar pa na oko ne bi videli kvalitativno bistvene razlike, le da bi se funkcije v območju stopnice znižale). ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.15

Igralno kocko opilimo tako, da se zmanjšajo ploskve s številkami od 2 do 5. Zato se poveča verjetnost za met enke in šestice:  $P_1 = P_6 = 20\%$ ,  $P_2 = P_3 = P_4 = P_5 = 15\%$ . Kocko vržemo dvakrat zaporedoma. Kolikšna je verjetnost, da bo vsota pik pri obeh metih enaka 7?

Od vseh mogočih izidov metov dobimo vsoto 7 samo pri teh:  $1 + 6$ ,  $6 + 1$ ,  $2 + 5$ ,  $5 + 2$ ,  $3 + 4$  in  $4 + 3$ . To so nezdružljivi dogodki, zato je celotna verjetnost za vsoto 7 enaka vsoti verjetnosti posameznih parov števil:  $P = 2P(1, 6) + 4P(2, 5)$ . Upoštevali smo že enakost verjetnosti za določene pare metov. Dva zaporedna meta kocke pa sta si med seboj neodvisna, zato je ustrezna verjetnost za par enaka produktu verjetnosti za posamezni številki: Torej:

$$P(\text{vsota } 7) = 2P_1P_6 + 4P_2P_5 = 2P_1^2 + 4P_2^2 = 17 \%.$$

Ta verjetnost je nekoliko večja kot pri nedeformirani kocki, kjer so vse številke enako verjetne:  $P_1 = \dots = P_6 = 1/6$ :

$$P(\text{vsota } 7) = 6P_1^2 = 6 \cdot (1/6)^2 = 1/6 \approx 16,67 \% \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.16

Hkrati vržemo  $N_{\text{kock}}$  kock ( $N_{\text{kock}} = 2, 3, 4, \dots$ ). Poiščite verjetnosti za različne vsote pik na vseh kockah.

Dokler imamo res zelo majhno število kock, npr. 2 ali 3, se da verjetnosti še nekako izračunati na pamet. Za več kock pa postane kombinatorni problem tako zapleten, da ga raje prepustimo računalniku. Tu si oglejmo, kako izračunamo na pamet verjetnosti za vsote pik na treh kockah. Najpreprosteje jih izračunamo kot kvocient pravih variacij in vseh mogočih variacij. Vseh variacij je  $6^3$ . Prave variacije za vsoto npr.  $S = 5$  pa so naslednje: 113, 131, 311, 122, 212 in 221. Šest jih je, torej je  $P(S = 5) = 6/6^3 = 1/36$ . Čim več je kock, tem več variacij številke da prave vrednosti za  $S$ . Spodaj je podana programska koda v Pascalu za primer 5 kock.

program kocke;

{ \$APPTYPE CONSOLE }

Uses SysUtils;

procedure delaj ;

var izhod : text ;

    i1, i2, i3, i4, i5, i6, i7, i8, i9, i10 : integer ;

    Nkock, Nmax, vsota : integer ;

    P : array[1..100] of longint ;

    Preal, Pmax, x : real ;

    pot6 : longint ;

begin

    Nkock := 5 ;

```

Nmax := 6*Nkock ;
Pmax := 0 ;
for i1 := (Nkock-1) to (Nmax+1) do P[i1] := 0 ;
pot6 := 1 ;
for i1 := 1 to Nkock do pot6 := 6*pot6 ;

for i1 := 1 to 6 do
for i2 := 1 to 6 do
for i3 := 1 to 6 do
for i4 := 1 to 6 do
for i5 := 1 to 6 do
begin
vsota := i1+i2+i3+i4+i5 ;
P[vsota] := P[vsota]+1
end ;

assign(izhod,'P.dat') ; rewrite(izhod) ;
for i1 := (Nkock-1) to (Nmax+1) do begin
Preal := 1.0*P[i1]/pot6 ;
if (Preal > Pmax) then Pmax := Preal ;
writeln(izhod, ' ', i1:3, ' ', Preal:8:5)
end ;
close(izhod) ;

assign(izhod, 'Pnorm.dat') ; rewrite(izhod) ;
for i1 := (Nkock-1) to (Nmax+1) do begin
x := 1.0*i1/Nkock ;

```

```

Preal := 1.0*P[i1]/(pot6*Pmax) ;
writeln(izhod, ' ', x:8:4, ' ', Preal:8:5)

end ;

close(izhod) ;

end ;

{ glavni program }

begin

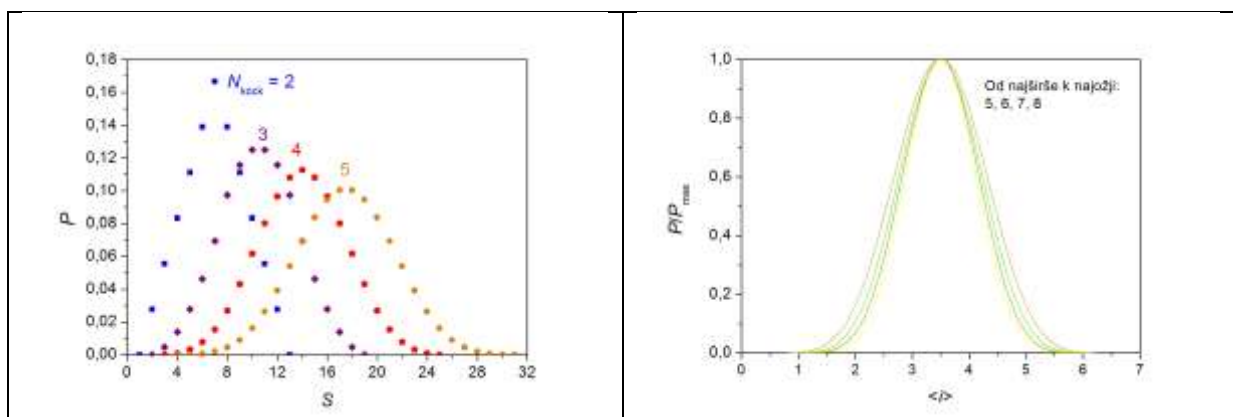
  { TODO -oUser -cConsole Main : Insert code here }

  delaj ;

end.

```

Poučni rezultati so prikazani na sliki R18. Čim večje je število kock, tem bolj grafi spominjajo na Gaussovo funkcijo. Tu opazimo nekak prehod iz diskretne v zvezno porazdelitev. Z večjim številom kock se največja mogoča vsota pik povečuje, zato se širi in hkrati nižja porazdelitvena funkcija. Za bolj neposredno primerjavo so na desni sliki še grafi drugače normaliziranih porazdelitev pri večjem številu kock, tako da je vrh pri  $P = 1$ , intervali na abscisni osi pa so deljeni s številom kock (tako da številka na tej osi ustreza povprečnemu številu pik na vseh kockah). Grafi so si podobni, le širine se spreminjajo; seveda to ni prava normalizacija verjetnostne porazdelitve.



**Slika R18:** Porazdelitvene funkcije za vsoto pik na več kockah. Edino pri dveh kockah imamo trikotno žagasto funkcijo, že pri treh pa porazdelitev spominja na normalno.

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.17

Na navpično vrstico obesimo kvadratno žično zanko s stranico  $a = 10$  cm in skupno maso  $m = 2$  kg, tako da je ravnina zanke navpična. Zanko sestavlja več ovojev žice, tako da po njej kroži skupni električni tok  $I = 5$  A. Zanka se nahaja v vodoravnem magnetnem polju z gostoto  $B = 1$  T. V ravnovesju kaže pravokotnica na zanko v isto smer kot magnetno polje. Če jo zasukamo za kot  $\varphi$  okrog navpične osi (torzijo vrvice zanemarimo), nanjo deluje navor  $M = -\mu B \sin \varphi$ , ki skuša zanko vrniti v ravnovesno lego. Magnetni moment zanke je  $\mu = IS = Ia^2$ . Pri računu njenega vztrajnostnega momenta pri vrtenju okrog navpične osi pa si mislimo, da je sestavljena iz 4 enakih tankih palic, dveh vodoravnih in dveh navpičnih. Kolikšen je nihajni čas zanke pri majhnih odmikih  $\varphi$ ?

Upoštevamo »Newtonov zakon« za vrtenje togega telesa:

$$J\alpha = M$$

$$2(J_1 + J_2)\ddot{\varphi} = -\mu B \sin \varphi$$

Vodoravni palici se vrtita okrog svojih težišč, zato ima vsaka vztrajnostni moment  $J_1 = (m/4)a^2/12 = ma^2/48$ . Pri navpičnih palicah je drugače: vse njune točke so (približno) enako oddaljene od navpične osi vrtenja, to je za  $a/2$ , zato je ustrezni vztrajnostni moment  $J_2 = (m/4)(a/2)^2 = ma^2/16$ . Nadaljujmo:

$$2\left(\frac{ma^2}{48} + \frac{ma^2}{16}\right)\ddot{\varphi} = -Ia^2 B \sin \varphi$$

$$\ddot{\varphi} = -\frac{6IB}{m} \sin \varphi \approx -\frac{6IB}{m} \varphi$$

Za majhne odmikne je to enačba za sinusno nihanje z nihajnim časom:

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{m}{6IB}} = 1,62 \text{ s} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.18

Poiščite čim enostavnejšo zvezo med kinetično energijo in tirnim magnetnim momentom ter med tirno vrtilno količino in tirnim magnetnim momentom delca s pozitivnim električnim nabojem  $e$  in maso  $m$ , ki kroži v homogenem magnetnem polju z gostoto  $B$  po krožnici s polmerom  $R$ .

Najprej poiščimo zvezo med  $B$ ,  $R$  in hitrostjo delca  $v$ , tako da poistovetimo magnetno silo na delec s centripetalno silo:

$$F_m = F_c$$

$$evB = \frac{mv^2}{R}$$

$$v = \frac{eBR}{m}$$

Potem izrazimo kinetično energijo  $E_k$ , vrtilno količino  $L$  in magnetni moment  $\mu$  s parametroma  $m$  in  $e$  ter spremenljivkama  $B$  in  $R$ :

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{e^2 B^2 R^2}{2m}$$

$$L = mRv = eBR^2$$

$$\mu = IS = \frac{e}{T} \cdot \pi R^2 = \frac{e}{2\pi R/v} \cdot \pi R^2 = \frac{evR}{2} = \frac{e^2 BR^2}{2m}$$

Zahtevani zvezi sta:

$$E_k = B\mu$$

$$L = \frac{2m}{e} \mu \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.19

Pri eni od različic Stern-Gerlachovega poskusa opazujemo razcep in navpični odklon curka atomov kalija v dva delna curka pri prehodu skozi nehomogeno magnetno polje zaradi spinske vrtilne količine in ustreznega magnetnega momenta najšibkeje vezanega elektrona v osnovnem stanju. Uplinjeni kalij segrevamo v pečici pri temperaturi  $1000^\circ\text{C}$  in atomi izhajajo iz pečice v vodoravni smeri skozi kratko območje nehomogenega magnetnega polja. Le-to kaže v navpični smeri, njegov gradient je  $10\text{ T/cm}$  v isti smeri. Območje gradienta polja je  $1\text{ cm}$  v vodoravni smeri (v smeri curka atomov). Delna curka priletita na  $1\text{ m}$  oddaljen zaslon ali sistem detektorjev. Za koliko sta v navpični smeri razmaknjeni točki, v katerih curka zadeneta zaslon? Atomska masa kalija je  $A = 39$ .

Spinski magnetni moment elektrona  $\mu$  je po velikosti enak Bohrovemu magnetonu:

$$\mu = \mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_e} = \frac{e_0 h}{4\pi m_e}$$

kjer je  $e_0 = 1,6 \cdot 10^{-19}$  A s osnovni naboj,  $h = 6,6 \cdot 10^{-34}$  J s Planckova konstanta,  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg pa masa elektrona. Pri tem smo zaokrožili faktor  $g_s$ , ki se pojavi v zvezi med spinsko vrtilno količino elektrona in magnetnim momentom, na vrednost 2. Kvantizirana komponenta magnetnega momenta (zaradi »spina«  $1/2$ ) v smeri osi  $z$  (smer magnetnega polja) je  $\mu_z = \pm \mu_B$ . Magnetna sila nehomogenega polja na magnetni moment je  $F_z = \mu_z \cdot (dB_z/dz)$ . Namesto parcialnega odvoda po koordinati  $z$  smo zapisali kar navadnega, ker se polje v danem območju spreminja le v smeri osi  $z$ . Zato je pospešek celotnega kalijevega atoma v navpični smeri enak:

$$a_z = \frac{F_z}{m} = \pm \frac{e_0 h}{4\pi m m_e} \cdot \frac{dB_z}{dz}$$

kjer je  $m$  masa kalijevega atoma. Kalijev atom prileti v območje nehomogenega magnetnega polja s hitrostjo  $v_0$ , ki jo aproksimiramo iz povprečne termične translacijske kinetične energije:

$$v_0 \approx \sqrt{\frac{3kT}{m}}$$

Boltzmannova konstanta je  $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$  J/K, masa atoma pa je:  $m = Am_1$ , atomska masna enota pa je približno  $m_1 = 1 \text{ kg}/N_A$ , kjer je  $N_A = 6 \cdot 10^{26}/\text{kmol}$  Avogadrovo število. Širina območja nehomogenega polja je  $x$ , atomi pa je preletijo v času  $t = x/v_0$ . V tem času pridobijo zaradi pospeška navpično komponento hitrosti:

$$v_z = a_z t = \pm \frac{e_0 h}{4\pi m m_e} \cdot \frac{dB_z}{dz} \cdot \frac{x}{v_0}$$

Ko atomi zapustijo majhno območje nehomogenega polja, so njihovi tiri od vodoravnice odklonjeni za kot  $\pm\varphi$ , za katerega velja:

$$\tan|\varphi| = \frac{|v_z|}{v_0} = \frac{e_0 h}{4\pi m m_e} \cdot \frac{dB_z}{dz} \cdot \frac{x}{v_0^2}$$

Zanimivo je to, da ko vstavimo v izraz za kot kvadrat začetne hitrosti, se krajša masa atomov, tako da je v računu sploh ne potrebujemo:

$$\tan|\varphi| = \frac{|v_z|}{v_0} = \frac{e_0 h x}{12\pi m_e k T} \cdot \frac{dB_z}{dz}$$

Na  $X = 1$  m oddaljenem zaslonu sta mesti naleta delnih curkov atomov oddaljeni za:



$$Z = 2X \tan|\varphi| = \frac{e_0 h x X}{6\pi m_e k T} \cdot \frac{dB_z}{dz} = 4,5 \text{ mm}$$

Dobro je poskrbeti, da v curku ni ioniziranih kalijeveh atomov, ali pa jih je čim manj (pri njih manjka najmanj vezani elektron, tako da imajo ioni pozitivni osnovni naboj). Odklon nabitih delcev zaradi direktne magnetne sile v značilnih magnetnih poljih je namreč neprimerno večji kot odklon zaradi magnetnega dipolnega momenta v nehomogenem polju. Razen tega se odklonijo v smeri, pravokotno na magnetno polje in ne vzporedno z njim. Takšni odkloni »kvarijo« poskus. Naj bo npr. povprečna (efektivna) gostota sicer nehomogenega magnetnega polja v našem primeru 1 T. Polmer kroženja iona v tem polju izračunamo tedaj iz enakosti magnetne in centripetalne sile:  $F_m = F_c \rightarrow e_0 v_0 B_z = m v_0^2 / R \rightarrow R = m v_0 / (e_0 B_z)$ . Stranica  $x$  magnetnega območja je enaka tetivi ustreznega krožnega loka, zato velja za odklonski kot iona:

$$\sin \varphi = \frac{x}{R} = \frac{x e_0 B_z}{m v_0}$$

Predpostavimo, da je tetiva  $x$  dovolj kratka, da je kot  $\varphi$  majhen in je njegov sinus približno enak tangensu. Tedaj je razmerje tangensov kota odklona iona in odklona atoma od prvotne smeri enako:

$$\frac{\tan \varphi_{\text{ion}}}{\tan \varphi_{\text{atom}}} = \frac{4\pi m_e v_0 B_z}{h dB_z / dz} = \frac{4\pi m_e \sqrt{3kT/m} \cdot B_z}{h dB_z / dz} = 1,4 \cdot 10^4 \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.20

Spodaj zapisane Paulijeve spinske matrike  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  in  $\sigma_z$ , ki jih uporabljamo npr. v kvantni mehaniki pri delcih s spinom  $1/2$ , so matrike  $2 \times 2$ . Izračunajte njihove lastne vrednosti, sled, determinanto ter medsebojne produkte.

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

V drugi matriki je  $i$  imaginarna osnova.

Vse tri Paulijeve matrike imajo enaki lastni vrednosti:  $\lambda_1 = +1$  in  $\lambda_2 = -1$ . Dokažimo to eksplicitno za eno od njih:

$$\det(\sigma_x - \lambda I) = \det \begin{bmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{bmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0 \rightarrow \lambda_{1,2} = \pm 1$$

Poiščimo še ustrezna lastna vektorja za to matriko:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = 1 \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow x = y$$

Normalizirani lastni vektor za lastno vrednost  $+1$  je torej:  $\mathbf{x}^1 = (x, y) = (1/2^{1/2}, 1/2^{1/2})$ .  
Podobno:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = -1 \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \end{bmatrix} \rightarrow x = -y$$

Normalizirani lastni vektor za lastno vrednost  $-1$  je torej:  $\mathbf{x}^2 = (x, y) = (1/2^{1/2}, -1/2^{1/2})$ .  
Vektorja  $\mathbf{x}^1$  in  $\mathbf{x}^2$  sta si med seboj pravokotna, kot tudi morata biti, ker pripadata različnim lastnim vrednostima hermitske (simetrične) matrike. Za hermitsko matriko  $A$  velja:  $A^T = A^*$  ali: transponirana matrika je enaka kompleksno konjugirani matriki. Transponirano matriko dobimo, če izven-diagonalne elemente simetrično zamenjamo prek diagonale:  $(A^T)_{ij} = A_{ji}$ . Če ima matrika same realne elemente, kot velja npr. za matriki  $\sigma_x$  in  $\sigma_z$ , je pogoj za hermitskost preprostejši:  $A^T = A$ .

Previdnejši moramo biti pri kompleksni matriki  $\sigma_y$ :

$$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = 1 \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -iy \\ ix \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow y = ix$$

Normalizirani lastni vektor za lastno vrednost  $+1$  je pri tej matriki:  $\mathbf{x}^1 = (x, y) = (1/2^{1/2}, i/2^{1/2})$ .  
Podobno:

$$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = -1 \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -iy \\ ix \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \end{bmatrix} \rightarrow y = -ix$$

Normalizirani lastni vektor za lastno vrednost  $-1$  je torej:  $\mathbf{x}^2 = (x, y) = (1/2^{1/2}, -i/2^{1/2})$ .  
Vektorja  $\mathbf{x}^1$  in  $\mathbf{x}^2$  tudi za to matriko sta si med seboj pravokotna. Vendar pa moramo skalarni (hermitski) produkt dveh kompleksnih vektorjev računati malo drugače kot za realne vektorje. V našem primeru:  $\mathbf{x}^1 \cdot \mathbf{x}^2 = (x^1)_1(x^2)_1^* + (x^1)_2(x^2)_2^* = 1/2^{1/2} \cdot 1/2^{1/2} + i/2^{1/2} \cdot i/2^{1/2} = 1/2 - 1/2 = 0$ . Narobe bi bilo pri drugem vektorju vzeti drugo komponento  $-i/2$  pri računu kompleksnega skalarnega produkta.

Lastna vektorja za matriko  $\sigma_z$ , ki je diagonalna, sta preprosta:  $\mathbf{x}^1 = (1, 0)$ ,  $\mathbf{x}^2 = (0, 1)$ .

Ker imajo vse tri matrike lastni vrednosti  $\pm 1$ , sta za vse enaki tudi njihova sled in determinanta:  $\text{sl}(\sigma_i) = \lambda_1 + \lambda_2 = 0$ ,  $\det(\sigma_i) = \lambda_1 \cdot \lambda_2 = -1$ ,  $i = x$  ali  $y$  ali  $z$ .

Kvadrat vsake od treh matrik je enotska matrika. Na primer:

$$\sigma_x^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Zmnožimo še različne matrike med seboj. Na primer:

$$\sigma_x \cdot \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} = i\sigma_z$$

Produkt teh matrik je antikomunitativen, kar pomeni, da se produktu spremeni predznak, če vrstni red faktorjev zamenjamo:

$$\sigma_y \cdot \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} = -i\sigma_z$$

Podobno velja:  $\sigma_y \cdot \sigma_z = -\sigma_z \cdot \sigma_y = i\sigma_x$  in  $\sigma_z \cdot \sigma_x = -\sigma_x \cdot \sigma_z = i\sigma_y$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 3.21

Dve različni kvantni stanji v dvonivojskem sistemu, ki sta povezani s kubiti, opišemo z naslednjima vektorjema v Hilbertovem prostoru:

$$|\psi_1\rangle = \cos \frac{\theta_1}{2} |0\rangle + \exp(i\phi_1) \sin \frac{\theta_1}{2} |1\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = \cos \frac{\theta_2}{2} |0\rangle + \exp(i\phi_2) \sin \frac{\theta_2}{2} |1\rangle$$

Pri tem sta  $|0\rangle$  in  $|1\rangle$  ortonormirani stacionarni stanji. Izrazite oba hermitsko skalarna produkta teh stanj. Zapišite pogoj za pravokotnost teh vektorjev.

Ker velja  $\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1$  in  $\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$ , sta skalarna produkta zgoraj zapisanih vektorjev:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} + \exp(i\Delta\phi) \sin \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2}$$

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \cos \frac{\theta_2}{2} \cos \frac{\theta_1}{2} + \exp(-i\Delta\phi) \sin \frac{\theta_2}{2} \sin \frac{\theta_1}{2}$$

kjer je razlika faz  $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$ . Da je skalarni produkt v obeh primerih enak nič, morata biti enaki nič posebej realni in imaginarni komponenti. Edina možnost, da je imaginarna komponenta enaka nič, je v našem primeru  $\Delta\phi = 0$  ali mnogokratnik  $\pi$ ; izberimo  $\Delta\phi = 0$ . Oba skalarna produkta sta tedaj realna in da bosta enaka nič, mora veljati:

$$\cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} + \sin \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} \equiv \cos \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} = 0 \rightarrow \theta_1 - \theta_2 = (2k + 1)\pi$$

kjer je  $k$  poljubno celo število, izberimo si  $k = 0$ . Torej naj za sedaj velja:  $\phi_2 = \phi_1$ ,  $\theta_2 = \theta_1 + \pi$ .

Poudarimo pa še, da lahko kot  $\phi$  definiramo po modulu  $2\pi$  zaradi periodičnosti eksponentne funkcije z imaginarnim eksponentom. Ker je v opisu kubitov kot argument sinusne in kosinusne funkcije polovični kot  $\theta$ , ga lahko v osnovi definiramo po modulu  $4\pi$ . Vendar če izvedemo transformacijo  $\theta \rightarrow 2\pi + \theta$ , obe kotni funkciji spremenita predznak. To pomeni, da pri tej transformaciji celoten vektor (ali valovna funkcija) samo spremeni predznak, kar pa je ekvivalentno fizikalno stanje. Zato zadostuje, da polarni kot  $\theta$  omejimo na polovični interval  $(0, 2\pi)$ . Če pa naredimo še eno transformacijo,  $\phi \rightarrow \phi + \pi$  in hkrati  $\theta \rightarrow 2\pi - \theta$ , ugotovimo naslednje: kosinusna funkcija v enačbi stanja spremeni predznak, sinusna pa ne; spremeni pa predznak tudi eksponentna funkcija pri sinusnem členu. To pomeni, da pri tej transformaciji celoten vektor spet samo spremeni predznak. Zato lahko kot  $\theta$  še bolj omejimo:  $0 \leq \theta \leq \pi$ . To je dokaz, da nam za prikaz kubitov zadostuje Blochova sfera, kjer je vsaka točka enolično določena s kotoma v omenjenih intervalih. V zvezi z našim problemom pravokotnosti dveh vektorjev pa ugotovimo še nekaj: ustrezata jima diametralni točki Blochove sfere. Ker pa hočemo kot  $\theta$  omejiti na interval  $(0, \pi)$ , bomo za kota drugega vektorja namesto vrednosti  $\phi_2 = \phi_1$ ,  $\theta_2 = \theta_1 + \pi$  raje izbrali primernejši par. Bodimo konkretni in vzemimo primer, ko sta kota prvega vektorja ostra:  $0 < \phi_1, \theta_1 < \pi/2$ . Tedaj bi za par kotov drugega vektorja veljalo:  $0 < \phi_2 < \pi/2, \pi < \theta_2 < 3\pi/2$ . Transformirajmo ju po zgoraj omenjeni transformaciji:  $\phi_2 \rightarrow \phi_2 + \pi$  in hkrati  $\theta_2 \rightarrow 2\pi - \theta_2$ , tako da bo za nov par kotov veljalo:  $\pi < \phi_2 < 3\pi/2, \pi/2 < \theta_2 < \pi$ . Zdaj sta oba kota v pravem intervalu, zato ju eksplicitno izrazimo s kotoma prvega vektorja še enkrat:  $\phi_2 = \phi_1 + \pi$ ,  $\theta_2 = \pi - \theta_1$ . ♠

## 4 KVANTNO RAČUNANJE

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.1

V fiziki pogosto definiramo matriko – tenzor drugega reda kot tenzorski produkt dveh vektorjev. Če sta vektorja  $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$  in  $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ , je ta matrika  $C = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$ , njeni elementi pa so:  $C_{ij} = a_i b_j$ . Z besedami: element  $i$ -te vrstice in  $j$ -tega stolpca te matrike je produkt  $i$ -te komponente prvega vektorja in  $j$ -te komponente drugega vektorja. Pokažite, da se pri rotaciji koordinatnega sistema ta matrika transformira pravilno:  $C' = TCT^{-1}$ , če se vektorja transformirata kot  $\mathbf{a}' = T\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}' = T\mathbf{b}$ . Opišite glavne značilnosti matrike.

Pravilna transformacija matrike pomeni:  $T(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})T^{-1} = (T\mathbf{a}) \otimes (T\mathbf{b})$ . Z besedami: tenzorski produkt že transformiranih vektorjev mora ustrezati transformirani matriki, če jo najprej izračunamo iz prvotnih vektorjev.

Dokaz bo lepa vaja z računanjem in seštevanjem členov po indeksih, kar je značilno za algebro, ki se ukvarja z vektorji in matrikami. Pred rešitvijo naše naloge pa si še enkrat oglejmo značilno transformacijsko (rotacijsko) matriko:

$$T = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Takšne matrike imajo še neko matematično značilnost, ki pride v poštev pri dokazovanju raznih pravil pri računanju z njimi. Če vzamemo poljubno vrstico matrike  $T$  in si jo mislimo kot vektor, potem je skalarni produkt dveh različnih vrstic enak nič. Vzemimo na primer prvo in drugo vrstico:  $(\cos \varphi) \cdot (-\sin \varphi) + (\sin \varphi) \cdot (\cos \varphi) + 0 \cdot 0 = 0$ . Skalarni produkt vrstice same s seboj pa je enak 1. Enako ugotovimo, če za vektorje vzamemo stolpce matrike namesto vrstic; na primer, skalarni produkt prvega stolpca z drugim je nič. Pravimo, da so vrstice in stolpci te preproste rotacijske matrike ortonormalni.

Ker lahko poljubno rotacijsko matriko (poljubna os v prostoru) izračunamo kot produkt več takih preprostejših matrik za zasuk okrog ene od koordinatnih osi, potem velja zgoraj opisano pravilo tudi za poljubno rotacijsko in s tem tudi transformacijsko matriko. Dokazati moramo torej, da če imata matriki  $A$  in  $B$  takšno lastnost, velja to tudi za njun produkt  $C = AB$ .

Pri tej nalogi pa se bomo naučili uporabljati še Einsteinovo konvencijo za seštevanje po indeksih. Če se v nekem izrazu oznaka nekega indeksa ponovi dvakrat, pomeni to, da

seštevamo po tem indeksu in ni treba pisati znaka za vsoto. S tem poenostavimo zapis, na primer:

$$A_{ik}B_{kj} \equiv \sum_{k=1}^3 A_{ik}B_{kj}$$

Izraz, ki smo ga vzeli za zgled, ustreza množenju matrik  $A$  in  $B$  – to je ravno element  $C_{ij}$ . Zdaj pa privzemimo matriki  $A$  in  $B$ , katerih vrstice in stolpci so ortonormalni. Dokažimo, da enako velja za njun produkt. Pisali bomo z Einsteinovo konvencijo, bralcu pa priporočamo, da prvič za vajo prepíše dokaz v polni obliki, z uporabo znaka  $\sum$ , tudi zato, da se pri izpeljavi ne izgubi. Preverimo torej skalarni produkt  $i$ -te in  $j$ -te vrstice matrike  $C$  (skalarni produkt označimo z  $s$ ):

$$s = C_{i1}C_{j1} + C_{i2}C_{j2} + C_{i3}C_{j3} \equiv C_{ik}C_{jk} = (AB)_{ik}(AB)_{jk}$$

$$s = (A_{il}B_{lk})(A_{jm}B_{mk})$$

Pozor: ko uvedemo »seštevalni« indeks pri množenju matrik, moramo paziti, da označimo indeks prvem produktu (indeks  $l$ ) drugače kot v drugem produktu (indeks  $m$ ), saj indeksa tečeta neodvisno eden od drugega. V nasprotnem primeru bi dobili napačen rezultat. Preden nadaljujemo, premislimo, kaj smo dobili v zadnjem izrazu za skalarni produkt  $s$ . Indeksa  $i$  in  $j$  sta poljubna, seštevamo pa po indeksih  $k$ ,  $l$  in  $m$ , torej gre za trojno vsoto: 27 členov, ker gre vsak od »seštevalnih« indeksov od 1 do 3. Vseeno je, kako razvrstimo to seštevanje, zato preuredimo člene na za naš namen najprimernejši način:

$$s = (A_{il}A_{jm})(B_{lk}B_{mk})$$

Zdaj pa glavni trik: Ker se pojavi seštevalni indeks  $k$  samo v drugem oklepaju, kjer sta elementa matrike  $B$ , lahko najprej v drugem oklepaju izračunamo vsoto po indeksu  $k$ . To pa je ravno skalarni produkt  $l$ -te in  $m$ -te vrstice matrike  $B$ , ki je enak nič, če sta indeksa  $l$  in  $m$  različna, za  $l = m$  pa je enak  $1$ . Tako lahko v celotnem izrazu za  $s$  obdržimo samo prvi oklepaj z elementoma matrike  $A$ , pa še izenačimo  $l$  in  $m$ :

$$s = A_{im}A_{jm}$$

To pa je skalarni produkt  $i$ -te in  $j$ -te vrstice matrike  $A$ , ki je  $1$  za  $i = j$ , sicer pa nič. Dokaz je končan.

Za dober logični trening in za naslednje podobne primere bomo dokaz ponovili v še bolj strnjeni obliki, tako da uvedemo Kroneckerjev simbol  $\delta_{ij}$ , za katerega velja  $\delta_{ii} = 1$  in  $\delta_{ij} = 0$  za  $i \neq j$ . V bistvu Kroneckerjev simbol predstavlja elemente enotske matrike. Strnjeno torej izpeljemo skalarni produkt dveh vrstic matrike  $C$  tako:

$$s = C_{ik}C_{jk} = (AB)_{ik}(AB)_{jk} = (A_{il}B_{lk})(A_{jm}B_{mk}) = (A_{il}A_{jm})(B_{lk}B_{mk}) = (A_{il}A_{jm})\delta_{lm} = A_{im}A_{jm} = \delta_{ij}$$

Ortonormalnosti vrstic in stolpcev transformacijske matrike sicer ne bomo neposredno potrebovali pri dokazu, ki ga zahteva naša naloga, je pa ta lastnost povezana z zahtevo, da je inverzna matrika matrike  $T$  kar enaka transponirani matriki.

Zdaj pa naprej k dokazu  $T(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})T^{-1} = (T\mathbf{a}) \otimes (T\mathbf{b})$ , če ima matrika  $T$  lastnost ortonormalnosti vrstic in stolpcev. Uporabili bomo omenjeni jedrnati zapis, ki bo od bralca zahteval veliko zbranosti. Uporabili bomo tudi formulo za množenje treh matrik hkrati:  $(ABC)_{ij} = A_{ik}B_{kl}C_{lj}$ , ki pa naj jo bralec sam dokaže tako, da npr. najprej zmnoži matriki  $A$  in  $B$ , njun produkt pa še z matriko  $C$ . Pa še to, da je inverzna matrika matrike  $T$  kar njena transponirana matrika  $\rightarrow (T^{-1})_{ij} = (T^T)_{ij} = T_{ji}$ .

Pripravljeni smo. Izrazimo v polni obliki (z uporabo indeksov) matriko na levi strani zahtevane enačbe:

$$[T(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})T^{-1}]_{ij} = T_{ik}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})_{kl}(T^{-1})_{lj} = T_{ik}a_k b_l T_{jl} = T_{ik}T_{jl}a_k b_l$$

Desna stran je:

$$[(T\mathbf{a}) \otimes (T\mathbf{b})]_{ij} = (T\mathbf{a})_i (T\mathbf{b})_j = (T_{ik}a_k)(T_{jl}b_l) = T_{ik}T_{jl}a_k b_l$$

Končano. Tenzorski produkt dveh vektorjev je res tenzor, kot se spodobi. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.2

Tenzorski ureditveni parameter  $Q$  v teoriji nematičnih tekočih kristalov (NTK) je matrika  $3 \times 3$ , ki jo zgradimo z uporabo tenzorskega produkta vektorjev. Smer posamezne podolgovate molekule NTK opišemo z enotskim vektorjem  $S$ . Čim večji je orientacijski red NTK, tem bolj so vektorji različnih molekul  $S$  poravnani v isto smer. Tenzor  $Q$  je definiran takole:  $Q_{ij} = [3\langle S_i S_j \rangle - \delta_{ij}]/2$ , kjer pomeni  $\langle \dots \rangle$  statistično povprečje po množici molekul. Kroneckerjev simbol  $\delta_{ij}$  pomeni vrednost 1, če sta njegova indeksa enaka, drugače pa vrednost 0. Zapišite tenzor  $Q$  še s tenzorskim produktom in v polni matrični obliki. Analizirajte nekaj stopenj urejenosti: od 3D popolne (izotropne) neurejenosti, prek 2D neurejenosti (kjer ležijo smeri  $S$  samo v eni ravnini, a so povsem neurejene), do popolne urejenosti. V vsakem od teh treh primerov poiščite lastne vrednosti tenzorja, zvezo med njimi in interval njihovih vrednosti.

Ureditveni parameter v tenzorski obliki je:

$$Q = \frac{1}{2}(3 \langle \bar{S} \otimes \bar{S} \rangle - I)$$

To pomeni, da v prvem členu vektor  $S$  posamezne molekule tenzorsko pomnožimo samega s seboj, potem pa naredimo statistično povprečje. Drugi člen je enotska matrika. V polni matrični obliki  $Q$  zapišemo kot:

$$Q = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 3 \langle S_x^2 \rangle - 1 & 3 \langle S_x S_y \rangle & 3 \langle S_x S_z \rangle \\ 3 \langle S_x S_y \rangle & 3 \langle S_y^2 \rangle - 1 & 3 \langle S_y S_z \rangle \\ 3 \langle S_x S_z \rangle & 3 \langle S_y S_z \rangle & 3 \langle S_z^2 \rangle - 1 \end{bmatrix}$$

Poglejmo najprej popolno 3D izotropnost smeri vektorjev  $S$ . Ker v vsakem primeru velja  $S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 1$ , velja ta enačba tudi za vsoto povprečij, ker pa so vse tri smeri ekvivalentne, so vsa tri povprečja kvadratov komponent enaka po eno tretjino:  $\langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = \langle S_z^2 \rangle = 1/3$ . Različni komponenti pa nista korelirani, to je, povprečje npr.  $\langle S_x S_y \rangle = 0$ . Zato so vsi elementi tenzorja  $Q$  enaki nič in prav tako vse tri lastne vrednosti. Kot drugi primer vzemimo vektorje  $S$ , ki ležijo popolnoma neurejeno v ravnini  $(x, y)$ , torej nimajo komponente v smeri osi  $z$ . Hkrati velja v dveh dimenzijah podobno kot prej v treh:  $\langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = 1/2$ . Tudi zdaj različni komponenti nista korelirani, tako da je tenzor diagonalen:

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Diagonalni elementi matrike so tudi njene lastne vrednosti, njihova vsota oziroma sled matrike pa je nič. V primeru največje urejenosti sistema vzamemo  $S = (1, 0, 0)$ , kar seveda velja tudi za statistično povprečje. Tedaj je tenzor:

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

Izkaže se, da je v vsakem primeru vsota lastnih vrednosti tenzorja enaka nič, interval mogočih vrednosti pa je  $-1/2 \leq \lambda_i \leq 1$ . Za podkrepitev te trditve, ki se sicer da strogo matematično dokazati, si oglejmo še en poučen zgled. Najprej se spomnimo, da je vedno mogoče izbrati takšen koordinatni sistem, da je v njem matrika diagonalna. Torej vzemimo spet ravninski zgled, ki pa je delno urejen, tako da velja  $\langle S_x^2 \rangle = 2/3$ ,  $\langle S_y^2 \rangle = 1/3$ ,  $\langle S_z^2 \rangle = 0$ . Tenzor je v tem primeru enak:



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

Vse tri lastne vrednosti se zdaj kar najbolj razlikujejo med seboj. Pravimo, da ima sistem maksimalno dvoosnost (biaksialnost). ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.3

Kaj pomeni produkt  $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \otimes \mathbf{d})$ ? Pri tem so  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  in  $\mathbf{d}$  tridimenzionalni fizikalni vektorji. Oba tenzorska produkta sta matriki  $3 \times 3$ , s piko pa smo označili navaden produkt matrik.

Označimo matriki tenzorskega produkta vektorjev:  $M = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$ ,  $N = \mathbf{c} \otimes \mathbf{d}$ , njun produkt pa je  $P = M \cdot N$ . Če so komponente vektorjev  $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ ,  $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ ,  $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$  in  $\mathbf{d} = (d_1, d_2, d_3)$ , je matrično množenje na dolgo:

$$P = M \cdot N \rightarrow \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & a_1 b_3 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & a_2 b_3 \\ a_3 b_1 & a_3 b_2 & a_3 b_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 d_1 & c_1 d_2 & c_1 d_3 \\ c_2 d_1 & c_2 d_2 & c_2 d_3 \\ c_3 d_1 & c_3 d_2 & c_3 d_3 \end{bmatrix}$$

Kot primer na dolgo zapišimo enega od elementov matrike  $P$ :  $P_{11} = a_1 b_1 c_1 d_1 + a_1 b_2 c_2 d_1 + a_1 b_3 c_3 d_1 = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) a_1 d_1$ . V oklepaju je skalarni produkt vektorjev  $\mathbf{b}$  in  $\mathbf{c}$ . Podobno ugotovimo za splošni element matrike  $P$ :  $P_{ij} = M_{ik} N_{kj}$  (pozor: konvencija seštevanja po indeksu  $k$  od 1 do 3!). Nadaljujmo:

$$P_{ij} = a_i b_k c_k d_j = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) a_i d_j.$$

Zapišimo to zvezo jedrnato:  $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \otimes \mathbf{d}) = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \mathbf{a} \otimes \mathbf{d}$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.4

Normirani stanji nekega spinskega sistema s spinom  $\frac{1}{2}$  sta  $|\psi_1\rangle = (a_1, b_1)$  in  $|\psi_2\rangle = (a_2, b_2)$ , kjer so komponente vektorjev v splošnem kompleksna števila. Izrazite tenzorski produkt obeh vektorjev na dva načina, kot matriko  $2 \times 2$  in kot vektor s 4 komponentami. Kakšna je zveza med 2D matriko in 4D vektorjem? Kolikšna je velikost vektorja?

Tenzorski produkt kot matrika je enak:

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \begin{bmatrix} a_1 a_2 & a_1 b_2 \\ b_1 a_2 & b_1 b_2 \end{bmatrix}$$

Tenzorski produkt kot vektor – stolpec je:

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \begin{bmatrix} a_1 a_2 \\ a_1 b_2 \\ b_1 a_2 \\ b_1 b_2 \end{bmatrix}$$

Dobimo ga tako, da vzamemo zaporedne vrstice matrice in jih prepisemo v stolpce (to velja v splošnem, ne le za 2D). Nov vektor označimo s  $|\psi\rangle$  in izračunajmo njegovo velikost:

$$\|\psi\rangle^2 = \langle\psi|\psi\rangle = [a_1^* a_2^* \quad a_1^* b_2^* \quad b_1^* a_2^* \quad b_1^* b_2^*] \cdot \begin{bmatrix} a_1 a_2 \\ a_1 b_2 \\ b_1 a_2 \\ b_1 b_2 \end{bmatrix}$$

$$\|\psi\rangle^2 = |a_1|^2 |a_2|^2 + |a_1|^2 |b_2|^2 + |b_1|^2 |a_2|^2 + |b_1|^2 |b_2|^2$$

Združimo člene po parih in upoštevamo normiranost vektorjev  $|\psi_1\rangle$  in  $|\psi_2\rangle$ :

$$\|\psi\rangle^2 = |a_1|^2 \|\psi_2\rangle^2 + |b_1|^2 \|\psi_2\rangle^2 = |a_1|^2 + |b_1|^2 = \|\psi_1\rangle^2 = 1$$

Torej je tudi tenzorski produkt normiranih vektorjev normiran. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.5

Kako delujejo tenzorji višjega ranga, smo dobili prvi vtis pri računskem zgledu 3.11, kjer smo z antisimetričnim tenzorjem tretjega ranga  $\varepsilon$  delovali na dva vektorja:  $c_i = \varepsilon_{ijk} a_j b_k$  (vsota po  $j$  in  $k$ ). Če pa si namesto vektorjev  $a$  in  $b$  mislimo matriko kot njun tenzorski produkt, ugotovimo naslednje: tenzor ranga tri krat tenzor ranga dva je vektor. Zato lahko zgornjo formulo za vektorski produkt takoj posplošimo. Naj bo  $T$  tenzor tretjega ranga,  $M$  matrika (tenzor drugega ranga),  $\mathbf{v}$  pa vektor (tenzor ranga 1). Tedaj velja:  $\mathbf{v} = TM \rightarrow v_i = T_{ijk} M_{jk}$ . Kaj torej dobimo z naslednjim množenjem:  $\mathbf{v} = (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c}) \cdot (\mathbf{d} \otimes \mathbf{e})$ ?

Ker je zdaj dolgi zapis z matrikami preneroden (razen tega pa tenzor tretjega ranga težko nazorno prikažemo na papirju), bomo delali z indeksi in upoštevali konvencijo seštevanja po indeksu, ki se pojavi dvakrat:

$$v_i = (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c})_{ijk} \cdot (\mathbf{d} \otimes \mathbf{e})_{jk} = a_i b_j c_k d_j e_k = a_i (b_j d_j) (c_k e_k) = a_i (\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) (\mathbf{c} \cdot \mathbf{e})$$

Zapišimo zadnjo zvezo v kompaktni vektorski obliki:  $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c}) \cdot (\mathbf{d} \otimes \mathbf{e}) = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{e})\mathbf{a}$ . V zadnjih dveh oklepajih je navadni skalarni produkt vektorjev  $\mathbf{b}$  in  $\mathbf{d}$  ter  $\mathbf{c}$  in  $\mathbf{e}$ . Ker je le-ta simetričen na zamenjavo vrstnega reda vektorjev, lahko nekatere faktorje v kombiniranem tenzorskem produktu zamenjamo, npr.  $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{d} \otimes \mathbf{c}) \cdot (\mathbf{b} \otimes \mathbf{e}) = (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c}) \cdot (\mathbf{d} \otimes \mathbf{e})$ . ♠

#### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.6

Vzemimo matriki  $A$  in  $B$  ter njun Kroneckerjev produkt, ki je spet matrika  $C$ .  $A$  naj ima  $m$  vrstic in  $n$  stolpcev,  $B$  pa  $p$  vrstic in  $q$  stolpcev. Tedaj zapišemo  $C$  v napol kompaktni obliki takole:

$$C = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & A_{13}B \\ A_{21}B & A_{22}B & A_{23}B \\ A_{31}B & A_{32}B & A_{33}B \end{bmatrix}$$

Zaradi konkretnega prikaza smo vzemi za  $A$  matriko  $3 \times 3$ , vendar še naprej smatramo splošnost dimenzij  $m$  in  $n$ . Izrazite matrični element  $C_{ij}$  direktno z matričnima elementoma matrik  $A$  in  $B$ .

Velja  $C_{ij} = A_{ab}B_{cd}$ , indeksi matričnih elementov matrik  $A$  in  $B$  pa so določeni z indeksoma  $i$  in  $j$  ter dimenzijama matrike  $B$  takole:

- indeks  $a$ : če je indeks  $i$  deljiv s  $p$ , potem  $a = i \operatorname{div} p$ , sicer  $a = i \operatorname{div} p + 1$ ;
- indeks  $b$ : če je indeks  $j$  deljiv s  $q$ , potem  $b = i \operatorname{div} q$ , sicer  $b = j \operatorname{div} q + 1$ ;
- indeks  $c$ : če je indeks  $i$  deljiv s  $p$ , potem  $c = p$ , sicer  $c = i \operatorname{mod} p$ ;
- indeks  $d$ : če je indeks  $j$  deljiv s  $q$ , potem  $d = q$ , sicer  $d = j \operatorname{mod} q$ . ♠

#### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.7

Zapišite, kaj naredi operator  $\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z$  (tenzorski produkt Paulijevih matrik) na vseh 8 baznih tenzorskih produktih  $s_{z1} \otimes s_{z2} \otimes s_{z3}$  posameznih spinskih stanj ( $s = 1/2$ ). Kaj so lastne vrednosti in lastna stanja operatorja?

Napišimo najprej operacije obeh matrik nad enim spinom:

$$\sigma_x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$

$$\sigma_x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

Tu nam grede predznaka stanja ni vseeno, ker iščemo tudi lastne vrednosti. Delovanje tenzorskega produkta opišemo z 8 enačbami:

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle = -|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle = -|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = -|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle = -|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$$

Nobeno od baznih stanj ni lastno stanje, saj operator  $\sigma_x$  vedno obrne spin. Lastno stanje operatorja  $\sigma_x$  je simetrična ali antisimetrična kombinacija spinov »gor« in »dol«:

$$\sigma_x \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \right] = +1 \cdot \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \right]$$

$$\sigma_x \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \right] = -1 \cdot \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \right]$$

Lastni vrednosti sta  $\pm 1$ , kar smo ugotovili že pri računskem zgledu 3.19. Tudi pri tenzorskem produktu Paulijevih operatorjev sta lastni vrednosti  $\pm 1$ . Zapišimo le eno od možnih lastnih stanj in ustrezno enačbo:

$$|\psi\rangle = \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \right] \otimes \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \right] \otimes |\uparrow\rangle$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_z) |\psi\rangle = (-1) \cdot (+1) \cdot (+1) |\psi\rangle = -|\psi\rangle \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.8

Stanje kolikšnega števila kubitov hkrati lahko opišemo z  $10^{12}$  kompleksnimi amplitudami?

Ker velja za število potrebnih amplitud za  $n$  kubitov enačba  $N = 2^n$ , velja po logaritmiranju te enačbe:  $\ln N = n \ln 2 \rightarrow n = \ln N / \ln 2 = \ln(10^{12}) / \ln 2 = 12 \cdot (\ln 10 / \ln 2) = 39,86$ . To zaokrožimo (odrežemo) navzdol: največje število kubitov je lahko 39.

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.9

Stanje sistema 4 kubitov opišemo z naslednjim vektorjem:

$$|\psi\rangle = a_{1111}|1111\rangle + a_{1110}|1110\rangle + \dots + a_{0000}|0000\rangle$$

ki ga podaja 16 kompleksnih amplitud  $a_{ijkl}$ . Med hkratno meritvijo stanja prvih dveh kubitov ugotovimo vrednosti  $|0\rangle$  in  $|1\rangle$ . V kaj kolapsira prvotno stanje?

Vektor po meritvi prvih dveh kubitov je (obdržimo le amplitude s prvima indeksoma 0 in 1):

$$|\varphi\rangle = C(a_{0111}|0111\rangle + a_{0110}|0110\rangle + a_{0101}|0101\rangle + a_{0100}|0100\rangle)$$

kjer je dodatna normalizacijska konstanta:

$$C = 1 / \sqrt{a_{0111}^2 + a_{0110}^2 + a_{0101}^2 + a_{0100}^2}$$

Pred meritvijo je namreč bila funkcija normalizirana glede na vseh 16 amplitud, zdaj pa so preostale samo štiri in je treba novo funkcijo ponovno normalizirati. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 4.10

Operator (matrika)  $A$  je hermitski:  $A^\dagger = A$ . Definirajmo nov operator:  $B = \exp(iA)$ , kjer je  $i$  imaginarna enota. Z uporabo Taylorjeve vrste dokažite, da je operator  $B$  unitaren, to je:  $B^\dagger B = BB^\dagger = I$ .

Operator  $B = \exp(iA)$  lahko formalno razvijemo v Taylorjevo vrsto na podoben način kot navadno eksponentno funkcijo, kot smo že pokazali pri računskem zgledu x. Zapišimo torej to vrsto:

$$B = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (iA)^j$$

Temu operatorju poiščimo adjungirani operator  $B^+$ . Operacija adjungiranja gre po členih (aditivnost); razen tega je »napol« homogena, to je: pri adjungiranju se kompleksni skalar, s katerim pomnožimo nek operator, spremeni v skalar s konjugirano vrednostjo. Zapišimo trditev na kratko:  $(\alpha A + \beta B)^+ = \alpha^* A^+ + \beta^* B^+$ , kjer sta  $\alpha$  in  $\beta$  skalarja,  $A$  in  $B$  pa operatorja. Pravilo pa lahko glede skalarjev tudi nekoliko bolj posplošimo:  $(\alpha^m A + \beta^n B)^+ = (\alpha^*)^m A^+ + (\beta^*)^n B^+$ , kjer sta  $m$  in  $n$  poljubni celoštevilčni potenci. Število  $i$  v naši Taylorjevi vrsti pri konjugiranju spremeni predznak. Upoštevajmo še, kaj se zgodi pri adjugiranju potence nekega operatorja. V splošnem za produkt operatorjev velja:  $(AB)^+ = B^+ A^+$ . Če pa je  $B = A$ , nam za vrstni red operatorjev ni treba skrbeti in lahko zapišemo:  $(A^2)^+ = (A^+)^2$ . S popolno indukcijo pravilo razširimo na poljubno potenco:  $(A^j)^+ = (A^+)^j$ . Ker pa je operator  $A$  hermitski, velja še  $A^+ = A$ . Če upoštevamo vse to, ugotovimo, da se pri adjungiranju zgornje Taylorjeve vrste spremeni samo predznak pri  $i$ :

$$B^+ = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (-iA)^j$$

To pa je isto kot:  $B = \exp(-iA)$ . Sklenemo:

$$B^+ B = \exp(-iA) \exp(iA) = \exp(-iA + iA) = \exp(0) = I$$

Glede množenja eksponentnih funkcij namreč veljajo za operatorje kot argumente enaka pravila kot za števila. Enako velja za  $BB^+$ . Dokaz je končan. ♠

## 5 DINAMIKA KVANTNIH DELCEV

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.1

Kako deluje operator gibalne količine v 1D kvantnem problemu na valovno funkcijo  $\psi = A \sin(kx)$ , omejeno na območje  $0 \leq x \leq a$ , tako da veljata robna pogoja  $\psi(0) = \psi(a) = 0$ ? Valovno funkcijo normalizirajte. Kolikšna je pričakovana vrednost gibalne količine v tem kvantnem stanju? Kako pa deluje na funkcijo operator kinetične energije?

Pogoj  $\psi(0) = 0$  je za sinusno funkcijo izpolnjen avtomatično. Da bo veljal tudi pogoj  $\psi(a) = 0$ , mora biti  $\sin(ka) = 0$ , to je  $ka = n\pi$ . Za vrednosti  $n$  je zadoščajo naravna števila, saj se pri negativnih celih številih  $n$  valovni funkciji samo spremeni predznak. Torej:  $\psi = A \sin(n\pi x/a)$ . Konstanto  $A$  izračunamo z normalizacijo valovne funkcije:

$$\int_0^a \psi^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = A^2 \cdot \frac{a}{2} = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Operator gibalne količine deluje na funkcijo takole:

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{d}{dx} [A \sin(kx)] = -i\hbar k A \cos(kx) = i\hbar k A \sin\left(kx + \frac{3}{2}\pi\right)$$

Funkcija  $\psi$  ni lastna funkcija operatorja gibalne količine. Pričakovana vrednost gibalne količine je enaka nič. To lahko preverimo na več načinov. Prvi, najpreprostejši je tale sklep: pričakovana vrednost operatorja, ki ustreza resnični fizikalni količini, mora biti realna. Če pa je realna sama valovna funkcija, dobimo pri računu zaradi faktorja  $i$  čisto imaginarno količino, kot bomo videli spodaj. Torej mora biti pričakovana vrednost gibalne količine za kakršno koli realno valovno funkcijo vedno enaka nič. Drugi način je, da trditev preverimo neposredno z računom:

$$\langle p \rangle = \langle \psi | \hat{p} \psi \rangle = -i\hbar A^2 \int_0^a \sin(kx) \frac{d}{dx} [\sin(kx)] dx = -i\hbar A^2 k \int_0^a \sin(kx) \cos(kx) dx = 0$$

Sinusna in kosinusna funkcija z zgoraj omenjeno vrednostjo valovnega števila  $k$  sta si namreč na tem intervalu pravokotni. Tretji dokaz je ta, da z uporabo Eulerjeve formule razcepimo sinusno funkcijo na dva eksponentna dela:  $\sin(kx) = (e^{ikx} - e^{-ikx})/(2i)$ . Eksponentni funkciji sta lastni funkciji operatorja gibalne količine z nasprotnima lastnima vrednostma.

Operator kinetične energije deluje na funkcijo takole:

$$\hat{E}_{\text{kin}}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} [A \sin(kx)] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cdot A \sin(kx)$$

Funkcija  $\psi$  je lastna funkcija operatorja kinetične energije. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.2

Osnovna energija protona v 1D neskončni potencialni jami je 1 MeV. Kolikšna je širina jame? Kolikšna je verjetnost, da bomo v nekem trenutku našli delec v srednji tretjini jame?

Podatki:

$$E_1 = 1 \text{ MeV} = 1,6 \cdot 10^{-13} \text{ J}$$

$$m = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

-----

$$a = ?$$

Širino jame  $a$  izrazimo iz enačbe (2.12 b):

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow a = \sqrt{\frac{\hbar^2}{8mE_1}} = 1,43 \cdot 10^{-14} \text{ m} = 14,3 \text{ fm (femtometri)}.$$

Za izračun verjetnosti uporabimo integral:

$$P = \int_{a/3}^{2a/3} \psi^2 dx = \frac{2}{a} \int_{a/3}^{2a/3} \sin^2(kx) dx = \frac{2}{a} \int_{a/3}^{2a/3} \frac{1}{2} (1 - \cos(2kx)) dx$$

$$P = \frac{1}{a} \left( x - \frac{1}{2k} \sin(2kx) \right) \Big|_{a/3}^{2a/3} = \frac{1}{3} - \frac{1}{2n\pi} \left[ \sin\left(\frac{4n\pi}{3}\right) - \sin\left(\frac{2n\pi}{3}\right) \right]$$

Uporabili smo tudi  $k = n\pi/a$ . Račun lahko nadaljujemo, ker poznamo sinuse mnogokratnika kota  $2\pi/3 = 120^\circ$ : 0 ali pa  $\pm 3^{1/2}/2$ , odvisno od  $n$ . Poglejmo torej možnosti za nekaj prvih kvantnih števil  $n$ :

$$n = 1 \Rightarrow P = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} = 0,609$$

$$n = 2 \Rightarrow P = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} = 0,196$$



$$n = 3 \Rightarrow P = \frac{1}{3} = 0,333$$

$$n = 4 \Rightarrow P = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{8\pi} = 0,402$$

$$n = 5 \Rightarrow P = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{10\pi} = 0,278$$

$$n = 6 \Rightarrow P = \frac{1}{3} = 0,333$$

$$n = 7 \Rightarrow P = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{14\pi} = 0,373$$

$$n = 8 \Rightarrow P = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{16\pi} = 0,299$$

$$n = 9 \Rightarrow P = \frac{1}{3} = 0,333$$

$$n = 10 \Rightarrow P = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{20\pi} = 0,361$$

$$n = 11 \Rightarrow P = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{24\pi} = 0,310$$

$$n = 12 \Rightarrow P = \frac{1}{3} = 0,333$$

Tu naredimo poučno primerjavo s klasično mehaniko. Če imamo klasično gledano delec zaprt v jamo brez potencialne energije, se giblje po jami sem in tja s stalno hitrostjo ter se odbija od sten. Zato je enako verjetno, da bo v katerikoli od tretjin jame. Torej klasično v srednji tretjini:  $P = 1/3$ . Kvantno-mehansko se temu približamo pri zelo velikih kvantnih številih, ko postane odklik od  $1/3$  vedno manjši. Kot vidimo iz zgornjega spiska, pa pri manjših kvantnih številih ta verjetnost niha okrog  $1/3$ . Zakaj imamo pri  $n = 1, 4, 7 \dots$  več od tretjine, pri  $n = 2, 5, 8 \dots$  manj in pri večkratnikih 3 ravno tretjino, lahko bralec vidi, če nariše nekaj valovnih funkcij. Tam, kjer je absolutna vrednost  $\psi$  v povprečju večja, je tudi verjetnost za nahajanje delca večja. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.3

Kako zapišemo linearno kombinacijo dveh valovnih funkcij z različnima kvantnima številoma, 1 in 2, za 1D neskončno potencialno jamo, če je prvo energijsko stanje 3–krat verjetnejše od drugega? Vzemimo realna koeficienta.

Vsoto zapišemo v formalni obliki:

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \equiv c_1\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) + c_2\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

Ker je verjetnost za eno od obeh funkcij enaka kvadratu ustreznega koeficienta, velja enačba:  $c_1^2 = 3c_2^2$ . Celotna funkcija pa mora biti normalizirana:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \rangle = 1$$

$$\langle c_1\psi_1 | c_1\psi_1 \rangle + \langle c_1\psi_1 | c_2\psi_2 \rangle + \langle c_2\psi_2 | c_1\psi_1 \rangle + \langle c_2\psi_2 | c_2\psi_2 \rangle = 1$$

Zaradi pravokotnosti različnih funkcij sta drugi in tretji člen enaka nič. Hkrati pa sta funkciji  $\psi_1$  in  $\psi_2$  že vsaka posebej normirani, zato je skalarni produkt funkcije same s seboj enak 1. Tako ostane preprosta enačba za koeficienta:  $c_1^2 + c_2^2 = 1$ . V kombinaciji z enačbo  $c_1^2 = 3c_2^2$  dobimo:  $c_1 = 3^{1/2}/2$ ,  $c_2 = 1/2$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.4

Obravnavajte energijske nivoje in njihovo degeneriranost v 3D neskončni potencialni jami. To je kocka z robom  $a$  in v njej ujetim kvantnim delcem z maso  $m$ . V kocki je potencial nič, zunaj nje pa neskončen. 1D primer preprosto posplošite na tri dimenzije.

V 3D primeru je za vsako od treh prostostnih stopenj po en energijski člen z določenim naravnim kvantnim številom:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{h^2}{8ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

Če kvantna števila  $n_1$ ,  $n_2$  in  $n_3$  zamenjajo med seboj vrednosti, je valovna funkcija drugačna. Gre za več različnih kvantnih stanj z enako energijo. Če so vsa tri števila  $n_1$ ,  $n_2$  in  $n_3$  med seboj različna, npr. 1, 2 in 3, je mogočih permutacij šest; tolikšna je tudi degeneriranost energijskega nivoja. Tabela prikazuje nekaj najnižjih stacionarnih stanj, kjer je energija normalizirana na energijski faktor  $E_0 = h^2/(8ma^2)$ ,  $d$  pa pomeni stopnjo degeneracije nivoja.

$n_1$	$n_2$	$n_3$	$E/E_0$	$d$
1	1	1	3	1
1	1	2	6	3
1	2	1		
2	1	1		
1	2	2	9	3
2	1	2		
2	2	1		
1	1	3	11	3
1	3	1		
3	1	1		
2	2	2	12	1
1	2	3	14	6
1	3	2		
2	1	3		
2	3	1		
3	1	2		
3	2	1		



### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.5

Obravnavajte razcep energijskih nivojev v 2D neskončni potencialni jami. To je sprva kvadrat s stranico  $a$  in v njej ujetim kvantnim delcem z maso  $m$ , ki se deformira v pravokotnik s stranicama  $a$  in  $b = a + \Delta a$ . Naj velja  $\Delta a \ll a$ .

Energijski nivoji v kvadratu so razen v primeru enakih kvantnih števil degenerirani. Vzemimo torej različni kvantni števili  $n_1$  in  $n_2$ :

$$E_{\text{kv}} = \frac{h^2}{8ma^2} (n_1^2 + n_2^2)$$

Kvadrat zamenjajmo s pravokotnikom:

$$E_{\text{pr}} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{(a + \Delta a)^2} \right) = \frac{h^2}{8ma^2} \left( n_1^2 + \frac{n_2^2}{(1 + \Delta a/a)^2} \right)$$

Za drugi člen uporabimo košček Taylorjeve vrste,  $(1 + \Delta a/a)^{-2} \approx 1 - 2\Delta a/a$ , torej:

$$E_{\text{pr}}(n_1, n_2) \approx \frac{h^2}{8ma^2} (n_1^2 + n_2^2 (1 - 2\Delta a/a))$$

Zamenjajmo kvantni števili:

$$E_{\text{pr}}(n_2, n_1) \approx \frac{h^2}{8ma^2} (n_2^2 + n_1^2 (1 - 2\Delta a/a))$$

in izračunajmo absolutno vrednost energijske razlike obeh stanj:

$$\Delta E = |E_{\text{pr}}(n_2, n_1) - E_{\text{pr}}(n_1, n_2)| = \frac{h^2}{8ma^2} |n_2^2 - n_1^2| \cdot \frac{2|\Delta a|}{a}$$

Zanimiva je relativna energijska razlika glede na prvotno energijo kvadra:

$$\frac{\Delta E}{E_{\text{kv}}} = \frac{|n_2^2 - n_1^2|}{n_2^2 + n_1^2} \cdot \frac{2|\Delta a|}{a}$$

Vsakemu energijskemu nivoju kvadrata ustreza pri pravokotniku, par bližnjih nivojev, če  $n_1 \neq n_2$ . Obravnavajmo bistveno različne primere parov kvantnih stanj, najprej najnižji stanji,  $n_1 = 1, n_2 = 2$ :

$$\frac{\Delta E}{E_{\text{kv}}} = \frac{3}{5} \cdot \frac{2|\Delta a|}{a}$$

Drugič naj se števili spet razlikujeta za 1, le da sta obe veliko večji od 1. Tedaj lahko uporabimo nov približek:

$$\frac{\Delta E}{E_{\text{kv}}} = \frac{(n_1 + 1)^2 - n_1^2}{(n_1 + 1)^2 + n_1^2} \cdot \frac{2|\Delta a|}{a} \approx \frac{2n_1}{2n_1^2} \cdot \frac{2|\Delta a|}{a} = \frac{1}{n_1} \cdot \frac{2|\Delta a|}{a}$$

Tretjič naj bo eno od kvantnih števil veliko večje od drugega:

$$\frac{\Delta E}{E_{\text{kv}}} \approx \frac{2|\Delta a|}{a}$$

To je največji energijski razmik parov stanj. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.6

Opazujemo nihanje atomov v vseh mogočih smereh in to je 3D problem. Prožnostno energijo vzmeti posplošimo:  $V = (k_1x^2 + k_2y^2 + k_3z^2)/2$ . Uporabljali bomo tudi ustrezno krožno frekvenco  $\omega = 2\pi\nu$ , ki jo ima vzmetno nihalo z vzmetjo s koeficientom  $k$  in utežjo z maso  $m$ :  $\omega_1 = (k_1/m)^{1/2}$ ,  $\omega_2 = (k_2/m)^{1/2}$ ,  $\omega_3 = (k_3/m)^{1/2}$ . Energija stacionarnega stanja je:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar \left[ \omega_1 \left( n_1 + \frac{1}{2} \right) + \omega_2 \left( n_2 + \frac{1}{2} \right) + \omega_3 \left( n_3 + \frac{1}{2} \right) \right]$$

Zaradi 3 dimenzij imamo spet 3 kvantna števila:  $n_1, n_2, n_3$ .

Vzamemo še poseben, simetričen problem, kjer so si vse smeri v kristalu ekvivalentne:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2})$$

Obravnavajte degeneriranost energijskih nivojev.

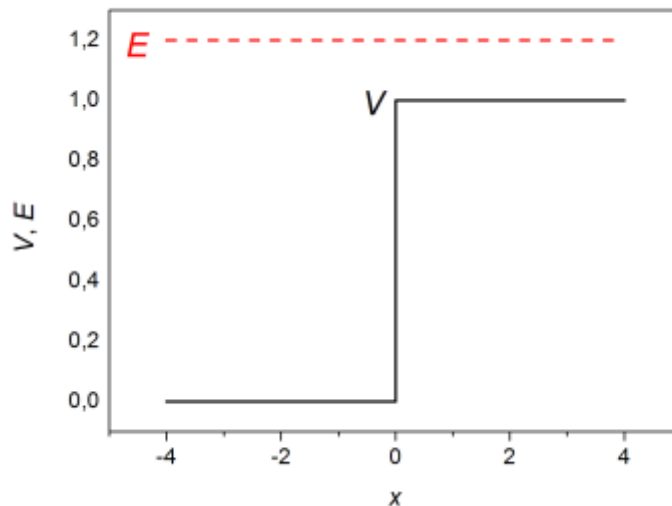
To prikazuje naslednja tabela.

**Tabela 1:** Kvantna stanja in energijski nivoji za simetrični 3D harmonski oscilator. Oznaka »Št« v petem stolpcu pomeni število različnih kvantnih stanj z isto energijo. Energije so podane v enotah  $E_0 = (h/2\pi)\omega = h\nu$ .

$n_1$	$n_2$	$n_3$	$E/E_0$	$d$
0	0	0	3/2	1
1	0	0	5/2	3
0	1	0		
0	0	1		
1	1	0	7/2	6
1	0	1		
0	1	1		
2	0	0		
0	2	0		
0	0	2		
1	1	1	9/2	10
2	1	0		
2	0	1		
1	2	0		
1	0	2		
0	1	2		
0	2	1		
3	0	0		
0	3	0		
0	0	3		
...				

♥ RAČUNSKI ZGLED 5.7

Končna potencialna stopnica (skok) je prikazana na sliki R19. Velja:  $V(x) = 0$  za  $x < 0$  in  $V(x) = V_0$  za  $x > 0$ . Obravnavajte koeficient odbojnosti  $R$  od stopnice pri prehodu ravnega vala z leve pri pogoju  $E \geq V_0$ .



**Slika R19:** Potencialna in celotna energija pri potencialnem skoku v primeru  $E > V_0$ . Enote na sliki so zaradi nazornosti izbrane brez dimenzije tako, da je  $V_0 = 1$ .

Koeficient odbojnosti je:

$$R = \left( \frac{k - k_1}{k + k_1} \right)^2$$

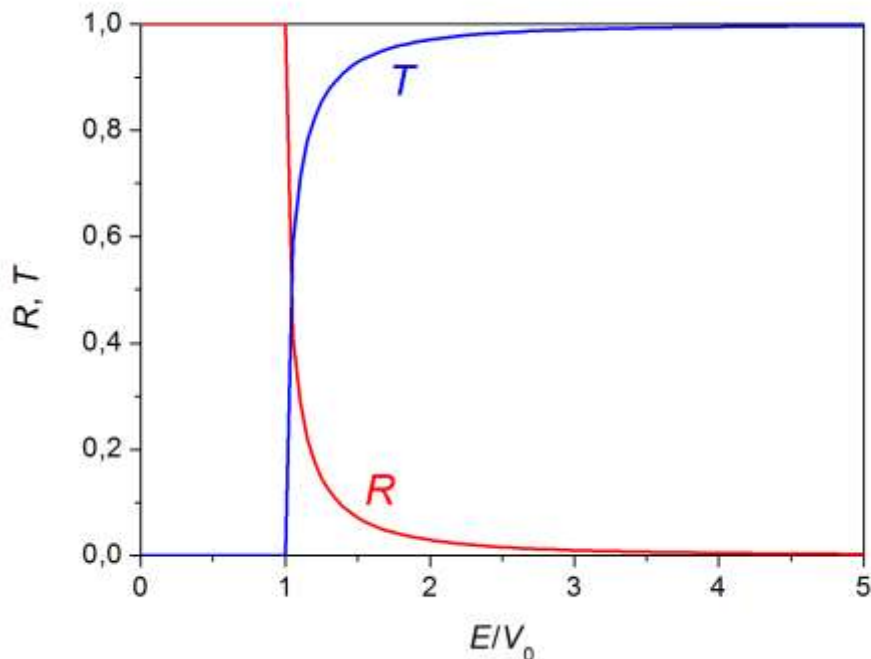
z valovnima vektorjema:  $k = [2mE/(h/2\pi)^2]^{1/2}$  na levi in  $k_1 = [2m(E - V_0)/(h/2\pi)^2]^{1/2}$  na desni.

Napišite pogoj, da velja  $R = 25\%$ .

Iz enačbe za  $R$  sledi  $k = 3k_1 \rightarrow k^2 = 9k_1^2$ , kar zapišemo z energijo in potencialom:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = 9 \cdot \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \rightarrow E = \frac{9}{8}V_0$$

Na sliki R20 sta prikazani odvisnosti koeficientov  $R$  in  $T = 1 - R$  od razmerja  $E/V_0$ .



**Slika R20:** Grafa  $R(E/V_0)$  in  $T(E/V_0)$  pri končnem potencialnem skoku. Pri klasični mehaniki bi imeli namesto gladkih krivulj od  $E = V_0$  naprej kar skok pri enki na vodoravni osi:  $0 \rightarrow 1$  za  $T$  in  $1 \rightarrow 0$  za  $R$ . Navsezadnje pa vidimo, da razlika spet ni tako bistvena, saj gre  $T$  hitro proti 0 in  $R$  hitro proti 1 za  $E > V_0$ . Prikazana je tudi možnost  $E < V_0$ , kjer gre za popoln odboj.

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.8

Pri kvantni mehaniki pogosto obravnavamo probleme, kjer primerjamo valovno funkcijo (gibanje) nekega delca v klasično dovoljenem ( $E > V$ ) in prepovedanem ( $E < V$ ) območju. V območju konstantnega potenciala  $V(x)$  v eni dimenziji so valovne funkcije kombinacije bodisi imaginarnih ( $E > V$ ) bodisi realnih eksponentnih funkcij ( $E < V$ ). Namesto tega lahko uporabimo linearno kombinacijo kotnih funkcij sinus in kosinus ali pa hiperboličnih funkcij. Z ustrezno nadomestitvijo funkcij in parametrov, ko preide delec npr. iz klasično dovoljenega v prepovedano območje, se izognemo podvajanju računov. Zato je včasih koristna direktna zveza  $\sin z \rightarrow \sinh z$  in  $\cos z \rightarrow \cosh z$ , kjer je  $z$  kompleksno število. S posplošitvijo Eulerjeve formule  $\exp(ix) = \cos x + i \sin x$  na kompleksna števila  $x$  izrazite  $\sin(iz)$  in  $\cos(iz)$  s hiperboličnima funkcijama.

Najprej izrazimo Eulerjevo formulo za nasprotno enaka realna argumenta  $\pm x$ :  $\exp(ix) = \cos x + i \sin x$ ,  $\exp(-ix) = \cos x - i \sin x$ . Enačbi prvič seštejemo, drugič odštejemo, da lahko direktno izrazimo kotni funkciji:

$$\cos x = \frac{1}{2}(e^{ix} + e^{-ix})$$

$$\sin x = \frac{1}{2i}(e^{ix} - e^{-ix})$$

Potem v obeh enačbah nadomestimo  $x \rightarrow iz$ :

$$\cos(iz) = \frac{1}{2}(e^{i(iz)} + e^{-i(iz)}) = \frac{1}{2}(e^{-z} + e^{+z}) = \cosh z$$

$$\sin(iz) = \frac{1}{2i}(e^{i(iz)} - e^{-i(iz)}) = \frac{1}{2i}(e^{-z} - e^{+z}) = -\frac{1}{i} \sinh z = i \cdot \sinh z$$

Do obeh enačb bi lahko prišli tudi s primerjavo Taylorjevih vrst za vse štiri funkcije. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.9

Izpeljite splošno enačbo za verjetnost, da prosti kvantni delec z energijo  $E$  v ravnem valu z leve strani »preide« pravokotno potencialno oviro z višino  $V > 0$  in širino  $a$  za obe možnosti:  $V < E$  (slika R22) in  $V > E$  (slika R21).

Dovolj je podrobna obravnava prve možnosti. Schroedingerjeva enačba za stacionarno stanje z energijo  $E$  in konstantnim potencialom  $V < E$  je:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V\psi = E\psi \rightarrow \psi'' = -k^2 \psi$$

z valovnim vektorjem

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$$

kot smo ga že uporabili v območju potencialne stopnice pri računskem zgledu 5.7. Splošna rešitev zgornje navadne linearne diferencialne enačbe drugega reda je preprosta:  $\psi = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ . Namesto imaginarnih eksponentnih funkcij bi lahko uporabili tudi sinusno in kosinusno funkcijo. Vendar sta eksponentni funkciji v tem primeru fizikalno ustrežnejši, saj opazujemo potujoče valove. Natančnejši razmislek namreč pokaže, da ni vseeno, ali uporabimo eksponentni ali pa kotni funkciji, če vključimo v funkcijo še časovni del. Enako linearno kombinacijo eksponentnih funkcij lahko seveda uporabimo tudi v območju brez potenciala, kjer pač vstavimo  $V = 0$  v zgornji izraz za valovni vektor. Zapišimo torej posebej valovno funkcijo za vsa tri območja na sliki R21:

1.  $\psi_1 = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ , levo od ovire ( $x < 0$ ),  $k = [2mE/(\hbar/2\pi)^2]^{1/2}$ ;



2.  $\psi_2 = C \exp(ik_1x) + D \exp(-ik_1x)$ , območje ovire ( $0 < x < a$ ),  $k_1 = [2m(E - V)/(h/2\pi)^2]^{1/2}$ ;
3.  $\psi_3 = E \exp(ikx) + F \exp(-ikx)$ , desno od ovire ( $x > a$ ), enak  $k$  kot pri funkciji  $\psi_1$ .

Pri vseh treh valovnih funkcijah pomeni prvi člen val, ki se giblje v desno smer, drugi člen pa val v nasprotno smer. Na primer pri valovni funkciji levo od ovire pomeni prvi člen s koeficientom  $A$  vpadni val, drugi člen s koeficientom  $B$  pa odbiti val. V splošnem je lahko vseh šest koeficientov kompleksnih. Vendar pa lahko zapis prve in tretje valovne funkcije takoj poenostavimo. Prvič, ker nam pri tej nalogi ne gre toliko za način normalizacije valovnih funkcij, temveč predvsem za razmerja koeficientov, ne izgubimo pri splošnosti prav ničesar, če postavimo  $A = 1$ . Drugič, če prihaja celotni val na oviro samo z leve strani, tretja valovna funkcija ne more vsebovati vala, ki bi se gibal v levo smer, zato mora veljati  $F = 0$ . Pri celotni nalogi nas zanima predvsem koeficient  $E$ , ki nazadnje pove, kolikšen del vpadnega vala z leve strani ovira prepusti, tako da se giblje naprej v desno.

Za celotno rešitev problema moramo poiskati 4 neznanne parametre:  $B$ ,  $C$ ,  $D$  in  $E$ . Za to potrebujemo 4 enačbe; dobimo jih iz 4 »robni pogojev«: tako valovna funkcija kot njen prvi odvod po koordinati  $x$  morata biti zvezna pri  $x = 0$  in  $x = a$ . Ustrezne enačbe so:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \rightarrow 1 + B = C + D$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \rightarrow (ik) + B(-ik) = C(ik_1) + D(-ik_1)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \rightarrow C \exp(ik_1a) + D \exp(-ik_1a) = E \exp(ika)$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \rightarrow C(ik_1) \exp(ik_1a) + D(-ik_1) \exp(-ik_1a) = E(ik) \exp(ika)$$

To je sistem 4 linearnih enačb za neznanne parametre; sistem je nehomogen in enolično rešljiv (determinanta ustrezne matrike ni enaka nič). Rešimo ga brez težav, npr. tako, da najprej iz prvih dveh enačb izrazimo parametra  $C$  in  $D$ , potem pa iz tretje in četrte enačbe izračunamo še  $B$  in  $E$ . Je pa precej računanja in pisanja. Zato zapišimo samo rešitev za koeficient prepustnosti  $T$ :

$$T = |E|^2 = \frac{4k^2 k_1^2}{(k^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_1 a) + 4k^2 k_1^2} = \frac{1}{(1/4)(k/k_1 - k_1/k)^2 \sin^2(k_1 a) + 1}$$

in še enkrat oba valovna vektorja:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi \cdot \sqrt{2mE}}{h}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \frac{2\pi \cdot \sqrt{2m(E - V_0)}}{h}$$

V primeru  $V > E_0$  postane valovni vektor  $k_1$  imaginaren in ga pišemo kot  $k_1 = ik_1$ , ustrezne enačbe pa se spremenijo:

$$T = \frac{4k^2 \kappa_1^2}{(k^2 + \kappa_1^2)^2 \sinh^2(\kappa_1 a) + 4k^2 \kappa_1^2} = \frac{1}{(1/4)(k/\kappa_1 + \kappa_1/k)^2 \sinh^2(\kappa_1 a) + 1}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi \cdot \sqrt{2mE}}{h}$$

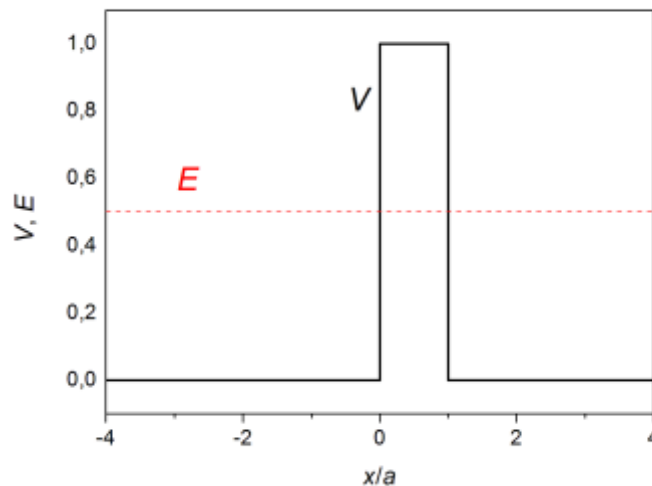
$$\kappa_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{2\pi \cdot \sqrt{2m(V_0 - E)}}{h}$$

Glede na računski zgled 5.8 smo pač nadomestili  $\sin(ix) \rightarrow \sinh x$ . Omenimo, da parameter  $\kappa_1$  kljub podobnemu zapisu kot za  $k$  pravzaprav nima vloge pravega valovnega vektorja, temveč je koeficient pri eksponentni funkciji v klasično prepovedanem območju, to je v intervalu  $(0, a)$ , kjer je potencial večji od kinetične energije vpadnih delcev. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.10

Kolikšna je verjetnost, da kvantni delec v ravnem valu z leve strani »preide« (tunnelira skozi) pravokotno potencialno oviro, če je njen potencial dvakrat večji od kinetične energije delca:  $V_0 = 2E$ ? Širina ovire je  $a$  (slika R21).

Uporabimo enačbe prejšnjega računskega zgleda v primeru  $E < V_0$ .



**Slika R21:** Potencialna ovira in energija delca, ki pride v ravnem valu z leve strani,  $E = (1/2)V_0$ . Enote na sliki so zaradi nazornosti izbrane brez dimenzije tako, da je  $V_0 = 1$ .

Vstavimo v enačbo za  $T$  izraza za valovna vektorja in enačbo preuredimo:

$$T = \frac{1}{\left(\frac{k^2 + \kappa_1^2}{2k\kappa_1}\right)^2 \sinh^2(\kappa_1 a) + 1}$$

$$T = \frac{1}{\frac{V_0^2}{2E(V_0 - E)} \sinh^2(\kappa_1 a) + 1}$$

V primeru  $V_0 = 2E$  je koeficient prepustnosti delcev še vedno odvisen od širine ovire  $a$ :

$$T = \frac{1}{2 \sinh^2(\kappa_1 a) + 1} = \frac{1}{2 \sinh^2(\sqrt{2mE} \cdot a / \hbar) + 1}$$

Upoštevali smo  $V_0 - E = 2E - E = E$ ; v tem primeru sta koeficienta  $k$  in  $\kappa_1$  enaka. V primeru zelo majhne širine ovire  $a$  je  $T \approx 1$ . Oglejmo si drugo skrajnost, veliko širino  $a$ , tako da je argument hiperboličnega sinusa velik. Tedaj uporabimo približek  $\sinh x = (e^x + e^{-x})/2 \approx e^x/2$ , poleg tega pa zanemarimo enko v imenovalcu. Tedaj je koeficient prepustnosti:

$$T \approx 2 \exp\left(-\frac{2\sqrt{2mE} \cdot a}{\hbar}\right)$$

To je padajoča eksponentna funkcija širine ovire. Za fizikalni občutek izračunajmo še, pri kateri vrednosti širine  $a$  je koeficient  $T = 1\%$ , če gre za elektron z maso  $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg in kinetično energijo  $E = 1$  eV, torej je ovira visoka  $V_0 = 2$  eV:

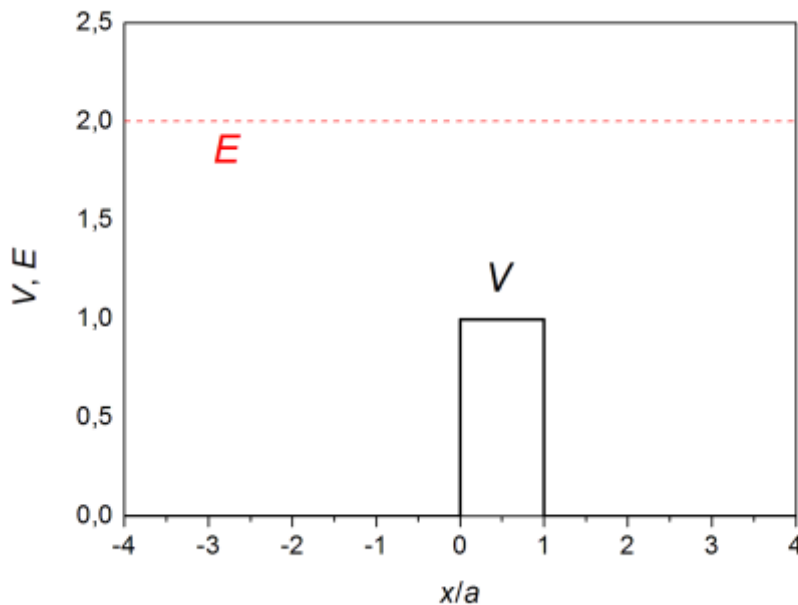
$$a = \frac{\hbar \cdot \ln(2/T)}{2\sqrt{2mE}} = 0,52 \text{ nm}$$

Omenimo še en mejni primer (za poljubno širino  $a$ ):  $E \rightarrow V_0$ . Tedaj postane parameter  $\kappa_1$  majhen in v enačbi za  $T$  nadomestimo  $\sinh(\kappa_1 a) \approx \kappa_1 a$  in izračunamo:

$$T(E = V_0) = \frac{1}{(ka/2)^2 + 1} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.11

Kolikšna je verjetnost, da kvantni delec v ravnem valu z leve strani preide pravokotno potencialno oviro, če je njen potencial dvakrat manjši od kinetične energije delca:  $V_0 = E/2$  (slika R22)?



**Slika R22:** Potencialna ovira in energija delca, ki pride v ravnem valu z leve strani,  $E = 2V_0$ . Enote na sliki so zaradi nazornosti izbrane brez dimenzije tako, da je  $V_0 = 1$ .

Uporabimo enačbe prejšnjega računskega zgleda v primeru  $E > V_0$ . Pri  $V_0 = E/2$  velja  $k/k_1 = 2^{1/2}$ , tako da je koeficient  $T$  enak:

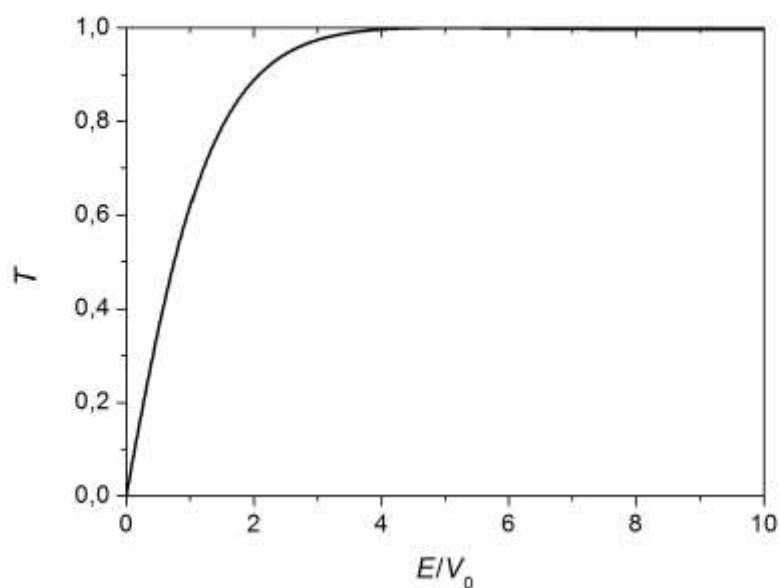
$$T = \frac{1}{\sin^2(k_1 a)/8 + 1} = \frac{1}{\sin^2(\sqrt{mE} \cdot a/\hbar)/8 + 1}$$

Še vedno je odvisen od zveze med energijo  $E$  in širino ovire  $a$ . V klasični sliki bi bil koeficient prepustnosti vedno 1, če je energija delca višja od potencialne energije ovire. V kvantni mehaniki pa se lahko tudi takšen delec odboje nazaj. Dogaja pa se še nekaj bolj nenavadnega: če imamo določeno oviro (nespremenljivi vrednosti  $V_0$  in  $a$ ) in postopno povečujemo energijo delca  $E > V_0$ , kvadrat sinusne funkcije v imenovalcu periodično variira med 0 in 1. Ne glede na to, kako se spreminja koeficient pri kvadratu sinusne funkcije, ima pri točno določenih vrednostih energije sinusna funkcija vrednost nič, tedaj pa je koeficient prepustnosti enak 1.

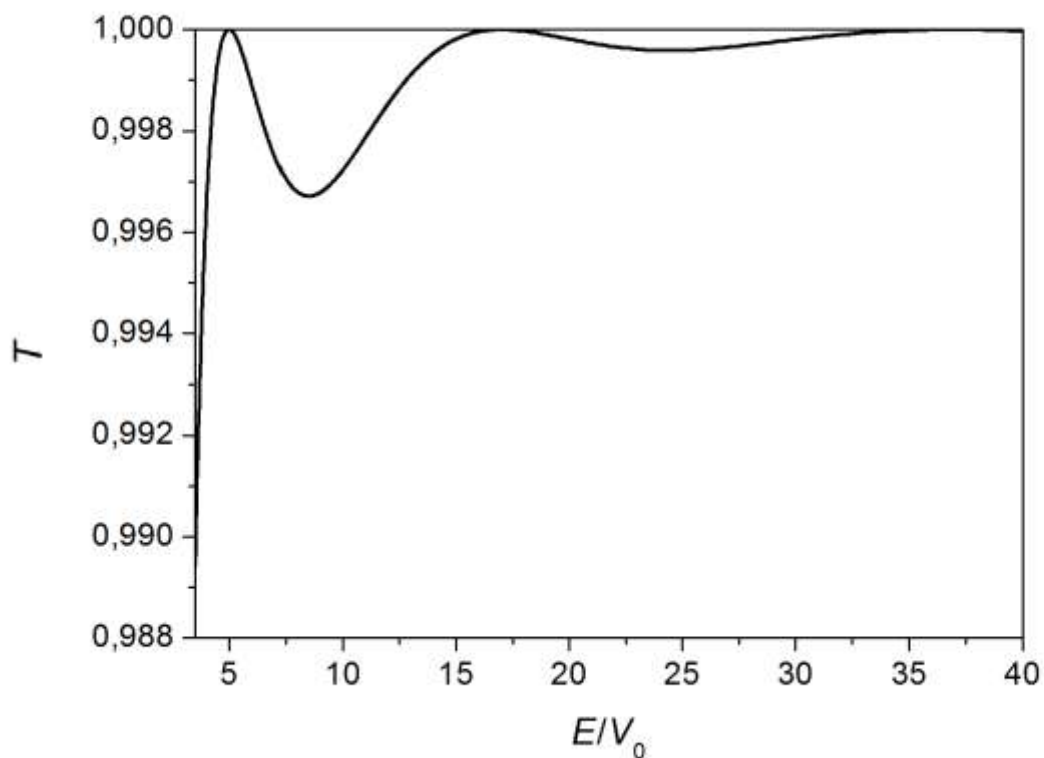
Narišimo graf  $T(E/V_0)$  za  $E \geq 0$  in sicer za obe možnosti  $E < V_0$  in  $E > V_0$  (sliki R23 in R24). Zvezno povečujemo torej energijo vpadnega delca, zaradi nazornosti pa naj bo potencialna ovira takšna, da med parametroma  $V_0$  in  $a$  velja zveza:

$$\kappa_{10} a \equiv \kappa_1(E=0)a = \frac{2\pi \cdot \sqrt{2mV_0}}{h} \cdot a = \frac{\pi}{2}$$

Torej velja  $\sin(\kappa_{10}a) = 1$  in  $\sinh(\kappa_{10}a) \approx 2,30$ .



**Slika R23:** Graf odvisnosti  $T(E/V_0)$  pri pravokotni oviri kot na slikah R21 in R22. Funkcija pri  $E > V_0$  ni strogo monotono naraščajoča, marveč ima pri velikih vrednostih energije rahle oscilacije (ki pa so zelo neizrazite zaradi zelo majhnega faktorja pri kvadratu sinusne funkcije). Prvi maksimum (natančno  $T = 1$ ) pri naših parametrih  $V_0$  in  $a$  je pri  $E = 5V_0$ .



**Slika R24:** Graf odvisnosti  $T(E/V_0)$  pri pravokotni oviri za velike energije  $E$  kot pri grafu na sliki R23; poudarjene so oscilacije funkcije. ♠

## ♥ RAČUNSKI ZGLED 5.12

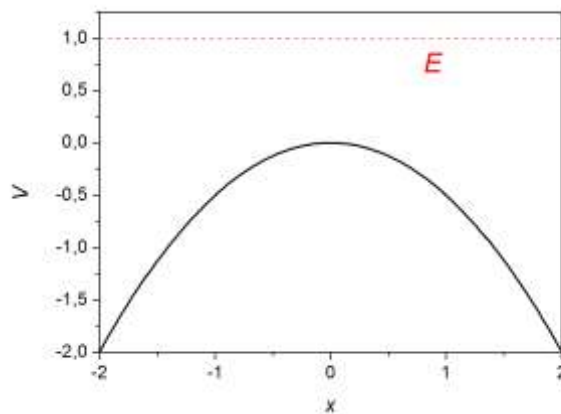
Kolikšna je verjetnost, da kvantni delec v ravnem valu z leve strani preide potencialno oviro, ki jo podaja negativni parabolični potencial  $V(x) = -kx^2/2$  (slika R25)? Enačba za verjetnost (koeficient prepustnosti  $T$ ) pri poljubni energiji  $E$  (tako pozitivni kot negativni) vpadnega delca je:

$$T = \frac{1}{1 + \exp(-2\pi\varepsilon)}$$

kjer je brezdimenzijska energija  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar} \cdot \sqrt{\frac{m}{k}}$$

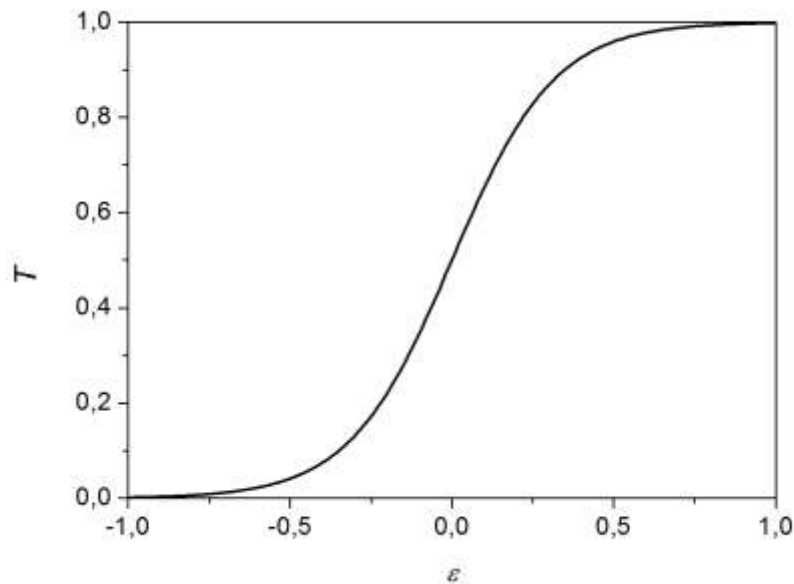
V enačbi za  $\varepsilon$  je  $m$  masa delca. Koeficient  $T$  izračunajte za tri značilne vrednosti brezdimenzijske energije:  $\varepsilon = 0, \pm 1/(2\pi)$ , potem pa še njegovo asimptotično vedenje za  $\varepsilon \rightarrow \pm\infty$ . Skicirajte graf  $T(\varepsilon)$ .



**Slika R25:** Parabolična potencialna ovira in energija delca, ki pride v ravnem valu z leve strani. Enote na sliki so zaradi nazornosti izbrane brez dimenzije.

V primeru  $\varepsilon = 0$  je  $T = 0,5$ . Funkcija  $T(\varepsilon)$  je naraščajoča: za pozitivne energije velja  $T > 0,5$ , za negativne pa  $T < 0,5$ . V primeru  $\varepsilon = 1/(2\pi)$  je  $T \approx 0,731$ , v primeru  $\varepsilon = -1/(2\pi)$  pa  $T \approx 0,269$ . V primeru  $\varepsilon \rightarrow +\infty$  je eksponentni člen v imenovalcu veliko manjši od 1, zato približno velja  $T \approx 1 - \exp(-2\pi\varepsilon)$ . V primeru  $\varepsilon \rightarrow -\infty$  pa je eksponentni člen veliko večji od 1, zato približno velja  $T \approx \exp(2\pi\varepsilon)$ . Graf je prikazan na sliki R26. Če bi izhodišče grafa premaknili v točko  $(0, \frac{1}{2})$ , bi dobili liho funkcijo hiperbolični tangens, saj lahko hitro preverimo:

$$T - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \tanh(\pi\varepsilon)$$



**Slika R26:** Graf  $T(\varepsilon)$  za parbolično potencialno oviro

Tudi ta zgled lepo ponazori razliko med kvantno in klasično mehaniko: v slednji bi moral delec s pozitivno energijo preiti negativno potencialno oviro s stooostotno verjetnostno, delec z negativno energijo pa bi se moral stooostotno zanesljivo odbiti nazaj.

Poudarimo še, da se ta zgled v nečem bistveno razlikuje od prejšnjih, pa tudi od vseh drugih značilnih zgledov, pri katerih gre potencial  $V$  asimptotično proti vrednosti 0 v limiti  $x \rightarrow \pm\infty$ . V tem primeru potencial ostaja parbolična funkcija, zato rešitve Schroedingerjeve enačbe za velike absolutne vrednosti koordinate  $x$  ne ustrezajo prostim valovom. Zato ima tudi zgoraj zapisani koeficient prepustnosti v fizikalnem smislu nekoliko drugačen pomen kot pri prepustnosti ravnega vala. Vendar pa lahko definiramo gostoto energijskega toka za poljubno valovno funkcijo, ne le za ravni val. Čeprav v fiziki v realnosti nimamo takšnega potenciala, ki bi bil parbolične oblike za vse vrednosti koordinate  $x$ , pa ga lahko vzamemo kot približek za praktično pomembne zglede, ko obravnavamo energije delcev blizu maksimuma  $V(x)$ , bodisi tik nad maksimumom ali tik pod njim. Rezultat tega zgleada bomo še uporabili pri poglavju o heterostrukturah. ♡

## 6 KVANTNA NEDOLOČENOST

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 6.1

Elektronu izmerijo koordinato  $x$  na 10 nm natančno. S kolikšno največjo natančnostjo lahko v principu hkrati izmerijo njegovo komponento hitrosti  $v_x$ ? Tekaču na 100 m lahko izmerijo koordinato  $x$  na 1 mm natančno (določena točka njegovega telesa). S kolikšno največjo natančnostjo lahko v principu hkrati izmerijo njegovo komponento hitrosti  $v_x$ , če je njegova masa 80 kg?

Uporabimo enačbo:

$$\delta x \cdot \delta p_x = \delta x \cdot m \delta v_x = \frac{\hbar}{2} \rightarrow \delta v_x = \frac{\hbar}{2m\delta x} = \frac{h}{4\pi m\delta x}$$

Pri elektronu z maso  $9,1 \cdot 10^{-31}$  kg izračunamo  $\delta v_x = 5,8 \cdot 10^3$  m/s. To je videti precej nenatančno, a še vedno je to majhna vrednost v primerjavi s svetlobno hitrostjo. Pri tekaču pa je nedoločenost komponente hitrosti fantastično majhna:  $6,6 \cdot 10^{-34}$  m/s! ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 6.2

Energijo vodikovega atoma v osnovnem stanju v kvantni mehaniki lahko ocenimo na naslednji način. Energija je vsota kinetične in elektrostatične energije:  $E = mv^2/2 - e_0^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ , kjer je  $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$  kg masa elektrona (natančneje reducirana masa),  $e_0 = 1,60 \cdot 10^{-19}$  As osnovni naboj,  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$  As/(Vm) influenčna konstanta,  $r$  neka efektivna (povprečna) razdalja med elektronom in jedrom, ki jo smatramo kot polmer atoma,  $v$  pa hitrost kroženja elektrona po Bohrovi planetarni interpretaciji gibanja elektrona. Po Heisenbergovem načelu nedoločenosti ocenimo zvezo med polmerom  $r$  in hitrostjo  $v$  takole:  $v \sim h/(4\pi \cdot mr)$ , kjer je  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Js Planckova konstanta. Ta pogoj dobimo tako, da neenačbo  $\delta x \cdot \delta p_x \geq h/(4\pi)$  za produkt nedoločenosti koordinate in ustrezne komponente gibalne količine nadomestimo z enačbo in prepisemo  $\delta x \rightarrow r$ ,  $\delta p_x \rightarrow mv$ . Izračunajte energijo z njeno minimizacijo po polmeru  $r$ , hkrati pa ocenite tudi  $r$  in  $v$ .

Energija, izražena s polmerom  $r$  kot neodvisno spremenljivko, je:

$$E = \frac{h^2}{32\pi^2 \cdot mr^2} - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Minimizirajmo jo:



$$\frac{dE}{dr} = \frac{-h^2}{16\pi^2 m r^3} + \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = 0 \rightarrow r = \frac{\epsilon_0 h^2}{4\pi m e_0^2} \rightarrow E = -\frac{m e_0^4}{2\epsilon_0^2 h^2}$$

Dobimo grobi oceni:  $r \sim 0,2 \text{ nm}$ ,  $E \sim -54 \text{ eV}$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 6.3

Kolikšen je produkt standardnih deviacij koordinate in gibalne količine delca v 1D neskončni potencialni jami v osnovnem stanju? Primerjajte rezultat z najmanjšim mogočim produktom po Heisenbergovi enačbi.

Zaradi simetrije pričakovani vrednosti koordinate in gibalne količine že poznamo:  $\langle x \rangle = a/2$  (če je jama v območju  $0 \leq x \leq a$ ),  $\langle p \rangle = 0$ . Za izračun ustreznih standardnih deviacij moramo poznati še pričakovani vrednosti kvadratov obeh količin. Izračunajmo najprej  $\langle x^2 \rangle$ :

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^a x^2 \psi^2 dx = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx$$

Pri integriranju najprej uporabimo zvezo  $\sin^2(kx) = (1 - \cos(2kx))/2$ , potem pa dvakrat zapored metodo per partes. Rezultat je:

$$\langle x^2 \rangle = a^2 \cdot \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right)$$

Pričakovana vrednost kvadrata gibalne količine pa izhaja direktno iz zveze med gibalno količino in kinetično energijo, saj je  $\psi$  lastna funkcija operatorja kinetične energije:

$$\langle p^2 \rangle = 2mE_{\text{kin}} = 2mE = 2m \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2}$$

Standardna deviacija koordinate je:

$$\delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = a \cdot \sqrt{\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right) - \frac{1}{4}} = a \cdot \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}} \approx 0,18 a$$

Standardna deviacija gibalne količine je:

$$\delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \frac{\hbar \pi}{a}$$

Produkt obeh standardnih deviacij je:

$$\delta x \cdot \delta p = 0,18\pi\hbar = 0,57\hbar > \frac{\hbar}{2}$$

Ta produkt je večji od Heisenbergove meje, kakor mora biti. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 6.4

Iz relacije za produkt nedoločenosti koordinate in ustrezne komponente gibalne količine izpeljite analogno relacijo za produkt nedoločenosti energije in časa. Upoštevajte le kinetično energijo prostega delca:  $E = p^2/(2m)$ ; uporabite tudi  $x = vt$ .

Nedoločenost energije iz nedoločenosti gibalne količine izračunamo podobno kot diferencial:  $\delta E = (dE/dp)\delta p = (p/m)\delta p = v\delta p$ . Pri nedoločenosti za  $x$  pa upoštevajmo le nedoločenost za čas, ne pa tudi za hitrost delca:  $\delta x = v\delta t \rightarrow \delta t = \delta x/v$ . Produkt nedoločenosti energije in časa je potem:

$$\delta E \cdot \delta t = (v\delta p) \cdot (\delta x/v) = \delta p \cdot \delta x = \frac{\hbar}{2}$$

Izpeljava sicer ni bila fizikalno neoporečna, ampak rezultat je pravilen. Vendar je fizikalna interpretacija nedoločenosti energije in časa drugačna kot pri nedoločenosti koordinate in komponente gibalne količine. Medtem ko nas pri nedoločenosti koordinate in komponente gibalne količine zanimata natančnosti merjenja teh dveh količin v istem trenutku, lahko v principu merimo (in primerjamo!) energijo sistema le v dveh različnih časih. Čim krajši je čas med zaporednima meritvama energije, tem bolj nenatančna je meritev. Če smo še natančnejši, moramo poudariti, da ne gre toliko za natančnost pri merjenju energije nekega sistema, temveč bolj za vprašanje, za koliko se energija nekega sistema (ki bi se sicer morala strogo ohranjati) spreminja v zelo kratkih časovnih razmikih. To je tudi ena od interpretacij za nastanek parov delec – antidelec (npr. elektron in pozitron) iz ničesar (v navidezno popolnem vakuumu). Za nastanek vsakega delca z določeno maso je namreč potrebna določena energija ( $E = mc^2$ , za dva antidelca z enako maso torej  $2mc^2$ ). Vendar gledano dolgoročno kljub vsemu lahko trdimo, da se energija ohranja: nastali par delec – antidelec trenutno res nastane v vakuumu, pri čemer si »izposodi« za to potrebno energijo iz vakuuma, vendar pa se ta par kaj hitro spet izniči in tako vrne energijo. Poudarimo še to, da v tem primeru ne gre za resnične pare delec – antidelec, kakršni lahko nastanejo zaradi viška energije (to je kinetične energije) npr. v velikih delčnih trkalnikih (npr. ob trku zelo hitrega para proton – proton, ki prihajata drug proti drugemu v nasprotnih smereh). Takšnim parom delec – antidelec, ki nastajajo iz »nič« brez energije zaradi trkov, ki pa se zopet izjemno hitro spet izničijo (anihilirajo), imenujemo virtualni delci in so izjemno pomembni pri razumevanju osnovnih sil v naravi. ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 6.5

Relacije v zvezi z nedoločenostjo komponent tirne (in tudi spinske) vrtilne količine delca so drugačne kot za koordinate in ustrezne komponente gibalne količine. To je zato, ker izračunamo vrtilno količino kot vektorski produkt krajevnega vektorja in gibalne količine. Medtem ko princip nedoločenosti ne prepoveduje tega, da lahko hkrati natančno izmerimo npr. vse tri komponente gibalne količine, tega pri vrtilni količini v principu ne moremo narediti. Obravnavajmo najznačilnejši zgled, ko sta podani kvantni števili  $l$  in  $m$ , z njima pa sta natančno definirani velikost vrtilne količine in njena komponenta v smeri izbrane osi  $z$ :

$$\Gamma = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$$

$$\Gamma_z = m \cdot \hbar$$

pri čemer velja  $-l \leq m \leq l$ . V tem primeru sta drugi dve komponenti vrtilne količine v preprosti geometrijski predstavi zvezno porazdeljeni (vsaj dokler ju ne izmerimo). Mislimo si namreč, da lahko vektor vrtilne količine  $\Gamma = (\Gamma_x, \Gamma_y, \Gamma_z)$  kroži po plašču stožca, tako da sta njegova velikost in komponenta v smeri osi  $z$  (to je geometrijska os stožca) konstantni. Ocenite nedoločenosti obeh komponent vrtilne količine za poljubne vrednosti  $l$  in  $m$  in navedite nekaj primerov z najmanjšimi vrednostmi obeh kvantnih števil. Kdaj je nedoločenost obeh komponent najmanjša in kdaj največja?

Vzemimo poljubni dovoljeni vrednosti kvantnih števil  $l$  in  $m$ . Tedaj ima komponenta  $\Gamma_x$  ekstremni vrednosti takrat, ko velja  $\Gamma_y = 0$ :

$$\Gamma_x = \pm \sqrt{\Gamma^2 - \Gamma_z^2} = \pm \sqrt{l(l+1) - m^2} \cdot \hbar$$

Enako velja za komponento  $\Gamma_y$ , tako da lahko navedemo oceno za nedoločenost:

$$\delta\Gamma_x = \delta\Gamma_y = \sqrt{l(l+1) - m^2} \cdot \hbar$$

Pri danem številu  $l$  je nedoločenost komponent najmanjša za  $m = l$ :

$$\delta\Gamma_{x \min} = \delta\Gamma_{y \min} = \sqrt{l} \cdot \hbar$$

največja pa je za  $m = 0$ , to je, ko vektor vrtilne količine kroži v ravnini  $(x, y)$ :

$$\delta\Gamma_{x \max} = \delta\Gamma_{y \max} = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar = \Gamma$$

Nekaj konkretnih zgledov:

$$l = 1, m = 0 \rightarrow \delta\Gamma_x = \delta\Gamma_y = \sqrt{2} \cdot \hbar$$

$$l = 1, m = 1 \rightarrow \delta\Gamma_x = \delta\Gamma_y = \hbar$$

$$l = 2, m = 0 \rightarrow \delta\Gamma_x = \delta\Gamma_y = \sqrt{6} \cdot \hbar$$

$$l = 2, m = 1 \rightarrow \delta\Gamma_x = \delta\Gamma_y = \sqrt{5} \cdot \hbar$$

$$l = 2, m = 2 \rightarrow \delta\Gamma_x = \delta\Gamma_y = \sqrt{2} \cdot \hbar$$

Edina izjema glede nedoločenosti komponent vrtilne količine je primer  $l = m = 0$ , ko so vse tri komponente natančno enake nič.

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 6.6

Ta zgled je povezan s prejšnjim, le da nas zdaj zanima spinska vrtilna količina. Nek osnovni delec, npr. elektron, ima spin  $s = 1/2$ , kar pomeni, da ima lahko v določeni smeri (navadno jo označimo kot smer koordinatne osi  $z$ ) lastno vrednost komponente vrtilne količine  $\Gamma_z = \pm(1/2)(\hbar/(2\pi))$ . Naj bo elektron v lastnem stanju s komponento  $\Gamma_z = +(1/2)(\hbar/(2\pi))$ . Kolikšna je pričakovana vrednost komponente vrtilne količine v smeri osi  $z'$ , ki  $z$  osjo  $z$  oklepa kot  $\theta < 90^\circ$ ?

Tako kot v prejšnjem zgledu s tirno vrtilno količino delca si mislimo, da lahko vektor vrtilne količine  $\vec{\Gamma} = (\Gamma_x, \Gamma_y, \Gamma_z)$  kroži po plašču stožca, tako da sta njegova velikost in komponenta v smeri osi  $z$  (to je geometrijska os stožca) konstantni. Podobno kot pri tirni vrtilni količini namreč velja:

$$\Gamma_z = s\hbar$$

$$\Gamma = \sqrt{s(s+1)}\hbar > \Gamma_z$$

Zato oklepata os  $z$  in trenutni vektor vrtilne količine kot:

$$\alpha = \arccos \frac{\Gamma_z}{\Gamma} = \arccos \frac{s}{\sqrt{s(s+1)}}$$

Vektor vrtilne količine je odvisen še od azimutnega kota  $\varphi$ :

$$\vec{\Gamma} = \Gamma(\sin \alpha \cos \varphi, \sin \alpha \sin \varphi, \cos \alpha)$$

Zaradi preprostejšega računa vzemimo, da leži smerni vektor nove osi  $z'$  v ravnini  $(x, z)$ , končni rezultat pa je sicer neodvisen od te izbire:

$$\vec{e}_{z'} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$$

Komponento vrtilne količine v smeri nove osi izračunamo s skalarnim produktom:

$$\Gamma_{z'} = \vec{\Gamma} \cdot \vec{e}_{z'} = \Gamma(\sin \alpha \cos \varphi \cdot \sin \theta + \cos \alpha \cdot \cos \theta)$$

Njeno povprečno vrednost izračunamo z integracijo po azimutu:

$$\langle \Gamma_{z'} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \vec{\Gamma} \cdot \vec{e}_{z'} d\varphi = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_0^{2\pi} (\sin \alpha \cos \varphi \cdot \sin \theta + \cos \alpha \cdot \cos \theta) d\varphi$$

Integral prvega člena je enak nič zaradi periodične funkcije  $\cos \varphi$ , integral drugega člena pa je trivialen. Rezultat je:

$$\langle \Gamma_{z'} \rangle = \Gamma \cos \alpha \cdot \cos \theta = \Gamma_z \cdot \cos \theta = \frac{\hbar}{2} \cdot \cos \theta$$

V limitnem primeru  $\theta \rightarrow \pi/2$  je to povprečje enako nič, saj os  $z'$  preide v os  $x$  in negativne vrednosti komponente  $\Gamma_x$  so enako verjetne kot pozitivne. Naj omenimo še, da os  $z$  ni v ničemer privilegirana pred osjo  $z'$ . Zato sta lastni vrednosti komponente vrtilne količine v smeri osi  $z'$  enaki kot v smeri osi  $z$ . Če imamo torej dano lastno stanje s komponento  $\Gamma_z = +(1/2)(\hbar/(2\pi))$ , si ga lahko še vedno predstavljamo kot linearno kombinacijo dveh lastnih stanj, pri katerih je glede na novo os  $\Gamma_{z'} = \pm(1/2)(\hbar/(2\pi))$ .

Zato si lahko v zvezi z meritvijo komponente vrtilne količine (npr. s Stern-Gerlachovim poskusom) zastavimo naslednje vprašanje. Recimo, da smo izmerili komponento spinske vrtilne količine v smeri izbrane osi  $z$  in ugotovili  $\Gamma_z = +(1/2)(\hbar/(2\pi))$ . To pomeni, da je pri meritvi valovna funkcija doživela kolaps v dano lastno stanje, če ni bila že prej v njem. Zdaj pa meritev ponovimo glede na novo os  $z'$ . Pričakujemo eno od dveh vrednosti  $\Gamma_{z'} = \pm(1/2)(\hbar/(2\pi))$  in zanima nas verjetnost za obe možnosti. Pri ostrem kotu med osema verjetnosti nista enaki. Označimo verjetnost za pozitivno vrednost komponente  $P_+$ , tisto za negativno vrednost pa  $P_-$ ; smiselno je pričakovati  $P_- < P_+$ . Obe verjetnosti lahko izračunamo iz enačb:

$$\langle \Gamma_{z'} \rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \cos \theta = \frac{\hbar}{2} \cdot P_+ + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) P_-$$

$$P_+ + P_- = 1$$

Izračunani verjetnosti sta:

$$P_+ = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

$$P_- = \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

Kot je bilo pričakovati, sta v primeru  $\theta = \pi/2$  verjetnosti za pozitivno in negativno vrednost komponente vrtilne količine okrog nove osi enaki:  $P_+ = P_- = 1/2$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 6.7

Youngov interferenčni poskus s svetlobo in dvema ozkima režama v razmiku  $a$  (ali pa z ustrežno mrežico z večjim številom rež v enakih razmikih), ki prepuščata svetlobo, si lahko kvalitativno razložimo s principom nedoločenosti. Naj bo razmerje  $a/\lambda$  ( $\lambda$  je valovna dolžina svetlobe) veliko, tako da so koti ojačitve za nizki red  $N$  majhni in lahko uporabimo približek  $\sin \beta \approx \tan \beta$ . S principom nedoločenosti ocenite prvi kot ojačitve, če za nedoločenost koordinate fotona vzdolž zaslonke z režama vzamete  $\delta y = a$ .

Z nedoločenostjo koordinate  $y$  grobo ocenimo nedoločenost ustrezne komponente gibalne količine fotona:  $\delta p_y \approx h/\delta y = h/a$ . Za komponento gibalne količine fotona vzdolž vpadnega žarka pa privzemamo, da je natančno določena in se pri uklonu ne spremeni:  $p_x = h/\lambda$ . Foton, ki preide eno od rež (ne vemo, katero), zaradi komponente gibalne količine  $\delta p_y$  spremeni na poti do zaslona (kjer opazujemo interferenčni vzorec) svojo smer glede na smer vpadnega žarka. Zato odklonski kot prvega maksimuma ocenimo kot:  $\sin \beta \approx \tan \beta = \delta p_y/p_x = (h/a)/(h/\lambda) = \lambda/a \rightarrow a \sin \beta = \lambda$ . To res ustreza maksimumu za red  $N = 1$ . ♠

## 7 ELEKTRONSKA MIKROSKOPIJA

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 7.1

Čeprav ločljivost je elektronskega mikroskopa danes bolj omejena z velikostjo pike snopa elektronov na površju vzorca, je de Broglieva valovna dolžina elektrona še vedno ključni faktor. Če ocenimo mejo ločljivosti kot  $d \approx \lambda/2$ , kolikšna mora biti pospeševalna napetost elektronov, da dosežemo ločljivost  $d = 1 \text{ nm}$ ?

Velja zveza:

$$d = \frac{\lambda}{2} = \frac{h}{2p} = \frac{h}{2\sqrt{2mE_k}}$$

Pri tem je  $m$  masa elektrona, kinetična energija pa je enaka električnemu delu:  $E_k = eU$ . Nadaljujmo:

$$d = \frac{h}{2\sqrt{2me_0U}} \rightarrow U = \frac{h^2}{8me_0d^2} = 0,37 \text{ V}$$

V resnici so značilne pospeševalne napetosti za vrstični elektronski mikroskop reda velikosti 10 kV. Uvidimo, da je resnična omejitev ločljivosti velikost pike snopa, kot je omenjeno zgoraj. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 7.2

Pri hidrolizi aluminijevega nitrída (AlN) pri povišani temperaturi v vodni suspenziji, v kateri so potopljene tudi vzorci keramike  $\text{Al}_2\text{O}_3$  s polirano površino, nastane na keramični površini tanka, morfološko razgibana plast materiala. Z vrstično mikroskopijo (SEM = scanning electron microscopy) ugotovimo, da je ta plast sestavljena iz tankih lamel pol-eliptične oblike. Vse lamele imajo približno enako debelino,  $d \approx 3 \text{ nm}$ , ne glede na temperaturo, pri kateri je potekala hidroliza. Lamelle so praktično povsem pokončne (pravokotne na podlago - površino  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), njihova širina ob tleh je enaka dvojni eliptični polosi,  $2a$ , medtem ko je druga polos,  $b$ , navpična (tako da je najširši del pol-elipse na podlagi, teme pa je njena najvišja točka nad podlago). Parametra  $a$  in  $b$  nista enaka za vse lamele, zato v tabeli podajamo njuno statistično povprečje, ki je bilo izračunano iz slike SEM faktor. Ti dve povprečji sta odvisni od temperature hidrolize in prav tako število nastalih lamel na plosčinsko enoto podlage,  $n$ . Iz podatkov  $a$ ,  $b$ ,  $d$  in  $n$  izračunajte pri vsaki temperaturi efektivno višino (debelino) plasti  $h_{\text{ef}}$ . Ta je definirana tako, da ima morfološko homogena (povsod enako debela) plast z višino  $h_{\text{ef}}$  enako prostornino kot vse lamele skupaj na dani površini vzorca  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .

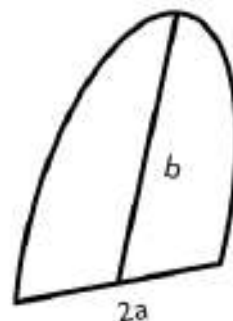
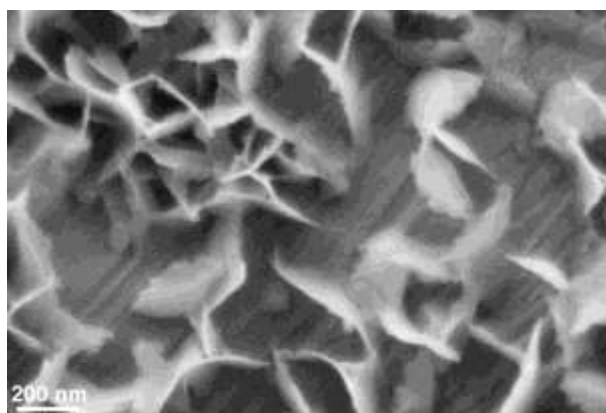
**Tabela 2:** Parametri lamel na površini  $\text{Al}_2\text{O}_3$  v odvisnosti od temperature hidrolize

$T$ [°C]	50	60	70	80	90
$n/\mu\text{m}^{-2}$	$158 \pm 12$	$125 \pm 8$	$103 \pm 4$	$72 \pm 3$	$51 \pm 4$
$2a/\text{nm}$	$135 \pm 18$	$159 \pm 23$	$188 \pm 23$	$223 \pm 23$	$259 \pm 41$
$b/\text{nm}$	$159 \pm 34$	$176 \pm 19$	$196 \pm 24$	$222 \pm 16$	$237 \pm 16$
$h_{\text{ef}}/\text{nm}$	8,0	8,2	8,9	8,4	7,4

Zaradi jedrnatosti je v tabeli podan tudi odgovor – efektivna debelina nanometrskih plasti (prevlek). Izračunamo pa jo takole ( $V_1$  je prostornina ene lamele (pol-elipse) z debelino  $d$ ):

$$h_{\text{ef}} = \frac{V}{S} = \frac{NV_1}{S} = nV_1 = n \frac{\pi abd}{2}$$

Na sliki R27 je prikazana SEM slika površine  $\text{Al}_2\text{O}_3$  s tako imenovano »bohemitno« nanometrsko prevleko iz lamel, katerih geometrija na prikazana na desni strani.

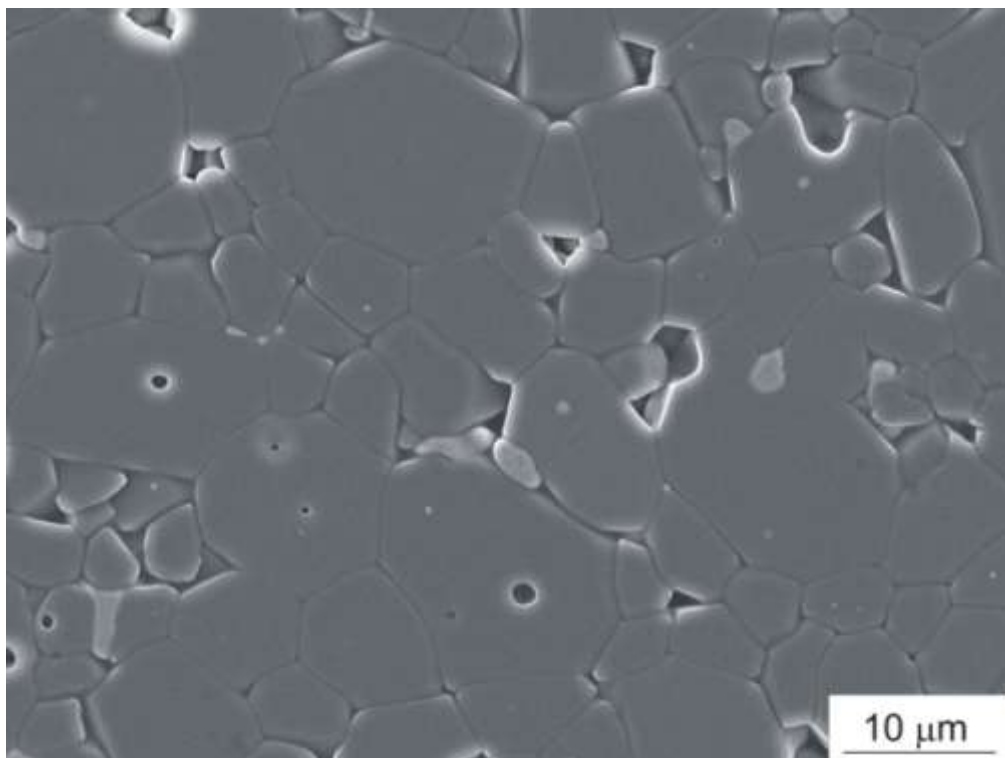


**Slika R27:** SEM slika bohemitne prevleke na površini  $\text{Al}_2\text{O}_3$  in pol-eliptična oblika ene lamele; iz članka: A. Kocjan, M. Ambrožič, T. Kosmač, Stereometric analysis of nanostructured boehmite coatings synthesized by aluminum nitride powder hydrolysis, *Ceramics International* **38**, št. 6, str 4853 (2012) ♠



### ♥ RAČUNSKI ZGLED 7.3

SEM poliranih površin polikristalnih snovi, npr. inženirske keramike, kjer so na sliki lepo vidne meje med kristalnimi zrn (slika R28), je primerno orodje za merjenje in izračun porazdelitve velikosti kristalnih zrn in s tem tudi povprečne velikosti zrn. 2D sliko namreč lahko statistično obdelamo, bodisi ročno (kar je zelo zamudno) ali pa z uporabo kakega programskega paketa, tako da glede na povečavo mikroskopa in fizično velikostjo objektov 2D na sliki izračunamo velikosti množice kristalnih zrn. Ker so zrna nepravilnih oblik (na SEM sliki jih največkrat vidimo kot mnogokotnike), si moramo izbrati smiselno merilo za njihovo velikost. Velikost zrna navadno opredelimo kot premer kroga z enako ploščino, kot jo ima zrno na sliki. Vendar pa preprost razmislek pove, da na takšen način (sklepanje na dejansko 3D kristalno strukturo iz 2D slik) sistematično izračunamo premajhne vrednosti velikosti zrn. Namreč, s poliranjem presekamo zrna na različnih mestih in ne vedno na mestih z največjim 2D prerezom, saj navadno ni neke prostorske urejenosti težišč kristalnih zrn. Statistični izračun z zrn (sicer nerealne) idealne krogelne oblike pokaže, da tako izmerimo/izračunamo za faktor  $4/\pi \approx 1,27$  premajhno vrednost povprečne velikosti zrn. Zato navadno vzamemo ta faktor kot popravek k izračunu velikosti 3D zrn. Izpeljite ta faktor, če sklepate, da imajo vsa zrna obliko krogle z enakim polmerom  $R$ , a v 2D sliki z enako verjetnostjo presekamo takšne krogle na različnih višinah.



**Slika R28:** SEM polirane površine keramike Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Temnejše luknje so pore.

Vzemimo kroglo s polmerom  $R$  in središčem v izhodišču koordinatnega sistema, tako da zanjo velja enačba  $x^2 + y^2 + z^2 = R^2$ . Kroglo lahko presekamo z vodoravno ravnino, vzporedno ravnini  $(x, y)$ , pri različnih koordinatah  $z$ . Zaradi simetrije je dovolj obravnavati le pozitivne vrednosti  $z$ :  $0 \leq z \leq R$ . Predpostavimo enakomerno zvezno porazdelitev naključne spremenljivke  $z$  na tem intervalu:  $p(z) = 1/R$ . Pri danem  $z$  je projekcija krogle na ravnino krog s polmerom  $r = (R^2 - z^2)^{1/2}$ . Povprečni polmer je potem:

$$\bar{r} = \frac{1}{R} \int_0^R r dz = \frac{1}{R} \int_0^R \sqrt{R^2 - z^2} \cdot dz$$

Uvedemo novo integracijsko spremenljivko  $\varphi$ :  $z = R \sin \varphi$ ,  $dz = R \cos \varphi \cdot d\varphi$ , uporabimo relacijo  $\cos^2 \varphi = (1 + \cos(2\varphi))/2$ , integriramo do konca in resnično dobimo rezultat  $(\pi/4)R$ , torej premajhno vrednost. ♠

#### ♥ RAČUNSKI ZGLED 7.4

Pri tunelskem elektronskem mikroskopu je razdalja med konico mikroskopa in površino vzorca tako majhna, da elektroni tunelirajo skozi klasično prepovedano območje (vakuum med površjem vzorca in konico) z merljivo verjetnostjo:

$$T = \exp \left[ -2 \cdot \frac{\sqrt{2m_e V}}{\hbar} \cdot d \right]$$

Pri tem je  $m_e$  masa elektrona,  $V$  potencialna energija prepovedanega območja, kinetično energijo v računu zanemarimo,  $d$  pa je razdalja med površino vzorca in konico. Potencialno energijo  $V$  ocenimo kot izstopno delo elektronov s površine materiala in vzamemo podatek  $V = 1$  eV, značilna razdalja pa je  $d = 1$  nm, medtem ko je globinska ostrina mikroskopa  $\Delta d = 0,01$  nm. Izračunajte prepustnost elektronov  $T$  pri podatku  $d = 1$  nm in relativno spremembo prepustnosti pri  $\Delta d = 0,01$  nm, kar je osnova za delovanje tega mikroskopa (pomembni so seveda tudi energijski pasovi elektronov na površini preiskovanega vzorca).

Prepustnost pri  $d = 1$  nm je po gornji enačbi  $T = 3,6 \cdot 10^{-5}$ . Relativno spremembo prepustnosti izračunamo z uporabo diferenciala:

$$\frac{\Delta T}{T} \approx \left| \frac{dT}{dd} \right| \cdot \frac{\Delta d}{T} = \frac{2\sqrt{2m_e V}}{\hbar} \cdot \Delta d = 10,2 \% \quad \spadesuit$$

♥ RAČUNSKI ZGLED 7.5

Pri vrstičnem tunnelskem mikroskopu danes uporabljamo zelo visok vakuum, kjer lahko dosežemo zelo nizko vrednost tlaka, okrog  $10^{-8}$  Pa (ultra visoki vakuum), lahko pa še bistveno manjše vrednosti. Ocenite povprečno prosto pot  $\langle l \rangle$  preostalih molekul plina pri tolikšnem tlaku, če upoštevate, da ena molekula zavzema efektivno prostornino (pred trkom z drugo molekulo)  $V_1 = \pi d^2 \langle l \rangle$ , kjer je  $d \approx 0,1$  nm efektivni premer molekule (velikost molekule nima direktnega klasičnega pomena, ampak je njeno merilo podano z interakcijo z drugimi molekulami). V oceni za efektivno prostornino vzamemo premer namesto polmera zato, ker morata biti središči molekul, ki se gibljeta po dveh bližnjih vzporednih tirih, vsaj en premer narazen. Uporabite plinsko enačbo  $p = nkT$ , kjer je  $p$  tlak plina,  $n$  število molekul na prostorninsko enoto,  $k$  Boltzmannova konstanta,  $T$  pa absolutna temperatura. Vzemite podatek  $T = 4$  K, ki je značilen za sisteme, hlajene s tekočim helijem.

Če v definiciji  $n = N/V$  vzamemo eno molekulo,  $N = 1$ , ki ji ustreza prostornina  $V_1$ , izpeljemo enačbo:

$$n = \frac{1}{V_1} = \frac{1}{\pi d^2 \langle l \rangle} \rightarrow \langle l \rangle = \frac{1}{\pi d^2 n} = \frac{kT}{\pi d^2 p} = 1,8 \cdot 10^5 \text{ m}$$

V fizikalnem smislu to pomeni, da je povprečna prosta pot molekul določena z velikostjo vakuumskega sistema, torej, pogostnost trkov med molekulami je povsem zanemarljiva s trki molekul ob stene vakuumske posode. Omenimo še, da je v natančnejšem računu povprečne proste poti molekule še korekcijski faktor  $2^{1/2}$  v imenovalcu izraza za  $\langle l \rangle$ , s katerim upoštevamo medsebojno relativno gibanje molekul plina. Vendar pa ta faktor pri oceni velikostnega reda za  $\langle l \rangle$  ni bistven.

Poučen vir: <https://cas.web.cern.ch/cas/Spain-2006/PDFs/Dylla-4.pdf>



## 8 ELEKTRONI V SNOVI

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.1

Razlika med sosednjima energijskima nivojema elektrona v vodikovem atomu je 0,306 eV. Katerima kvantnima stanjema ( $n$  in  $n + 1$ ) ustreza ta razlika?

Energijska razlika med nivojema z glavnima kvantnima številoma  $n$  in  $n + 1$  je:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = E_0 \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right)$$

kjer je  $E_0 = 13,6$  eV. Ker dobimo po preureditvi členov enačbo četrte stopnje za  $n$  (ki sicer ima analitično rešitev), je njeno direktno reševanje preveč dolgovozno. Zato raje poskušamo z majhnimi števili  $n$  od 1 dalje. Prava vrednost je  $n = 4$ .

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.2

Elektron v vodikovem atomu preide iz kvantnega stanja  $n = 4$  v nižje energijsko stanje, tako da odda foton z valovno dolžino 485,3 nm. Katero je nižje kvantno stanje?

Namesto, da bi upoštevali direktno zvezo med valovno dolžino in obema kvantnima številoma, bomo za vajo raje uporabili energijsko enačbo. Izračunajmo najprej energijo fotona:

$$E_f = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 2,55 \text{ eV}$$

Energijska razlika med nivojema z glavnima kvantnima številoma  $n$  in  $m < n$  je:

$$\Delta E = E_f = E_0 \cdot \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \rightarrow m = 1 / \sqrt{1/n^2 + E_f / E_0} = 2 \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.3

Valovna funkcija za elektron v vodikovem atomu sestoji iz radialnega in kotnega faktorja. Radialni del pove, kako se valovna funkcija spreminja z razdaljo  $r$  od vodikovega jedra, odvisen pa je od kvantnih števil  $n$  (glavno kvantno število) in  $l$  (kvantno število, povezano s

tirno vrtilno količino elektrona). Podajmo radialno funkcijo za tri stanja z najnižjimi kvantnimi števili (prvi indeks ustreza številu  $n$ , drugi pa  $l$ ):

$$R_{10}(x) = 2 \exp(-x)$$

$$R_{20}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-x/2) \cdot (1 - x/2)$$

$$R_{21}(x) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \exp(-x/2) \cdot x$$

Pri tem je  $x = r/r_0$ ,  $r_0$  pa je Bohrov radij. Vse radialne funkcije so normalizirane:

$$\int_0^{\infty} R_{nl}^2 x^2 dx = 1$$

Dodatni faktor  $x^2$  se v integralu pojavi zato, ker je prostorninski element po integraciji kotov (ta element ustreza tanki krogelni lupini s polmerom  $r$  in debelino  $dr$ ) enak  $dV = 4\pi r^2 dr$ . Dodatni faktor  $4\pi$  pa je upoštevan že v pravilni normalizaciji kotnega dela celotne valovne funkcije. Za vse tri funkcije izračunajte najverjetnejši polmer  $r$ ; temu ustreza  $x$ , kjer ima funkcija  $x^2 R_{nl}^2$  maksimum.

Pokažimo račun le za  $R_{10}$ :

$$y = x^2 R_{10}^2 = 4x^2 \exp(-2x)$$

$$\frac{dy}{dx} = 8[x - x^2] \exp(-2x) = 0$$

Rešitev  $x = 0$  ustreza minimumu; to je logično: verjetnostna gostota (glede na  $r$ ), da najdemo elektron v jedru, je nič. Tu nas zanima maksimum:  $x = 1$  ali  $r = r_0$ . Podobno ugotovimo, da funkciji  $R_{20}$  ustreza najverjetnejši polmer  $r = 2r_0$  (po krajšanju z  $x$  imamo sicer enačbo tretje stopnje za  $x$ , a hitro uganemo rešitev  $x = 2$ ). Funkciji  $R_{21}$  pa ustreza  $r = 4r_0$  (da je to res maksimum, preverimo z računom drugega odvoda  $dy^2/dx^2$ , ki je res negativen pri  $x = 4$ ). Povečanje najverjetnejšega polmera v primerjavi s funkcijo  $R_{20}$  je povezano s pozitivno tirno vrtilno količino pri  $l = 1$ . ♠

#### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.4

Kotni del valovne funkcije za elektron v vodikovem atomu (pa tudi v splošnem za centralno simetrični potencial) pri določenih kvantnih številih  $l$  in  $m$  sestoji iz dveh faktorjev:  $Y_{lm}(\theta, \varphi) = C \exp(im\varphi) f_{lm}(\theta)$ .  $C$  je normalizacijska konstanta. Tu nas zanima le funkcija kota  $\theta$  glede

na izbrano os v prostoru. Obravnavajmo le primer  $m = 0$ ; tedaj je  $f_{l0}(\theta) = P_l(\cos \theta)$ ,  $P_l(x)$  pa je Legendrov polinom stopnje  $l$ . Zapišimo jih nekaj:

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

Obravnavajte ničle ustreznih funkcij  $Y_{l0}(\theta, \varphi)$ .

Faktor, ki vsebuje kot  $\varphi$ , nima ničel. Zato so ničle celotnih funkcij  $Y_{l0}$  določene z ničlami Legendrovih polinomov. Funkcija  $Y_{00}$  nima ničel. Funkcija  $Y_{10}$  je zaradi polinoma  $P_1(x)$  enaka nič pri  $x = 0$ , čemur ustreza kot  $\theta = \pi/2$ . Funkcija  $Y_{20}$  je nič pri  $x^2 = 1/3$ , čemur ustrežata kota  $54,74^\circ$  in  $125,26^\circ$ . Celotna valovna funkcija za vodikov atom, vključno z radialnim delom, je torej enaka nič pri določenih vrednostih polmera  $r$  in kota  $\theta$ , čim višja so kvantna števila, tem več je takšnih ničel. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.5

Potencial pri šibkih kemijskih vezeh, ki kvalitativno spominja na sliko 63 v skripti predavanj, v preprostem Lennard-Jonesovem modelu opišemo z naslednjo funkcijo:

$$V(r) = \varepsilon \cdot \left[ \left(\frac{a}{r}\right)^{12} - \left(\frac{a}{r}\right)^6 \right]$$

kjer je  $\varepsilon$  značilna energija,  $a$  pa značilna razdalja. Poiščite minimum potenciala. Kje je potencial enak nič? Zapišite asimptotično vedenje potenciala za  $r \rightarrow 0$  in  $r \rightarrow \infty$ .

Minimum izračunamo z zahtevo  $dV/dr = 0$ . Temu ustreza razdalja

$$r_0 = a \cdot \sqrt[6]{2}$$

in potencial

$$V_0 = -\frac{\varepsilon}{4}$$

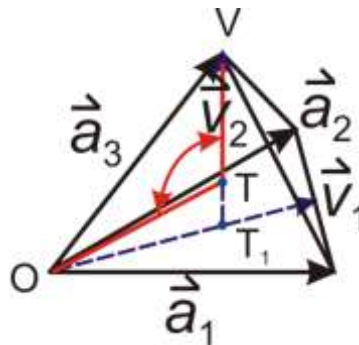
Potencial je enak nič pri  $r = a$ . Pri majhnih razdaljah  $r$  lahko zanemarimo drugi člen v oglatem oklepaju v izrazu  $V(r)$ , pri velikih  $r$  pa zanemarimo prvi člen. Asimptotično vedenje funkcije  $V(r)$  je torej:

$$r \rightarrow 0 \Rightarrow V(r) \approx \varepsilon \cdot \left(\frac{a}{r}\right)^{12}$$

$$r \rightarrow \infty \Rightarrow V(r) \approx -\varepsilon \cdot \left(\frac{a}{r}\right)^6 \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.6

Ogljik (kot diamant) in dva ključna polprevodniška elementa, silicij in germanij, imajo diamantno kristalno strukturo. Relativne lege najbližjih atomov (zaradi konkretnosti vzemimo ogljikove atome, C) prikažemo s tetraedrom, tako da so štirje C-atomi v njegovih ogliščih, eden pa je v masnem središču tetraedra (na kratko težišču T), to je na četrtini telesne višine (v smeri od osnovne ploskve k vrhu piramide V). Izračunajte kot med sosednjimi C–C kovalentnimi vezmi! Pomagajte si s tremi vektorji, s katerimi lahko opišemo tetraeder. Ti trije vektorji se npr. začnejo v enem od oglišč spodnje ploskve in gredo po treh robovih tetraedra, ki izhajajo iz tega oglišča (slika R29).



**Slika R29:** Tetraeder z vezmi C–C; z rdečo ukrivljeno dvojno puščico je označen kot, ki ga računamo.

Vsi trije vektorji na sliki,  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  in  $\mathbf{a}_3$ , imajo dolžino  $a$ , kot med dvema vektorjema pa je  $60^\circ$ . Pri računu si bomo pomagali še z vektorjema  $\mathbf{v}_1$  in  $\mathbf{v}_2$ : prvi gre pa višini trikotnika – spodnje ploskve in je enak  $\mathbf{v}_1 = (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/2$ , vektor  $\mathbf{v}_2$  pa gre po telesni višini tetraedra. Ker gre telesna višina od težišča  $T_1$  spodnjega trikotnika, le-to pa se nahaja na  $2/3$  ploskovne višine spodnjega trikotnika (gledano od oglišča O proti nasprotni stranici), izračunamo vektor  $\mathbf{v}_2$  na telesni višini takole:  $\mathbf{v}_2 = \mathbf{a}_3 - (2/3)\mathbf{v}_1 = \mathbf{a}_3 - (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3$ . Kot med C–C vezema izračunamo kakor kot med vektorjema  $\mathbf{x} = \mathbf{TV} = 3\mathbf{v}_2/4$  in  $\mathbf{y} = \mathbf{TO} = -(\mathbf{2v}_1/3 + \mathbf{v}_2/4)$ ; da slika ne bi bila preobložena, vektorja  $\mathbf{x}$  in  $\mathbf{y}$  na njej nismo posebej označili, ustrežata pa jima odebeljeni rdeči črti. Izrazimo vektorja  $\mathbf{x}$  in  $\mathbf{y}$  z vektorji  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  in  $\mathbf{a}_3$ :  $\mathbf{x} = (3\mathbf{a}_3 - (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2))/4$ ,  $\mathbf{y} = -(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)/4$ . Izračunajmo velikosti vektorjev  $\mathbf{x}$  in  $\mathbf{y}$ , tako da upoštevamo npr.  $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1 = a^2$  in  $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = a^2 \cos 60^\circ = a^2/2$  in podobno za druge kombinacije treh vektorjev:

$$x = \sqrt{\bar{x} \cdot \bar{x}} = a \cdot \frac{\sqrt{6}}{4}$$

$$y = \sqrt{\bar{y} \cdot \bar{y}} = a \cdot \frac{\sqrt{6}}{4}$$

Vektorja seveda morata biti enako dolga, saj je njuna velikost razdalja med sosednjimi C atomi. To je bil neke vrste test, da je osrednji atom res na četrtini višine telesne diagonale. Nazadnje izračunajmo še kot med vektorjema:

$$\varphi = \arccos \frac{\bar{x} \cdot \bar{y}}{xy} = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109,5^\circ \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.7

Telesno centrirano kubično kristalno strukturo (*bcc* = *body centered cubic*) pri mnogih elementarnih kovinah (npr. bariju, kromu, natriju, volframu in železu) predstavimo z osnovno celico – kocko, ki ima atome v svojih ogliščih, razen tega pa še dodatni atom v središču kocke. Kocka ima sicer 8 atomov v ogliščih, hkrati pa si vsak atom v oglišču deli 8 sosednjih kock, kar pomeni efektivno 1 ogliščni atom na celico. Temu prištejemo središčni atom, tako da ena celica vsebuje po 2 enaka atoma. Govorimo o osnovni kristalni celici z bazo, ker je v njej več kot en atom. Na en sam atom tako pride efektivna prostornina  $a^3/2$ . Namesto tega lahko najdemo takšne 3 mrežne vektorje  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  in  $\mathbf{a}_3$  (ki si med seboj niso pravokotni), da bo ustrezna celica (to je na te tri vektorje napet paralelepiped) vsebovala ravno po en atom. Hkrati pomeni to, da če se premikamo po kristalni mreži, zgrajeni iz teh treh vektorjev, moramo priti do vseh atomov v kristalu. Izbira takšnih treh vektorjev ni enolična. Izkaže se, da je primerna izbira tudi tale:  $\mathbf{a}_1 = (a/2)(-1, 1, 1)$ ,  $\mathbf{a}_2 = (a/2)(1, -1, 1)$ ,  $\mathbf{a}_3 = (a/2)(1, 1, -1)$ . Tako lahko pridemo od enega ogliščnega atoma, ki mu damo koordinate (0, 0, 0) do središčnih atomov v treh sosednjih kockah. Dokažite, da s takšno izbiro mrežnih vektorjev res dobimo primitivno celico, to je celico, na katero pride po en atom.

Dokaz je v tem, da je prostornina takšnega paralepipeda, napetega na te tri vektorje, res enaka zgoraj omenjeni vrednosti  $a^3/3$ . Prostornino izračunamo z mešanim (prevdoskalarim) produktom vektorjev:

$$V = (\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \bar{\mathbf{a}}_3) \equiv \bar{\mathbf{a}}_1 \cdot (\bar{\mathbf{a}}_2 \times \bar{\mathbf{a}}_3) = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix}$$

Pri računu prostornine celice e si torej pomagamo z determinante matrike  $3 \times 3$ , le da vzamemo njeno absolutno vrednost, če je slučajno negativna. Nadaljujmo:



$$V = \frac{a^3}{8} \cdot \begin{vmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.8

Ploskovno centrirano kubično kristalno strukturo (*fcc* = *face centered cubic*) pri mnogih elementarnih kovinah (npr. aluminiju, bakru, kalciju, srebru in zlatu) predstavimo z osnovno celico – kocko, ki ima atome v svojih ogliščih, razen tega pa še po en atom v središču vsake ploskve kocke. Kot pri strukturi *bcc* je en ogliščni atom na celico. Temu prištejemo 6 atomov na ploskvah, vendar pa si vsak takšen atom deli dve kocki, tako da pridejo le po 3 ploskovni atomi na kocko. Tako ena celica vsebuje po 4 enake atome in na en sam atom pride efektivna prostornina  $a^3/4$ . Namesto tega lahko najdemo takšne 3 mrežne vektorje  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  in  $\mathbf{a}_3$ , da bo ustrezna celica vsebovala ravno po en atom. Primerna izbira je tale:  $\mathbf{a}_1 = (a/2)(0, 1, 1)$ ,  $\mathbf{a}_2 = (a/2)(1, 0, 1)$ ,  $\mathbf{a}_3 = (a/2)(1, 1, -0)$ . Dokažite, da s takšno izbiro mrežnih vektorjev res dobimo primitivno celico.

$$V = \frac{a^3}{8} \cdot \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.9

Dokažite, da je recipročna mreža recipročne mreže spet direktna (prvotna) Bravaisova mreža. Natančneje pomeni naloga naslednje. Iz mrežnih vektorjev  $\mathbf{a}_i$ ,  $i = 1 - 3$ , konstruiramo vektorje recipročne mreže,  $\mathbf{b}_i = 2\pi \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k / (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ , kjer je trojica indeksov  $ijk = 123$  in obe ciklični permutaciji. Z  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  označujemo na kratko mešani (psevdoskalarni) produkt treh vektorjev  $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ . Če zdaj iz vektorjev  $\mathbf{b}_i$  na podoben način konstruiramo nove vektorje  $\mathbf{c}_i$ , se izkaže:  $\mathbf{c}_i = \mathbf{a}_i$ . To moramo dokazati.

Zapišimo definicijo vektorjev  $\mathbf{b}_i$  na dolgo:

$$\bar{\mathbf{b}}_1 = 2\pi \frac{\bar{\mathbf{a}}_2 \times \bar{\mathbf{a}}_3}{(\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \bar{\mathbf{a}}_3)}$$

$$\bar{\mathbf{b}}_2 = 2\pi \frac{\bar{\mathbf{a}}_3 \times \bar{\mathbf{a}}_1}{(\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \bar{\mathbf{a}}_3)}$$

$$\bar{b}_3 = 2\pi \frac{\bar{a}_1 \times \bar{a}_2}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)}$$

Pripravimo zvezo, ki jo bomo potrebovali v nadaljnjem računu:

$$(\bar{a}_3 \times \bar{a}_1) \times (\bar{a}_1 \times \bar{a}_2) = (\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3) \bar{a}_1 \quad (*)$$

in se jo da preveriti npr. direktno z računom po komponentah vektorjev. Da je vektor na desni strani enačbe res v smeri vektorja  $\mathbf{a}_1$ , pa je razvidno geometrijsko, saj iščemo vektorski produkt (srednji  $\times$ ) dveh vektorjev, ki sta oba pravokotna na  $\mathbf{a}_1$  (zaradi vektorskih produktov z  $\mathbf{a}_1$  v obeh oklepajih).

Nadalje izračunajmo mešani skalarni produkt vektorjev  $\mathbf{b}_i$ :

$$(\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3) = \left[ \frac{2\pi}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)} \right]^3 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3) \cdot [(\bar{a}_3 \times \bar{a}_1) \times (\bar{a}_1 \times \bar{a}_2)]$$

$$(\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3) = \left[ \frac{2\pi}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)} \right]^3 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3) \cdot [(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3) \bar{a}_1]$$

$$(\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3) = \left[ \frac{2\pi}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)} \right]^3 \cdot (\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3) (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3) \cdot \bar{a}_1$$

Zadnji faktor,  $(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot \mathbf{a}_1$  je spet mešani produkt  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ , zato je nazadnje:

$$(\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)} \quad (**)$$

kar je ena od znanih relacij v teoriji kristalnih trdnih snovi. Mi pa nadaljujmo; dovolj je izračunati vektor  $\mathbf{c}_1$ , saj je izračun drugih dveh analogen in ga izvedemo samo s permutacijo indeksov:

$$\bar{c}_1 = 2\pi \frac{\bar{b}_2 \times \bar{b}_3}{(\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3)}$$

$$\bar{c}_1 = \frac{2\pi}{(\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3)} \cdot \left[ 2\pi \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)} \right] \times \left[ 2\pi \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)} \right]$$

Upoštevajmo še zvezi (\*) in (\*\*), pa res ugotovimo  $\mathbf{c}_1 = \mathbf{a}_1$ . Podobno velja  $\mathbf{c}_2 = \mathbf{a}_2$  in  $\mathbf{c}_3 = \mathbf{a}_3$ . Konkreten zgled: recipročna mreža kubične strukture *bcc* je *fcc*, recipročna mreža *fcc* pa je spet *bcc*. To lahko preveri bralec sam z zgoraj omenjenimi mrežnimi vektorji za obe strukturi.



### ♥ RAČUNSKI ZGLED 8.10

Pri aluminiju je ena od razdalj sosednjih mrežnih ravnin enaka  $d = 0,405$  nm. Na aluminijev kristal posvetimo z rentgensko svetlobo valovne dolžine  $0,3$  nm. Kolikšen mora biti kot vpadnega žarka glede na kristalno ravnino, da v odbitem žarku dobimo ojačitev prvega (drugega, tretjega...) reda?

Iz Braggove enačbe  $2d \sin \theta = \lambda$  izračunamo:  $\theta = \arcsin(\lambda/(2d)) = 21,74^\circ$ . Pri drugem redu ( $N = 2$ ) velja  $2d \sin \theta = 2\lambda \rightarrow \theta = \arcsin(\lambda/d) = 47,79^\circ$ . Višjih redov pa ni, ker pri njih Braggova enačba ne more biti izpolnjena, saj sinusna funkcija ne more imeti večje vrednosti od 1. ♠

## 9 KOVINE, POLPREVODNIKI IN IZOLATORJI

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 9.1

Baker ima Fermijevo energijo 7,00 eV. Izračunajte število prevodnih elektronov na enoto prostornine. Rezultat preverite še drugače, iz naslednjih podatkov: valenca je 1, gostota je  $8,96 \text{ kg/dm}^3$ , atomsko masno število je  $A = 63,55$ .

Iz zveze med Fermijevim valovnim vektorjem in Fermijevo energijo najprej izračunamo Fermijev valovni vektor:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} \rightarrow k_F = \frac{\sqrt{2m_e E_F}}{\hbar} = 1,36 \cdot 10^{10}/\text{m}$$

Pri tem je  $m_e$  masa elektrona. Gostota prevodnih elektronov je:

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = 8,5 \cdot 10^{28}/\text{m}^3$$

Izračunamo jo tudi drugače:

$$n = \frac{ZN_A \rho}{M} = 8,5 \cdot 10^{28}/\text{m}^3$$

Pri tem je  $N_A$  Avogadrovo število, kilomolska masa  $M$  pa je številsko enaka atomskemu masnemu številu  $A$ , le da ima enoto kg/kmol. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 9.2

Kolikšna je povprečna kinetična energija elektronov v kovini v Sommerfeldovem modelu v primerjavi s Fermijevo energijo? Na osnovi tega zapišite natančnejše merilo za efektivno (povprečno) hitrost elektronov namesto Fermijeve hitrosti. Kolikšno napako bi naredili, če bi namesto te hitrosti, izračunane po kvantnomehanskih načelih, uporabili termično hitrost iz klasične statistične termodinamike?

Najprej se spomnimo, kako smo izračunali število prevodnih elektronov v kovini z upoštevanjem vseh kvantnih stanj do Fermijevega valovnega vektorja:

$$N = \frac{V}{4\pi^3} \iiint dk_x dk_y dk_z = \frac{V}{4\pi^3} \cdot 4\pi \cdot \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{Vk_F^3}{3\pi^2}$$

Podobno izračunamo celotno kinetično energijo vseh prevodnih elektronov, tako da pri integriranju dodamo kot faktor kinetično energijo, odvisno od valovnega vektorja  $k$ :

$$E_{\text{kin}} = \frac{V}{4\pi^3} \cdot 4\pi \cdot \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \cdot k^2 dk = \frac{V\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m_e}$$

Kinetična energija, preračunana na en prevodni elektron, je:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle \equiv \frac{E_{\text{kin}}}{N} = \frac{3\hbar^2 k_F^2}{10m_e}$$

Primerjajmo jo s Fermijevo energijo

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e}$$

in ugotovimo:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{3}{5} E_F$$

Ker je kinetična energija sorazmerna s kvadratom hitrosti, lahko definiramo povprečno hitrost elektronov takole:

$$v_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{3}{5}} v_F \approx 0,77 v_F$$

Oznaka RMS pomeni »root mean square«, kar pomeni koren iz povprečja kvadrata hitrosti. Povprečna hitrost v navadnem pomenu besede je definirana nekoliko drugače, vendar se tu ni treba spuščati v takšne podrobnosti. Na podoben način definiramo klasično termično hitrost  $v_T$ , ki pa je odvisna od temperature. Po ekviparticijskem teoremu velja:

$$\frac{1}{2} m_e v_T^2 = \frac{3}{2} kT \rightarrow v_T = \sqrt{\frac{3kT}{m_e}}$$

Za zgled vzemimo spet baker, ki smo mu že izračunali Fermijevo hitrost. Primerjajmo hitrosti pri temperaturi 300 K:  $v_{\text{RMS}} = 1,22 \cdot 10^6$  m/s,  $v_T = 1,17 \cdot 10^5$  m/s; napaka je en velikostni red.



### ♥ RAČUNSKI ZGLED 9.3

Gostoto stanj, to je število prevodnih elektronov v kovini na energijsko enoto, podaja funkcija:

$$g = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{(2m_e)^{3/2}}{\hbar^3} \cdot \sqrt{E}$$

Koliko je prevodnih elektronov v  $1 \text{ cm}^3$  aluminija pri Fermijevi energiji  $11,7 \text{ eV}$  v energijskem intervalu  $0,025 \text{ eV}$ , ki ustreza termični energiji pri sobni temperaturi?

Število prevodnih elektronov v danem energijskem intervalu je:

$$N = g \cdot \Delta E = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{(2m_e)^{3/2}}{\hbar^3} \cdot \sqrt{E} \cdot \Delta E = 5,9 \cdot 10^{20} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 9.4

Fermijevo porazdelitveno funkcijo, ki velja za protone, elektrone, nevtrone in druge fermione, zapišemo kot  $f(x) = 1/(e^x + 1)$ , kjer navadno vzamemo za brezdimenzijsko neodvisno spremenljivko količnik  $x = (E - \mu)/(kT)$ . Tu so:  $E$  energija,  $\mu$  kemijski potencial,  $k$  Boltzmannova konstanta in  $T$  absolutna temperatura. Funkcija  $f(x)$  je monotonno padajoča. Najprej razvijte  $f(x)$  v Taylorjevo vrsto okrog  $x = 0$ , potem pa do tretjega reda  $x^3$  natančno izračunajte  $f$  za štiri primere:  $E = \mu \pm kT$ ,  $E = \mu \pm 2kT$ .

Pojdimo postopno. Najprej  $f(0) = 1/2$ . Potem pripravimo nekaj odvodov funkcije. Namesto, da bi se »mučili« z višjimi odvodi, s katerimi je precej dela, raje z nekoliko predelave zapišemo funkcijo drugače:

$$f = \frac{1}{e^x + 1} = \frac{1}{2} + \left( \frac{1}{e^x + 1} - \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} + \frac{1 - e^x}{2(e^x + 1)}$$

Pomnožimo števec in imenovalce drugega ulomka s faktorjem  $\exp(-x/2)$ , pa pridemo do hiperboličnega tangensa v drugem členu:

$$f = \frac{1}{2} \left( 1 - \tanh \frac{x}{2} \right) = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\exp(x/2) - \exp(-x/2)}{\exp(x/2) + \exp(-x/2)} \right]$$

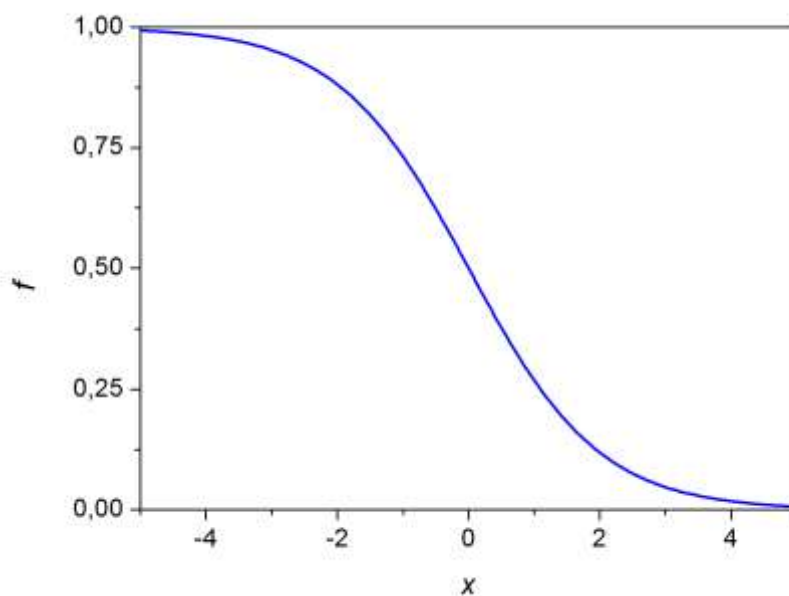
Hiperbolični tangens pišemo tudi kot količnik hiperboličnega sinusa in kosinusa:  $\tanh(x) = \sinh(x)/\cosh(x)$ . Njuna odvoda sta še preprostejša kot pri običajnem sinusu in kosinusu:  $(d/dx)(\sinh(x)) = \cosh(x)$ ,  $(d/dx)(\cosh(x)) = \sinh(x)$ , zato ni treba biti toliko pozoren na predznake. Hkrati vidimo, da je  $\tanh$  liha funkcija, zato so v Taylorjevi vrsti prisotne samo lihe potence  $x$ . Vzemimo kot posredno funkcijo za sedaj samo  $y(x) = \tanh(x)$  ter zapišimo nekaj njenih odvodov, posebej tudi v točki  $x = 0$ . Če upoštevamo še  $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$  ter  $\cosh 0 = 1$ ,  $\sinh 0 = 0$ , dobimo:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{\cosh^2 x} \rightarrow \frac{dy}{dx}(0) = 1$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = -2 \frac{\sinh x}{\cosh^3 x} \rightarrow \frac{d^2 y}{dx^2}(0) = 0$$

$$\frac{d^3 y}{dx^3} = \frac{4}{\cosh^2 x} - \frac{6}{\cosh^4 x} \rightarrow \frac{d^3 y}{dx^3}(0) = -2$$

Potem zapišemo razvoj za celotno Fermijevo funkcijo:  $f(x) = (1/2)[1 - (x/2) + (x/2)^3/3 + \dots]$ . Če premaknemo izhodišče koordinatnega sistema za  $y = 1/2$  navzgor, vidimo, da je  $f(x)$  liha funkcija glede na točko  $(0, 1/2)$ . Zato lahko zgoraj zahtevane vrednosti funkcije zapišemo v simetrični obliki. Pri premiku energije za  $\pm kT$  in  $\pm 2kT$  je  $x = \pm 1$  in  $\pm 2$ . Torej velja:  $f(\pm 1) = [1 - (\pm 1/2)]/2 = 0,27$  in  $0,73$ ;  $f(\pm 2) = [1 - (\pm 2/3)]/2 = 1/6$  in  $5/6$ . Pri  $x = \pm 1$  imamo še zelo dobro ujemanje približnega izračuna z natančno vrednostjo Fermijeve funkcije, pri  $x = \pm 2$  pa ne več in ne bi škodilo še več členov Taylorjeve vrste. Graf funkcije je prikazan na sliki R30.



**Slika R30:** Graf Fermijeve porazdelitvene funkcije: funkcija se na obeh straneh hitro približuje limitnima vrednostma 1 in 0. ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 9.5

Gostota prevodnih elektronov v bakru je  $n = 8,5 \cdot 10^{28}/\text{m}^3$ , specifična upornost pa je  $1,56 \mu\Omega \cdot \text{cm}$ . Kolikšen je relaksacijski čas? Kolikšna je povprečna prosta pot elektrona med dvema trkoma z ioni kristalne mreže, če za hitrost gibanja elektronov vzamemo Fermijevo hitrost?

Enačba za relaksacijski čas  $\tau$  je:

$$\tau = \frac{m}{\rho_R n e_0^2}$$

kjer specifično upornost označimo z  $\rho_R$ , da simbol razlikujemo od gostote  $\rho$ ;  $m$  je masa elektron,  $e_0$  pa osnovni naboj. Izračunamo  $\tau = 2,7 \cdot 10^{-14}$  s. Pri računu Fermijeve hitrosti uporabimo Fermijev valovni vektor iz prejšnjega računskega zгледа. Gibalna količina elektronov s tolikšnim valovnim vektorjem (to so najhitrejši elektroni) je:

$$p = \hbar k_F = m v_F \rightarrow v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = 1,57 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

Značilna prosta pot elektrona je potem  $\langle l \rangle = v_F \tau = 42 \text{ nm}$  in je za dva velikostna reda večja od razdalje med najbližjimi atomi v kristalni mreži. Že ta podatek kaže na to, da se elektroni ne gibljejo preprosto kot klasični delci od atoma do atoma v mreži; v tem primeru bi bila namreč povprečna prosta pot velikostnega reda medatomske razdalje. ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 9.6

Bakreno žico s prerezom  $2 \text{ mm}^2$  in dolžino  $4 \text{ m}$  priključimo na napetost  $60 \text{ V}$ . S kolikšno usmerjeno hitrostjo v nasprotni smeri električnega toka potujejo prosti elektroni po žici? Specifična upornost bakra je  $17,5 \text{ n}\Omega \text{ m}$ , število prevodnih elektronov na prostorninsko enoto pa  $8,5 \cdot 10^{28}/\text{m}^3$ . Koliko časa potrebuje v povprečju elektron, da pride od enega do drugega konca žice? Koliko časa po vklopu vgrajenega stikala pa je treba, da se npr. prižge kontrolna žarnica?

Podatki:

$$L = 4 \text{ m}$$

$$S = 2 \text{ mm}^2$$

$$U = 60 \text{ V}$$

$$\zeta = 17,5 \text{ n}\Omega \text{ m}$$



$$n = 8,5 \cdot 10^{28} / \text{m}^3$$

-----

$$v = ?$$

Kombinirajmo več enačb,  $j = I/S = ne_0v$ ,  $I = U/R$  in  $R = \zeta L/S$ , ter izračunajmo hitrost v enem koraku:

$$v = \frac{j}{ne_0} = \frac{I}{Sne_0} = \frac{U}{RSne_0} = \frac{SU}{\zeta LSne_0} = \frac{U}{\zeta Lne_0} = 63 \text{ mm/s}$$

Podatka za  $S$  sploh nismo potrebovali. Čas potovanja elektrona od enega do drugega konca žice je:  $t = L/v = 63,5$  s. Čas, da zasveti žarnica, pa ni povezan s hitrostjo potovanja elektronov, temveč z vzpostavitvijo električnega polja po celi žici. Ker se širi elektromagnetna motnja največ s svetlobno hitrostjo v vakuumu, ocenimo ta čas takole:  $t = L/c = 13,3$  ns (nanosekunde!). ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 9.7

Meritve ciklotronske frekvence v magnetnem polju pokažejo, da je v natriju efektivna masa elektrona:  $m^* = 1,2 m_e$ . Kolikšna je ciklotronska frekvenca elektronov v polju 1 T? Kolikšen je njihov obhodni čas? Kolikšen je polmer kroženja, če za hitrost elektrona vzamemo Fermijevo hitrost? Fermijev valovni vektor za natrij je  $9,2 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$ .

Frekvenco navadno označujemo s simbolom  $\nu$ , pogosto pa se v tehniki in znanosti uporablja tudi oznaka  $f$ . Tu bomo uporabili simbol  $f$ :

$$f = \frac{e_0 B}{2\pi m^*} = 23,3 \text{ MHz}$$

Obhodni čas je  $t_0 = 1/f = 43$  ns. Podani Fermijev valovni vektor je bil izračunan direktno iz podatka za gostoto prevodnih elektronov in je neodvisen od efektivne mase elektrona. Ker se v enačbi za ciklotronsko frekvenco pojavi efektivna masa elektrona, je na prvi pogled tudi polmer kroženja najhitrejših elektronov (ki imajo Fermijevo hitrost) odvisen od  $m^*$ . Kratek razmislek pa pokaže, da ni tako. Pri enačbi kroženja elektrona v magnetnem polju, kjer smo poistovetili centripetalno in magnetno silo, smo ugotovili:  $m^*v^2/r = e_0Bv \rightarrow m^*v = e_0Br$ . Na levi strani zadnje enačbe je gibalna količina elektrona. Zato za elektrone s Fermijevim valovnim vektorjem velja:

$$p_F = \hbar k_F = m^* v_F = e_0 Br \rightarrow r = \frac{\hbar k_F}{e_0 B} = 38 \text{ } \mu\text{m} \quad \spadesuit$$

♥ RAČUNSKI ZGLED 9.8

Dve žici iz različnih kovin z enakim prerezom, eno z dolžino  $l_1$  in specifično upornostjo  $\zeta_1$ , drugo z dolžino  $l_2$  in specifično upornostjo  $\zeta_2$ , spojimo tako, da je upor spoja zanemarljiv (spojimo konca žic, tako da je skupna dolžina enaka  $l_1 + l_2$ ). Spojeno žico priključimo na napetost  $U$ . Kolikšne so vrednosti napetosti, vzdolžnega električnega polja in usmerjene hitrosti gibanja elektronov v obeh kosih celotne žice in kolikšna so razmerja teh parov vrednosti? Znani sta tudi gostoti prevodnih elektronov  $n_1$  in  $n_2$  v obeh materialih.

Pomagamo si lahko s tem, da najprej izrazimo skupni upor žice, ali pa tako, da je razmerje napetosti obeh kosov enako razmerju uporov. Izberimo način reševanja naloge s skupnim uporom:

$$R = R_1 + R_2 = \frac{\zeta_1 l_1 + \zeta_2 l_2}{S}$$

Električni tok skozi žico je:

$$I = \frac{U}{R} = \frac{US}{\zeta_1 l_1 + \zeta_2 l_2}$$

Napetosti kosov sta:

$$U_1 = IR_1 = \frac{U\zeta_1 l_1}{\zeta_1 l_1 + \zeta_2 l_2}$$

$$U_2 = IR_2 = \frac{U\zeta_2 l_2}{\zeta_1 l_1 + \zeta_2 l_2}$$

tako da je njuno razmerje

$$\frac{U_2}{U_1} = \frac{\zeta_2 l_2}{\zeta_1 l_1}$$

Jakosti električnega polja sta:

$$E_1 = \frac{U_1}{l_1} = \frac{U\zeta_1}{\zeta_1 l_1 + \zeta_2 l_2}$$

$$E_2 = \frac{U_2}{l_2} = \frac{U\zeta_2}{\zeta_1 l_1 + \zeta_2 l_2}$$

tako da je njuno razmerje

$$\frac{E_2}{E_1} = \frac{\zeta_2}{\zeta_1}$$

Iz enačbe za gostoto toka,  $j = I/S = e_0 n v$ , ki je enaka v obeh kosih žice, izračunamo še obe potovalni hitrosti elektronov:

$$v_1 = \frac{I}{S e_0 n_1} = \frac{U}{(\zeta_1 l_1 + \zeta_2 l_2) e_0 n_1}$$

$$v_2 = \frac{I}{S e_0 n_2} = \frac{U}{(\zeta_1 l_1 + \zeta_2 l_2) e_0 n_2}$$

Njuno razmerje je:  $v_2/v_1 = n_1/n_2$ . ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 9.9

Po Drudejevem (klasičnem, poenostavljenem) modelu prevajanja električnega in toplotnega toka s prostimi elektroni v kovinah velja za razmerje med toplotno prevodnostjo  $\kappa$  in električno prevodnostjo  $\sigma$  (oziroma specifično upornostjo  $\rho$ ) v odvisnosti od temperature  $T$  preprosta zveza:

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\kappa \rho}{T} = \frac{3}{2} \left( \frac{k}{e_0} \right)^2$$

kjer je  $k$  Boltzmannova konstanta. Po tej enačbi naj bi bilo razmerje na levi strani, ki ga imenujemo Lorenzovo število (a to ni pravo matematično število, saj ima fizikalno enoto), enako za vse kovine in pri vseh temperaturah. Najprej izračunajte količino na desni strani enačbe. Potem preverite za nekaj kovin in ustreznih eksperimentalnih podatkov v naslednji tabeli, ali zapisana enačba drži.

Kovina	$T = 273 \text{ K}$		$T = 373 \text{ K}$	
	$\rho/(\mu\Omega \text{ cm})$	$\kappa/(\text{W/cm K})$	$\rho/(\mu\Omega \text{ cm})$	$\kappa/(\text{W/cm K})$
Cu	1,56	3,85	2,24	3,82
Fe	8,9	0,8	14,7	0,73
Al	2,45	2,38	3,55	2,30

Količina na desni strani enačbe, ki naj bi ustrezala Lorenzovemu številu, ima vrednost  $1,11 \cdot 10^{-8} \text{ W } \Omega/\text{K}^2$ . Iz podatkov izračunana Lorenzova števila pa so približno dvakrat večja: 2,20 in 2,09 za baker, 2,61 in 2,88 za železo ter 2,14 in 2,19 za aluminij (vse v enotah  $10^{-8} \text{ W } \Omega/\text{K}^2$ , številke so po vrsti za obe temperaturi). Te vrednosti so si tudi za druge kovine podobne, čeprav ne enake, in to je bilo že dolgo časa znano kot Wiedemann-Franz(ov) zakon. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 9.10

Po Drudejevem modelu električne prevodnosti kovin je verjetnost, da naključno izbrani elektron od naključnega trenutka (ki ga označimo z začetnim časom  $t = 0$ ) dalje trči v zelo kratkem času  $dt$  z ionom, enaka  $dP = dt/\tau$ , kjer je  $\tau$  relaksacijski čas. Ta verjetnost je neodvisna od tega, kaj se je z elektronom dogajalo prej. Najprej se vprašajmo po verjetnosti, da **od nekega trenutka naprej** ( $t = 0$ ) elektron **prvič trči** v ion ravno med časoma  $t$  in  $t + dt$ . Tudi časovni interval  $(0, t)$ , v katerem naj elektron še ne doživi trka, razdelimo na kratke časovne intervale  $dt$ . Njihovo število naj bo naravno:  $N = t/dt$ , kar lahko dosežemo s primerno izbiro majhnega časovnega koraka  $dt$ . Z vidika dogodkov in verjetnostnega računa si torej dogodek, da elektron doživi trk ravno v omenjenem časovnem intervalu  $(t, t + dt)$ , mislimo sestavljenega iz  $N + 1$  **zaporednih neodvisnih dogodkov**: da elektron ne doživi trka v nobenem od prvih  $N$  intervalov po  $dt$ , ter da doživi trk v zadnjem,  $(N+1)$ -tem intervalu. Najprej vprašanje: zakaj lahko sploh trdimo, da je teh  $N + 1$  dogodkov neodvisnih med seboj? Ta stvar ni sama po sebi razumljiva, saj smo prav nasprotno pri deterministični fiziki navajeni, da je poznejši dogodek seveda odvisen od predhodnega. Trditev, da so si dogodki v tem verjetnostnem računu neodvisni med seboj, je predvsem matematični model, ki ga mora eksperiment (ali pa bolj sofisticirane mikroskopske teorije) potrditi. Ker je verjetnost za negacijo dogodka trka enaka  $1 - dP = 1 - dt/\tau$ , lahko verjetnost za sestavljeni dogodek, da elektron doživi trk ravno v časovnem intervalu  $(t, t + dt)$ , enaka produktu verjetnosti  $N + 1$  neodvisnih dogodkov:

$$P(t, t + dt) = \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)^N \cdot \frac{dt}{\tau}$$

Enačbo malo predrugačimo:

$$P(t, t + dt) = \left[ \left(1 - \frac{t}{N\tau}\right)^{N\tau/t} \right]^{t/\tau} \cdot \frac{dt}{\tau}$$

Izraz v oglatem oklepaju je v limiti  $N \rightarrow \infty$  enak  $1/e$ . Zato dobimo:

$$P(t, t + dt) = e^{-t/\tau} \cdot \frac{dt}{\tau} \quad (*1)$$

Namesto tega zapisa lahko uvedemo verjetnostno porazdelitveno funkcijo za čas trka elektrona:

$$\rho(t) = \frac{e^{-t/\tau}}{\tau} \quad (*2)$$

Izraza (\*1) in (\*2) sta ključna za nadaljnje izpeljave.

Najprej izračunamo povprečni čas za trk od izbranega ničelnega trenutka naprej:

$$\langle t \rangle = \int_0^{\infty} t \rho(t) dt = \tau \quad (*3)$$

kar z lahkoto izračunamo z integracijo per partes. Torej je povprečni čas od naključno izbranega trenutka do prvega trka kar enak relaksacijskemu času  $\tau$ .

Podobno sklepamo za preteklost: povprečni čas od naključno izbranega trenutka do zadnjega trka pred tem je kar enak relaksacijskemu času  $\tau$ . Pri pogledu v preteklost namreč lahko uporabimo kar enačbo (\*2) ter pozitivni čas, če si mislimo obrnjeno smer časa.

Naredimo sedaj še nek račun. Vzemimo spet naključni trenutek pri  $t = 0$ , pogledimo v prihodnost do prvega trka ( $t_1$ ), v preteklost do zadnjega ( $t_2$ ), seštejmo časa in izračunajmo povprečje:

$$\langle t_1 + t_2 \rangle = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (t_1 + t_2) e^{-t_1/\tau} e^{-t_2/\tau} \frac{dt_1}{\tau} \frac{dt_2}{\tau} = 2\tau \quad (*4)$$

Uporabiti smo morali dvojni integral, ker integriramo po času neodvisno v prihodnost in preteklost. Rezultat je bil pričakovan, narobe pa bi bilo sklepati, da smo s tem izračunali povprečni čas  $\langle \Delta t \rangle$  med dvema zaporednima trkoma! Pokazali bomo, da je tudi ta čas kar enak  $\tau$  in ne  $2\tau$ ! Zakaj izračun (\*4) ne da pravega rezultata za  $\langle \Delta t \rangle$ ? Ker ne upošteva v resnici premične spodnje integracijske meje za enega od časov: če se je čas  $t_2$  (gledan pozitivno) nanašal na preteklost, moramo pri integraciji za čas  $t_1$  spodnjo mejo premakniti v negativne čase, saj drugače izgubimo določen možni časovni interval med trkoma.

Naredimo pravilno izpeljavo za  $\langle \Delta t \rangle$ , vendar zaradi večje jasnosti pogledimo za oba trka v prihodnost. Označimo časa prvega in drugega trka s  $t_1$  in  $t_2$ . Torej  $t_1 \leq t_2$ , zato je spodnja integracijska meja za čas  $t_2$  enaka času  $t_1$  in ne 0. Poleg tega moramo verjetnost drugi trk gledati od relativno od prvega trka naprej, zato v drugem eksponentu vzamemo razliko časov  $t_2 - t_1$  namesto  $t_2$ :

$$\langle \Delta t \rangle = \frac{1}{\tau^2} \int_0^{\infty} dt_1 \int_{t_1}^{\infty} dt_2 (t_2 - t_1) e^{-t_1/\tau} e^{-(t_2 - t_1)/\tau} = \tau \quad (*5)$$

Zaradi ene spremenljive integracijske meje moramo paziti na vrstni red integriranja. Bralec naj sam preveri integral, ki ni težak.

Izpeljavo enačbe (\*5) pa lahko izvedemo na matematično krajši način, čeprav v bistvu pomeni enako kot zgornji postopek. Prvi čas naj kar ostane  $t_1$ , namesto časa  $t_2$  pa vzamemo kar razliko časov  $t = t_2 - t_1$ . Tedaj se tudi drugi integral začne s spodnjo mejo nič in je pri konkretnem računu manj dela, ker lahko takoj uporabimo kar produkt dveh neodvisnih enojnih integralov:

$$\langle \Delta t \rangle = \frac{1}{\tau^2} \int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt \cdot t \cdot e^{-t_1/\tau} e^{-t/\tau} = \tau$$

Nazadnje pa še razrešimo »skrivnost«, zakaj je pri vplivu električnega polja povprečna usmerjena hitrost elektronov (v nasprotni smeri  $\mathbf{E}$ ) enaka:  $\langle v_E \rangle = a\tau$  in ne  $a\tau/2$ , kjer je  $a$  pospešek, pri čemer je začetna usmerjena hitrost nič.

Ne smemo gledati statistične povprečne hitrosti v smislu:

$$\langle v_E \rangle = \int_0^{\infty} v_p(t) \rho(t) dt = \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{2} at\right) e^{-t/\tau} dt / \tau = \frac{1}{2} a\tau$$

Gledati moramo osnovnejšo definicijo povprečne hitrosti  $\langle v \rangle = s/t$  čez veliko število trkov elektrona (recimo  $N$  trkov):

$$\langle v_E \rangle = \frac{s}{t} = \frac{\sum_{i=1}^N s_i}{\sum_{i=1}^N t_i} = \frac{N \langle s \rangle}{N \langle t \rangle} = \frac{\langle s \rangle}{\tau} \quad (*6)$$

Pri tem si mislimo pot  $s_i$  kot usmerjeno pot od enega trka do drugega, in sicer premik v nasprotni smeri  $\mathbf{E}$ . Pri povprečni poti pa se pojavi povprečje kvadrata časa:

$$\langle s \rangle = \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{2} at^2\right) e^{-t/\tau} dt / \tau = a\tau^2$$

Prvotna polovička se krajša pri integraciji per partes. Vstavimo to v enačbo (\*6) in res dobimo  $\langle v_E \rangle = a\tau$ .

Na verjetnostne porazdelitve v zvezi s trki lahko gledamo še drugače. Verjetnosti za določeno število trkov elektrona z ioni v določenem času ustreza Poissonova porazdelitev. Dokaz je podoben kot pri izpeljavi enačbe (\*1). Časovni interval  $(0, t)$  spet razdelimo na  $N$  enakih

delov po  $dt$ ,  $N$  pa je zelo veliko število in gre v limiti proti neskončni vrednosti. Verjetnost, da bo elektron trčil  $M$ -krat ( $M \ll N$ ), je enaka:

$$\binom{N}{M} \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)^{N-M} \cdot \left(\frac{dt}{\tau}\right)^M$$

V  $N - M$  intervalih namreč ne sme trčiti, v  $M$  intervalih pa trči. Prvi faktor (binomski simbol) pa pove število kombinacij: od  $N$  intervalov na vse možne načine izbiramo  $M$  tistih, v katerih elektron trči. Ko poženemo  $N \rightarrow \infty$ , lahko najprej zanemarimo  $M$  v eksponentu pri osnovi  $(1 - dt/\tau)$  in v limiti dobimo spet eksponentno funkcijo, binomski simbol pa se poenostavi v  $N^M/M!$ . Faktor  $N^M$  vržemo v zadnji oklepaj, ki ima tudi potenco  $M$ , tako da dobimo v števcu  $N \cdot dt = t$ . Imamo nazadnje rezultat:

$$P(0, t, M) = \frac{1}{M!} e^{-t/\tau} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^M \quad (*7)$$

Izraz (\*7) podaja verjetnost, da elektron v časovnem intervalu  $(0, t)$  trči v ion natanko  $M$ -krat. Izračunajmo zdaj z uporabo (\*7) povprečno število trkov v časovnem intervalu  $(0, t)$ :

$$\langle M \rangle = \sum_{M=0}^{\infty} M \cdot \frac{1}{M!} e^{-t/\tau} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^M = \sum_{M=1}^{\infty} \frac{1}{(M-1)!} e^{-t/\tau} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^M$$

$$\langle M \rangle = \frac{t}{\tau} e^{-t/\tau} \cdot \sum_{M=1}^{\infty} \frac{1}{(M-1)!} \left(\frac{t}{\tau}\right)^{M-1} = \frac{t}{\tau} e^{-t/\tau} \cdot \sum_{M'=0}^{\infty} \frac{1}{(M')!} \left(\frac{t}{\tau}\right)^{M'} = \frac{t}{\tau} e^{-t/\tau} \cdot e^{t/\tau} = \frac{t}{\tau}$$

To pa je znan rezultat za Poissonovo porazdelitev. Temu ustreza povprečni čas  $\tau$  med zaporednima trkoma.

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 9.11

V zelo majhnem elektronskem elementu opisuje zvezo med električnim tokom in napetostjo Landauerjeva enačba:  $I = (2e_0^2 T/h)U$ , kjer je prepustnost elektronov  $T = 80\%$ . Kolikšen je električni tok skozi element pri napetosti 1 V, značilni za atomske sisteme? Za primerjavo izračunajte električni tok za baker, če za značilno dimenzijo vzamete  $a = 0,1$  nm, primerljivo z velikostjo atomov. Upornik naj bo torej v obliki kocke z robom  $a$ . Specifična upornost bakra je  $\rho = 1,56 \mu\Omega \text{ cm}$ .

Električni tok je  $6,2 \cdot 10^{-5}$  A. Pri klasičnem računu za bakreno kocko z robom  $a$  pa ugotovimo:  $I = U/R = U/(\rho a/a^2) = Ua/\rho = 6,4 \cdot 10^{-3}$  A, kar je za dva velikostna reda večja in neustrezna vrednost. ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 9.12

Germanij ima energijsko režo  $E_g = 0,67$  eV. Kolikšna je v njem gostota prevodnih elektronov pri temperaturi 300 K? Za koliko se poveča gostota prevodnih elektronov, če se temperatura poveča za 1 K?

Gostota prevodnih elektronov pri temperaturi 300 K je:

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left( \frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{E_g}{2k_B T} \right] = 6,04 \cdot 10^{19} / \text{m}^3$$

To je precej manj kot pri kovinah, kjer je  $n$  velikostnega reda  $10^{28} / \text{m}^3$ . Pri relativno majhni temperaturni spremembi si pomagamo z diferencialom:  $\Delta n/n \approx (dn/dT) \cdot \Delta T/n$ . Pri odvajanju gostote prevodnih elektronov po temperaturi upoštevamo temperaturno odvisnost potenčnega in eksponentnega faktorja:

$$\frac{\Delta n}{n} \approx \left( \frac{3}{2} + \frac{E_g}{2k_B T} \right) \cdot \frac{\Delta T}{T}$$

Po pričakovanju je prvi člen v oklepaju manjši od drugega, zaradi natančnosti pa upoštevamo oba:

$$\Delta n \approx n \left( \frac{3}{2} + \frac{E_g}{2k_B T} \right) \cdot \frac{\Delta T}{T} = 2,9 \cdot 10^{18} / \text{m}^3$$

To je nekaj manj kot 5 %; tako hitro povečevanje gostote prevodnih elektronov s temperaturo je posledica predvsem eksponentnega faktorja v izrazu za  $n$ . ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 9.13

Nek polprevodnik ima pri temperaturi 300 K prostorninsko gostoto prevodnih elektronov  $10^{10} / \text{m}^3$ . Kolikšna je njegova energijska reža?

Z dano gostoto prevodnih elektronov

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left( \frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{E_g}{2k_B T} \right]$$

izračunamo energijsko režo:

$$E_g = 2k_B T \cdot \ln \left[ \left( \frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} / (\sqrt{2}n) \right] = 1,83 \text{ eV} \quad \spadesuit$$



♥ RAČUNSKI ZGLED 9.14

Pri sobni temperaturi je gostota nosilcev naboja (posebej elektronov in posebej vrzeli) v čistem siliciju  $1,1 \cdot 10^{10}/\text{cm}^3$ , gibljivost elektronov  $1400 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  in gibljivost vrzeli  $450 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ . Kolikšna je specifična električna prevodnost silicija? Pri kolikšnem električnem polju je gostota električnega toka v njem  $1 \text{ mA}/\text{cm}^2$ ?

Prevodnost silicija je  $\sigma = e_0(\beta_e + \beta_v)n = 3,26 \cdot 10^{-4} \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$ . Ker velja enačba  $j = \sigma E$ , je jakost električnega polja  $E = j/\sigma = 3,07 \cdot 10^4 \text{ V/m}$ . ♠

♥ RAČUNSKI ZGLED 9.15

Silicij dopiramo z arzenovimi atomi, tako da je koncentracija (število dodanih atomov na prostorninsko enoto) nečistoč  $10^{15}/\text{cm}^3$ . Kolikšna je prevodnost takšnega polprevodnika tipa n? Kaj pa, če silicij dopiramo z borom z enako koncentracijo?

Prevodnost dopiranega silicija tipa n, ko lahko zanemarimo prispevek vrzeli, je  $\sigma = e_0\beta_en = 22,4 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$ . Za n lahko namreč vzamemo kar koncentracijo arzenovih atomov. Za polprevodnik, dopiran z borom (tip p), pa velja:  $\sigma = e_0\beta_vn = 7,2 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$ . ♠

## 10 LASTNOSTI IN UPORABA POLPREVODNIKOV

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 10.1

Silicij dopiramo z arzenovimi atomi. Če ne vemo, kolikšna je koncentracija dopanta, lahko uporabimo Hallov pojav, da z njim izmerimo prostorninsko gostoto večinskih nosilcev električnega naboja. Ozek trak dopiranega silicija z debelino  $t = 0,1$  mm je v pravokotnem magnetnem polju z gostoto 1 T. Če skozi trak teče električni tok 0,1 mA, se pojavi v prečni smeri (vzdolž širine traku) Hallova napetost 3,125 mV, ki jo izmerimo z voltmetrom. Kolikšna je koncentracija dopanta in na koliko silicijevih atomov pride v povprečju en arzenov?

Enačba za Hallovo napetost je:

$$U_H = \frac{IB}{e_0 n t}$$

tako da je gostota nosilcev naboja

$$n = \frac{IB}{e_0 U_H t} = 2 \cdot 10^{15}/\text{cm}^3$$

Tolikšna je tudi prostorninska gostota atomov As v siliciju. Prostorninska gostota silicijevih atomov je:

$$n_{\text{Si}} = \frac{N_{\text{Si}}}{V} = \frac{N_A \rho_{\text{Si}}}{M_{\text{Si}}} = 5 \cdot 10^{22}/\text{cm}^3$$

Razmerje  $n_{\text{Si}}/n = 2,5 \cdot 10^7$ , to je na vsakih  $2,5 \cdot 10^7$  silicijevih atomov pride po en arzenov atom. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 10.2

Energijska reža v čistem polprevodniku PbS je 2,4 eV in ustreza zeleni svetlobi. Z monokromatskim svetlobnim virom z enako energijo fotonov in intenziteto  $j = 1$  mW/cm<sup>2</sup> posvetimo v pravokotni smeri na ploščico iz tega materiala s ploščino 0,5 cm<sup>2</sup>. Kolikšen električni tok lahko steče skozi takšno fotoprevodno napravo, če je »izkoristek«  $\eta = 1$  %, to je, vsak stoti foton dvigne en elektron iz valenčnega v prevodni pas?

Električni tok je:

$$I = \frac{e}{t} = \frac{N_e e_0}{t} = \frac{\eta N_f e_0}{t} = \frac{\eta E e_0}{E_g t}$$

Oznake pomenijo:  $N_e$  je število pretečenih elektronov,  $N_f$  pa ustrezno število fotonov;  $E$  je skupna energija vseh fotonov,  $E_g$  je energijska reža in hkrati energija enega fotona. Ker je intenziteta svetlobe po definiciji  $j = E/(St)$ , je  $E = jSt$  in izračunamo nazadnje električni tok:

$$I = \frac{\eta j S e_0}{E_g} = 2,08 \mu\text{A}. \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 10.3

Električni tok skozi polprevodniško diodo je eksponentna funkcija napetosti:

$$I = I_0 \cdot \left[ \exp\left(\frac{e_0 U}{k_B T}\right) - 1 \right]$$

Zapišite približek za tok v treh limitnih primerih: 1) za negativno napetost z zelo veliko absolutno vrednostjo, 2) za napetost z zelo majhno absolutno vrednostjo (tako pozitivno kot negativno) in 3) za zelo veliko pozitivno napetost. Zapišite še kvantitativni kriterij, kdaj lahko uporabimo te približke.

Pri negativnih napetostih z zelo veliko absolutno vrednostjo zanemarimo eksponentni člen in dobimo:  $I \approx -I_0$ . Nasprotno pri zelo velikih pozitivnih napetostih zanemarimo enko v primerjavi z eksponentnim členom:  $I \approx I_0 \cdot \exp(e_0 U / (k_B T))$ . Pri majhnih absolutnih vrednostih napetosti razvijemo eksponentno funkcijo v Taylorjevo vrsto le do linearne člena:  $\exp x - 1 \approx 1 + x - 1 = x$ , kjer je brezdimenzijski argument enak  $x = e_0 U / (k_B T)$ . Tako dobimo:  $I \approx I_0 e_0 U / (k_B T)$ . V tem območju se dioda vede približno kot ohmski upornik, saj sta električni tok in napetost premo sorazmerna. Kriterij za vse tri približke je velikost parametra  $x$ :

$$1) x \ll -1 \rightarrow I \approx -I_0,$$

$$2) |x| \ll 1 \rightarrow I \approx I_0 e_0 U / (k_B T),$$

$$3) x \gg 1 \rightarrow I \approx I_0 \cdot \exp(e_0 U / (k_B T)). \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 10.4

Reverzni tok diode je  $I_0 = 100 \text{ nA}$ , temperatura pa  $300 \text{ K}$ . Pri kolikšni napetosti je električni tok enak  $500 \text{ nA}$ ?

$$I = I_0 \cdot \left[ \exp\left(\frac{e_0 U}{k_B T}\right) - 1 \right]$$

$$\exp\left(\frac{e_0 U}{k_B T}\right) = I / I_0 + 1$$

$$U = \frac{k_B T}{e_0} \cdot \ln(I / I_0 + 1) = 46,4 \text{ mV} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 10.5

LED dioda ima v primerjavi z drugimi sijalkami velik svetlobni izkoristek, tudi do 300 lm/W (lumnov na vat električne moči). Kolikšen delež električnega dela se pretvarja v energijo vidne svetlobe? Fizikalni pomen enote lumen:  $\text{lm} = \text{cd} \cdot \text{sr}$ ;  $\text{cd} = \text{kandela} = (1/638) \text{ W/sr}$  pri frekvenci svetlobe 540 THz,  $\text{sr} = \text{steradian}$  (prostorski kot, ki je  $4\pi$ -krat manjši od polnega prostorskega kota).

Tako lumen kot kandela sta fiziološki enoti, povezani s svetlobno občutljivostjo človeškega očesa, zato je ustrezna fizikalna moč odvisna tudi od valovne dolžine svetlobe. Vendar tu ne bomo delali razlik: iz definicije zgoraj je razvidna enakost  $\text{lm} = (1/638) \text{ W}$ . Zato je razmerje med svetlobno (vidna svetloba) in električno močjo pri LED diodi enako:

$$\frac{P_{\text{sv}}}{P_{\text{el}}} = \frac{300 \cdot \text{W} / 638}{\text{W}} = 47 \%$$

Kot zanimivost omenimo, da je bilo treba za delovanje LED diode, ki imitira belo svetlobo, najti primeren polprevodnik s primerno energijsko režo (galijev nitrid, GaN), s katerim dobimo modro komponento svetlobe. Problem je bil praktično tako težak, da je zahteval trideset let raziskav, za ta dosežek pa so si Nobelovo nagrado za fiziko v letu 2014 prislužili Isamu Akasaki, Hiroši Amano in Šuji Nakamura. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 10.6

Diodo vezemo zaporedno z upornikom na vir konstantne napetosti  $U$ . Kolikšen električni tok teče v vezju? Posebej obravnavajte limitne primere, ko se enačbe poenostavijo. Kako so ti pogoji povezani s parametri diode in upornika? Nazadnje obravnavajte vir s sinusno napetostjo.

Padeč napetosti na diodi označimo z  $U_d$ , na uporniku pa z  $U_u$  (oboje smatramo kot pozitivni količini). Tedaj velja:  $U = U_d + U_u$ . Ker je tok skozi upornik enak toku skozi diodo, lahko napišemo transcendentno enačbo za  $U_d$ :

$$\frac{U - U_d}{R} = I_0 \cdot \left[ \exp\left(\frac{e_0 U_d}{k_B T}\right) - 1 \right]$$

Za njeno numerično reševanje je smiselno vpeljati naslednje brezdimenzijske spremenljivke/parametre:  $x = e_0 U_d / (kT)$ ,  $a = U / (RI_0)$ ,  $b = kT / (e_0 RI_0)$ . V naši nalogi sta  $a$  in  $b$  znana parametra, saj navadno poznamo podatke za njun izračun. Zgornji enačbi ustreza brezdimenzijska enačba:  $a - bx = e^x - 1$  za neznanko  $x$ .

Najprej enačbo približno rešimo za majhne absolutne vrednosti neznanke  $x$ , seveda pa moramo nazadnje preveriti v splošnem, za različne vrednosti parametrov  $a$  in  $b$ , ali je vrednost  $x$  res majhna. Eksponentno funkcijo razvijemo v Taylorjevo vrsto samo do linearnega člena,  $e^x \approx 1 + x$ , tedaj pa je rešitev enačbe:

$$x \approx \frac{a}{b+1}$$

Vzemimo najprej pozitivno napetost  $U$  in s tem pozitivni parameter  $a$ . Kdaj velja  $x \ll 1$ ? Imamo dve značilni možnosti za ta pogoj, glede na to, kolikšen je parameter  $b$  v primerjavi z vrednostjo 1. V primeru  $b \gg 1$  (praktično to pomeni, da je upor  $R$  dovolj majhen) mora veljati  $a \ll b$  ali  $U \ll kT/e_0$ . Ta zahteva je ekvivalentna zahtevi za območje linearne odvisnosti  $I(U)$  za samo diodo, brez upornika. Pri značilnem reverznem toku diode 100 nA in temperaturi 300 K pogoj  $b \gg 1$  pomeni  $R \ll kT / (e_0 I_0) = 2,6 \cdot 10^5 \Omega$ , kar praktično vedno velja na področju mikroelektronike. Zato druge možnosti,  $b \ll 1$ , niti ne bomo obravnavali. Zgoraj zapisano poenostavljeno enačbo še bolj poenostavimo, če zanemarimo enko v imenovalcu:  $x \approx a/b$ . Tok skozi vezje za  $x \ll 1$  je  $I \approx I_0 x = I_0 a/b = I_0 e_0 U / (kT)$ . Enak približek velja za majhno zaporno napetost, samo smer toka se obrne.

Tudi za večje in zelo velike absolutne vrednosti zaporne napetosti, ko velja  $a \ll -1$ , je rešitev preprosta. V enačbi  $e^x \approx 1 + x$  samo zanemarimo zelo majhen eksponentni člen in ugotovimo:

$$x \approx \frac{a+1}{b} \approx \frac{a}{b}$$

Torej lahko poenostavljeno rešitev  $x \approx a/b$  razširimo na celoten interval  $-\infty < U < \sim 0,1 kT/e_0$ . Ta enačba glede na definicije  $x$ ,  $a$  in  $b$  pomeni  $U_d \approx U$ , to je, na vsem omenjenem intervalu je učinkoviti upor diode toliko večji od upora zaporedno vezanega upornika, da je praktično celoten padeč napetosti na diodi, električni tok skozi vezje pa največ reda velikosti reverznega toka.

Tudi za velike pozitivne napetosti je vedenje električnega kroga preprosto. Tedaj je namreč efektivni upor diode zanemarljiv v primerjavi z uporom upornika. Zato je praktično ves padec napetosti na uporniku in tok skozi vezje je približno enak  $U/R$ , kot da diode ne bi bilo.

Če sedaj priključimo na diodo in upornik vir sinusne napetosti,  $U = U_0 \sin(\omega t)$ , je učinek diode naslednji. Za intervale negativne napetosti je tok skozi upornik približno enak negativnemu reverznemu toku diode, kar je zelo majhna vrednost; pri pozitivnih napetostih pa je približno tako, kot da diode ne bi bilo. Za nekoliko natančnejši račun moramo rešiti zgoraj zapisano enačbo samo v relativno majhnem intervalu napetosti  $-kT/e_0 < U < kT/e_0$ . Še natančneje: za  $-kT/e_0 < U < 0,1kT/e_0$  upoštevamo samo enačbo za tok skozi diodo, za  $0,1kT/e_0 < U < kT/e_0$  pa moramo zgornjo enačbo zares rešiti numerično. ♠

## 11 HETEROSTRUKTURE, OPTIČNI ELEMENTI IN NANONAPRAVE

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 11.1

V 2D kvantni jami je značilna debelina plasti  $d = 10$  nm, ploskovna gostota elektronov pa  $n_s = 10^{11}/\text{cm}^2$ . Kolikšna je efektivna prostorninska gostota elektronov? Kolikšna je značilna razdalja med najbližjimi elektroni? Ocenite nedoločenost komponente hitrosti elektronov v smeri pravokotno na ravnino plasti.

Prostorninska gostota elektronov je:

$$n = \frac{N}{V} = \frac{N}{Sd} = \frac{n_s}{d} = 10^{17}/\text{cm}^3$$

Za primerjavo: gostota nosilcev naboja, tako elektronov kot vrzeli, v čistem siliciju je reda velikosti  $10^{10}/\text{cm}^3$ , v značilnem dopiranem siliciju pa je gostota večinskih nosilcev naboja npr.  $10^{15}/\text{cm}^3$  (gl. računski zgleda 9.14 in 9.15), to je še vedno precej manj kot v 2D kvantni jami.

Če si mislimo kvadrat s stranico  $l$  na en elektron, potem izračunamo značilno razdaljo med najbližjimi sosedi takole:

$$n_s = \frac{N}{S} = \frac{1}{l^2} \rightarrow l = \frac{1}{\sqrt{n_s}} = 32 \text{ nm}$$

To je trikrat več od debeline plasti, tako da je ocena značilne razdalje z 2D geometrijo smiselna. Nedoločenost komponente hitrosti ocenimo s Heisenbergovo relacijo:

$$\delta v_z = \frac{\delta p_z}{m_e} \approx \frac{h}{\delta z \cdot m_e} \approx \frac{h}{d \cdot m_e} = 7,3 \cdot 10^5 \text{ m/s} \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 11.2

Recimo, da bi z zelo tanko plastjo bakra,  $d = 1$  nm, vsilili prevodnim elektronom efektivno 2D smerno porazdelitev valovnih vektorjev. Kako bi tedaj ocenili Fermijev valovni vektor, če bi uporabili podatek za prostorninsko gostoto prevodnih elektronov  $n$  za 3D geometrijo, komponento  $k_z$  valovnega vektorja pa bi ocenili kar s principom nedoločenosti? Primerjajte to vrednost Fermijevega valovnega vektorja s 3D sistemom.

Kot v prejšnjem zgledu povežemo ploščinsko in prostorninsko gostoto prevodnih elektronov:  $n_S = dn$ . Velikost Fermijevega valovnega vektorja v ravnini  $(x, y)$ , ki ustreza tanki plasti, je:

$$k_{Fxy} = \sqrt{2\pi n_S} = \sqrt{2\pi dn}$$

Tretja komponenta tega valovnega vektorja pa je približno  $k_{Fz} = p/(h/2\pi) \approx 2\pi/d$ . Celoten valovni vektor ocenimo kot:

$$k_F = \sqrt{k_{Fxy}^2 + k_{Fz}^2} = \sqrt{2\pi(dn + 1/d^2)}$$

S podatkom za baker,  $n = 8,5 \cdot 10^{28}/\text{m}^3$  primerjajmo oba člena v oklepaju pod korenomo:  $dn = 8,5 \cdot 10^{19}/\text{m}^2$ ,  $1/d^2 = 10^{18}/\text{m}^2$ . Drugi člen lahko zato zanemarimo in izračunamo:  $k_F \approx k_{Fxy} = 2,3 \cdot 10^{10}/\text{m}$ , kar je več kot v računskem zgledu 9.1 za baker v 3D ( $1,4 \cdot 10^{10}/\text{m}$ ). Kot zanimivost naj omenimo, da ima tudi bakrova površina, ki ustreza mrežni ravnini (111) (gl. Millerjeve indekse za pomen teh števil) površinska stanja elektronov, torej dvodimenzionalno naravo. Zato imajo ti elektroni večji Fermijev valovni vektor kot navadno v bakru; ustrezna valovna dolžina je torej krajša, to je se vidi z vrstičnim tunelskim mikroskopom. ♠

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 11.3

Koliko ogljikovih atomov vsebuje nanocevka s premerom 1 nm in milijonkrat večjo dolžino? Ogljikovi atomi so razporejeni v pravilne šesterokotnike s stranico  $a = 0,25$  nm.

Pravilni šesterokotnik je sestavljen iz šestih enakih enakostraničnih trikotnikov, zato je njegova ploščina:

$$S_6 = 6 \cdot \frac{a^2 \sqrt{3}}{4} = \frac{3a^2 \sqrt{3}}{2}$$

Upoštevati moramo, da vsebuje šesterokotnik 6 ogljikovih atomov, hkrati pa si en atom delijo trije sosednji šesterokotniki, tako da prideta le po 2 atoma na šesterokotnik. Plašč valja s premerom  $d$  in višino  $h$  je  $S_v = \pi dh$ , zato je število ogljikovih atomov v nanocevkci:

$$N = \frac{2S_v}{S_6} = \frac{2\pi dh}{(3/2)a^2 \sqrt{3}} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \cdot 10^6 \cdot \left(\frac{d}{a}\right)^2 = 3,9 \cdot 10^7 \quad \spadesuit$$

### ♥ RAČUNSKI ZGLED 11.4

V zadnjem času so zelo aktualne raziskave binarnih tekočin z nanometrskimi anizotropnimi (največkrat podolgovatimi) delci. Zgled za to so nematični tekoči kristali, ki jim dodajo določeno koncentracijo ogljikovih nanocevk. Tudi molekule tekočega kristala so anizotropne,



čepprav je pri njih razmerje med dolžino in debelino veliko manjše kot pri nanocevkah. Tekoči kristal s svojo orientacijsko ureditvijo posredno vpliva tudi na ureditev smeri nanocevk. Če so molekule tekočega kristala po smereh popolnoma neurejene (nad temperaturo faznega prehoda v urejeno stanje), velja to tudi za smeri nanocevk. Obravnavajmo primer popolne orientacijske neurejenosti nanocevk. Izberimo neko os v prostoru in jo imenujmo os  $z$ . Obravnavajmo porazdelitev kota  $\theta$ , ki ga posamezne nanocevke oklepajo z osjo  $z$ . Zapišite porazdelitveno funkcijo  $p(\theta)$  v primeru neurejenosti smeri nanocevk. Stopnjo urejenosti navadno definiramo z ureditvenim parametrom  $S$ , ki ga izračunamo takole:

$$S = \langle P_2(\cos \theta) \rangle$$

Uporabili smo Legendrov polinom druge stopnje,  $P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$ , namesto argumenta  $x$  pa smo vzeli kosinus polarnega kota  $\theta$ . Trikotni oklepaj označuje statistično povprečje po veliki množici nanocevk. Kolikšna je vrednost ureditvenega parametra  $S$  pri dani porazdelitveni funkciji  $p(\theta)$  za neurejeni sistem nanocevk? Kolikšna pa bi bila vrednost  $S$ , če bi bile vse nanocevke popolnoma urejene in bi kazale v smer osi  $z$ ?

Na pravo porazdelitveno funkcijo  $p(\theta)$  sklepamo iz enačbe za površinski element na krogli s polmerom  $R$  v sferičnih koordinatah:  $dS = R^2 \sin \theta d\theta d\varphi$ , kjer sta  $\theta$  in  $\varphi$  polarni in azimutni kot. Spomnimo se: polarni kot  $\theta$  je kot med osjo  $z$  in krajevnim vektorjem točke na krogli, kot  $\varphi$  pa je kot med osjo  $x$  in projekcijo krajevnega vektorja točke na ravnino  $(x, y)$ . Pri popolnoma neurejeni (izotropni) porazdelitvi smeri so vse smeri v 3D prostoru enakovredne. To pomeni, da mora vsak krogelni površinski element  $dS$  vsebovati enako število smeri nanocevk. Povedano drugače: če vzamemo splošnejšo porazdelitveno funkcijo  $p(\theta, \varphi)$ , je ta sorazmerna z elementom  $dS$ . Pri izotropni porazdelitvi je porazdelitev po kotu  $\varphi$  enakomerna, torej neodvisna od kota. S povprečjem po kotu  $\varphi$  nam preostane samo še funkcija kota  $\theta$ . Tako nazadnje ugotovimo:  $p(\theta) = A \sin \theta$ , kjer je  $A$  ustrežna normalizacijska konstanta. Izračunajmo jo:

$$\int_0^\pi p(\theta) d\theta = 1$$

$$A \int_0^\pi \sin \theta d\theta = 1$$

$$-A \cos \theta \Big|_0^\pi = 1 \rightarrow 2A = 1 \rightarrow A = \frac{1}{2}$$

Porazdelitvena funkcija kota  $\theta$  je s tem določena:  $p(\theta) = (1/2)\sin \theta$ . Izračunajmo še ureditveni parameter:

$$S = \langle P_2(\cos \theta) \rangle = \frac{1}{2} (3 \langle \cos^2 \theta \rangle - 1)$$

Pozor: pomembno je, kako postavimo trikotni oklepaj za povprečje. Na primer, povprečje kvadrata kosinusa kota ni enako kvadratu povprečnega kosinusa kota. Pri enki pa ni bilo treba pisati znaka za povprečje, ker je to konstanta. S porazdelitveno funkcijo izračunajmo najprej:

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_0^\pi \cos^2 \theta \cdot p(\theta) d\theta = \frac{1}{2} \int_0^\pi \cos^2 \theta \cdot \sin \theta d\theta$$

Z uvedbo nove integracijske spremenljivke,  $x = \cos \theta$ ,  $dx = -\sin \theta d\theta$ , izračunamo integral do konca, rezultat pa je  $1/3$ . Vstavimo to v enačbo za  $S$  in ugotovimo  $S = 0$ . Mimogrede, do rezultata  $1/3$  za povprečje kvadrata kosinusa polarnega kota bi hitreje prišli z drugačnim računom. Naj bo smer vsake nanocevke podana z enotskim spinskim vektorjem  $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ , kar pomeni  $S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 1$ . Torej velja tudi za statistično povprečje:  $\langle S_x^2 \rangle + \langle S_y^2 \rangle + \langle S_z^2 \rangle = 1$ . Ker pa so pri izotropni porazdelitvi vse tri komponente enakovredne, je povprečje kvadrata vsake komponente spina posebej enako  $1/3$ . V sferičnem koordinatnem zapisu pa velja:  $S_z = \cos \theta$ , zato sklenemo  $\langle \cos^2 \theta \rangle = 1/3$ . Kaj pa popolnoma urejeni sistem? Tedaj je  $\theta = 0$  in  $\cos^2 \theta = 1$  za vsako nanocevko, torej tudi za statistično povprečje. Zato velja  $S = 1$ . Za oba skrajna primera (ne)urejenosti smeri smo ugotovili vrednosti  $S = 0$  in  $S = 1$ , za delni orientacijski red pa velja  $0 < S < 1$ . Definicija  $S$  z Legendrovim polinomom drugega reda zgoraj je torej smiselna. ♠