ПРИНЦИП НА НЕОПРЕДЕЛЕНОСТ 2/2

Пример:

Принципот на неопределеност може да се искористи за проценка на долната граница на енергијата на честичката со маса m која осцилира заедно со пружина со константа k.
Енергијата е константа на движењето и изнесува: $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$

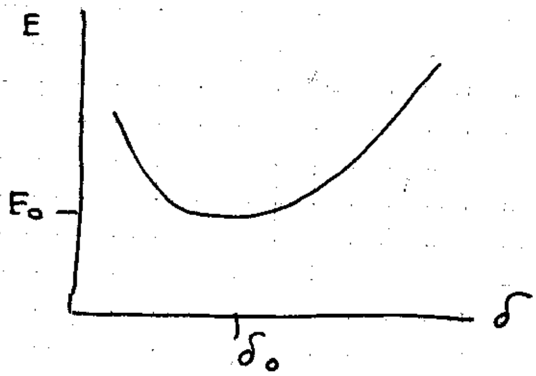
Класичната физика дозволува минимална енергија, еднаква на нула за $p=0, x=0$ (мирување на осцилаторот) но ваквата конфигурација го нарушува принципот на неопределеност (апсолутно непрецизно познавање на p, x). Односно, микроскопскиот осцилатор мора постојано да се движи. Нека константната вредност на енергијата ја изразиме преку средните вредности на кинетичката и потенцијалната енергија во некое такво движење:

$$E = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{k}{2}\langle x^2\rangle$$

Средните вредности на x и p за осцилирачка честичка е природно да се еднакви на нула (подеднакво во плус и минус: $\overset{\leftarrow \; \rightarrow}{0} \to x$)

$$\langle x^2\rangle = (\Delta x)^2 , \quad \langle p^2\rangle = (\Delta p)^2 = \left(\frac{\hbar}{2\Delta x}\right)^2$$

Нека земеме $\Delta x = \delta$ (скратено) : $E = \frac{\hbar^2}{8m\delta^2} + \frac{k}{2}\delta^2$



Овој израз има минимум за некоја вредност на δ:

$$\frac{dE}{d\delta} = 0 = -\frac{\hbar^2}{4m\delta^3} + k\delta \Rightarrow \delta_0^2 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4mk}}$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{8m}\sqrt{\frac{4mk}{\hbar^2}} + \frac{k}{2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{4mk}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{\hbar}{2}\omega_0$$

ω_0 е познатата аголна фреквенција на класичниот осцилатор.

Оваа проценка на минималната енергија, според принципот на неопределеност се совпаѓа со егзактната формула, добиена од квантната механика. Важниот резултат е нејзината енергија на нултата точка за еднодимензионален осцилатор.

БРАНОВИ И БРАНОВИ ПАКЕТИ (во една просторна димензија) (1/4)

$$\psi = A\cos 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - ft\right) = A\cos(kx-\omega t) \quad ; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi f$$

монохроматски патувачки бран.

Аргументот на брановата ф-ја ψ се нарекува **ФАЗА** на овој едноставен хармониски бран. ψ може да претставува и рамнински бран во три димензии, кој може да се визуелизира како низа на рамнини со константна фаза.

Фронтот на бранот е дефиниран со $kx - \omega t = const. = \phi_0$
Положбата површина при прогресивно поместување долж x-оската, дадена со $x = \frac{\phi_0 + \omega t}{k}$, во моментот t. Односно, површината со константна фаза се движи во позитивната насока на x со фазна брзина:

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = f\lambda$$

Алтернативната бранова ф-ја $\psi = A\sin(kx-\omega t)$ опишува бран со истите особини како претходната ф-ја ψ со очигледната разлика од четвртина циклус во фазата.

Удобно средство за претставување на фазата е комплексната ф-ја, преку
$e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi \Rightarrow$ бранот може да се прикаже во формата: $\psi = Ae^{i(kx-\omega t)} = A\cos(kx-\omega t) + iA\sin(kx-\omega t)$

Со овој израз истовремено се опишуваат синусните – косинусните патувачки бранови.
Бранувањето во негативната насока на x, се опишува со замена $x \to -x$; $(kx-\omega t) \to (-kx-\omega t)$; Во секој случај сите овие форми на бранови функции ја задоволуваат еднодимензионалната бранова р-ка:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad ; \text{ пример: } y = \sin(kx-\omega t) \Rightarrow v = v_\phi = \frac{\omega}{k}.$$

Ако сакаме овие форми на бранови ф-ја да опишуваат материјални бранови на де Брољ ќе мора да замениме:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}k = \hbar k$$

Со ваквата интерпретација на импулсот тој е целосно одреден, што значи дека со ваквите бранови не се добива никаква локализација во положбата на честичката. Овој материјален бран опишува честичка што е рамномерно распределена во целиот простор.

Одреден степен на локализација може да се постигне со суперпозиција на бранови со малку различни бранови должини и фреквенции. На пример:

$$\psi = A\cos[(k+\delta k)x - (\omega+\delta\omega)t] + A\cos[(k-\delta k)x - (\omega-\delta\omega)t] =$$

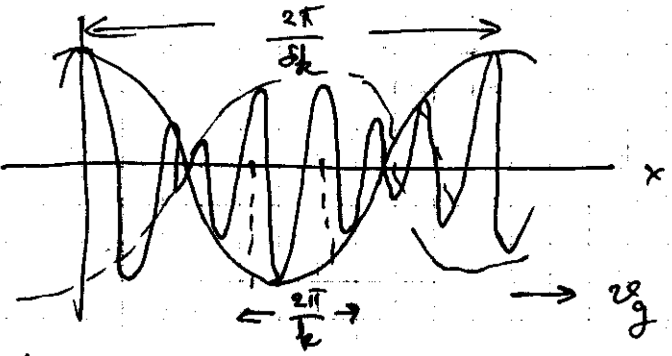
$$= A\cdot Re\{\exp[\ ] + \exp[\ ]\} = A\cdot Re\{[e^{i(\delta k\cdot x - \delta\omega\cdot t)} + e^{-i(\delta k\cdot x - \delta\omega\cdot t)}]\cdot e^{i(kx-\omega t)}\} = 2A\cos(\delta k\cdot x - \delta\omega\cdot t)\, Re[e^{i(kx-\omega t)}] =$$

$$= 2A\cos(\delta k\cdot x - \delta\omega\cdot t)\cos(kx-\omega t)$$

Ваквото суперпонирање (суперпозиционирање) на бранови го покажува познатиот феномен на биења.

→

БРАНОВИ И БРАНОВИ ПАКЕТИ (2/4)

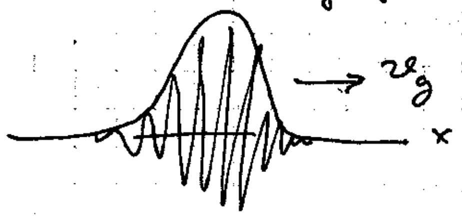


Композиција на два монохроматски брана со различни бранови броеви и фреквенции $(k+\delta k, \omega+\delta\omega)$ и $(k-\delta k, \omega-\delta\omega)$. Конфигурацијата сега се мрда со групна брзина: $v_g = \frac{\delta\omega}{\delta k} \Rightarrow$

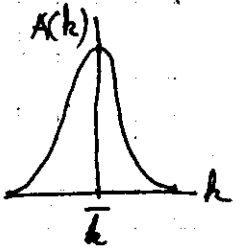
$$v_g = \frac{\delta\omega}{2\pi}\,\frac{2\pi}{\delta k}$$

! Групната брзина е генерално различна од фазните брзини: $\frac{\omega+\delta\omega}{k+\delta k}$, $\frac{\omega-\delta\omega}{k-\delta k}$ на двата монохроматски брана што го сочинуваат композитниот бран.

Важна формулација за локализиран групен објект е што сега можеме да суперпонираме бесконечно број различни монохроматски бранови, односно бескрајни компоненти, како со тоа се моделира честичка.



бранов пакет со кој се моделира локализација на честичка.



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

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{\bar k}$$ една вредност!

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi f}{2\pi/\lambda} = f\lambda$$

(разни вредности за разни компоненти k, ω)

За светлина: $v_\phi = f\lambda = c$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{\bar k} = \frac{d}{dk}(k v_\phi)\Big|_{\bar k} = \left(v_\phi + k\frac{dv_\phi}{dk}\right)\Big|_{\bar k}$$ ... општ случај кога v_ϕ може да зависи од k.

Бидејќи за светлина, $v_\phi = f\lambda = c$, не зависи од $k \Rightarrow v_g = c$! Односно, групната брзина на кој и да било пакет (или импулс) на светлина во вакуум е c.

Ако врската меѓу ω и k не е линеарна се појавува дисперзија. Таков е случајот со групната брзина на пакетот од материјални бранови кои модел на локализирана слободна честичка. Имаме:

$$\omega = 2\pi\frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar}, \quad k = 2\pi\frac{p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

Во тој случај: $v_g = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{\bar k} = \frac{dE}{dp}\Big|_{\bar p = \hbar\bar k}$ централниот импулс во суперпозицијата е даден со $\bar p = \hbar\bar k$

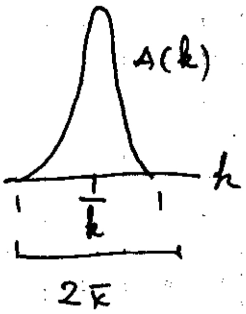
Дисперзијата се појавува затоа што параболичната ја задоволува нелинеарната врска $\left(E = \frac{p^2}{2m}\right)$ за слободна честичка. $v_g = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m}\right)\Big|_{\bar p = \hbar\bar k} = \frac{\bar p}{m}$

односно, тоа е брзината на локализираната слободна честичка.

За да ги разгледаме поделикатно математичките особини на брановиот пакет ја користиме функцијата

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

во контекст на распределбата $A(k)$ за да подоцна да ја анализираме идејата за локализација.



$$\psi = \int_{\bar{k}-\bar{\kappa}}^{\bar{k}+\bar{\kappa}} A(k)\, e^{i(kx-\omega t)}\, dk \rightarrow \underbrace{A(\bar{k})}_{} \int_{\bar{k}-\bar{\kappa}}^{\bar{k}+\bar{\kappa}} e^{ikx}\, e^{-i\omega t}\, dk$$

апроксимација како константна вредност во центарот, $k = \bar{k}$.

Преостанатиот интеграл ќе го пресметаме/евалуираме со замена $k = \bar{k} + \chi$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar}{2m} k^2 = \frac{\hbar}{2m}\left(\bar{k}^2 + 2\bar{k}\chi + \chi^2\right) \Rightarrow$$

$$\psi = A(\bar{k}) \left(\int_{-\bar{\kappa}}^{+\bar{\kappa}} e^{i\chi x}\, e^{-i(\hbar t/2m)(\bar{k}^2 + 2\bar{k}\chi + \chi^2)}\, d\chi \right) \cdot e^{i\bar{k}x} =$$

$$= A(\bar{k})\, e^{i\bar{k}x}\, e^{-i\bar{\omega} t} \int_{-\bar{\kappa}}^{\bar{\kappa}} e^{i\chi x}\, e^{-i(\hbar\bar{k}/m)t\chi}\, e^{-i(\hbar/2m)t\chi^2}\, d\chi \quad \leftarrow \;! \; e^{ikx}$$

Воведена е вредноста на ω за $k = \bar{k} \Rightarrow \bar{\omega} = \omega(\bar{k}) = \dfrac{\hbar \bar{k}^2}{2m}$

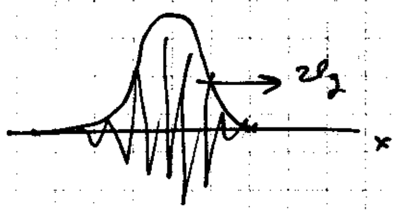
Втора апроксимација: третиот експоненцијален фактор под интегралот го апроксимираме на единица.

$$\psi = A(\bar{k}) \cdot e^{i(\bar{k}x - \bar{\omega} t)} \int_{-\bar{\kappa}}^{+\bar{\kappa}} e^{i(x - v_g t)\chi}\, d\chi \qquad \text{каде што} \quad v_g = \frac{\hbar \cdot \bar{k}}{m}$$

Ова е елементарен интеграл што ја дава десинусоидалната формула за брановиот пакет:

$$\psi = A(\bar{k})\, e^{i(\bar{k}x - \bar{\omega} t)}\, \frac{e^{i(x - v_g t)\bar{\kappa}} - e^{-i(x - v_g t)\bar{\kappa}}}{i(x - v_g t)} \Rightarrow$$

$$\boxed{\psi = 2A(\bar{k})\, e^{i(\bar{k}x - \bar{\omega} t)} \cdot \frac{\sin (x - v_g t)\bar{\kappa}}{x - v_g \cdot t}}$$

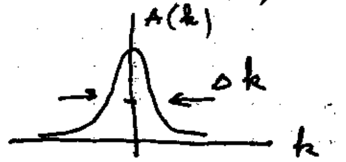


Обликот на оваа ф-ја од x во даден момент t е токму како очекуваниот на брановиот пакет: Осцилациите се локализирани во областа околу ~~централната~~ точката $x = v_g \cdot t$; целиот систем патува со групна брзина v_g во позитивната насока на x..

БРАНОВИ И БРАНОВИ ПАКЕТИ (4/4)

Нека брановиот пакет кој се состои од бранови чијашто структура е локализирана во дефиниран просторен интервал Δx, таквиот состав го конструираме таканаречено избираме амплитудна ф-ја $A(k)$ чијашто распределба е ограничена на ширина Δk. Може да се покаже дека Δx и Δk ја задоволуваат релацијата $\Delta x \cdot \Delta k \sim 1$

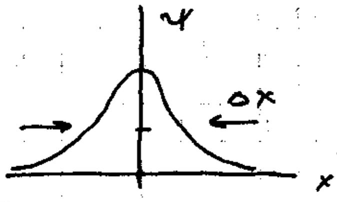
За $t=0$, $\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ikx} dk$ и нека $A(k) = e^{-\left(\frac{k}{\bar{k}}\right)^2}$
(распределба Гаусијан)
(максимумот е за $k=0$)



Со вакви бранови ф-ја опишуваме честичка што мирува.

$$\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k/\bar{k})^2}(\cos kx + i \sin kx)\,dk = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k/\bar{k})^2}\cos kx\,dk$$

(делот со синусот е непарна ф-ја а интегрирањето е симетрично па интегралот е нула)



од таблица: $\psi = \sqrt{\pi}\,\bar{k}\,e^{-(\bar{k}\cdot x/2)^2}$ (слика!!)

Може да се покаже дека овие ф-ии ја задоволуваат релацијата $\Delta x \cdot \Delta k \sim 1$. Ако $\bar{k}$ е мало, распределбата $A(k)$ е тесна а ψ е широка и обратно, за големо $\bar{k}$. Ваквото тврдење за Гаусовата распределба ја прави погодна за илустрација на математичкиот концепт за локализација.

Релацијата ($\Delta k \cdot \Delta x \sim 1$) се претвора во релација на неопределеноста ако величините k и p се поврзат со ($p = \hbar k$). Бидејќи интервалот на k вредности при конструирањето на брановиот пакет соодветствува на интервал $\Delta\omega$ во опсегот фреквенции а локализираниот состав од бранови минува низ некоја дадена локација за време од (интервал) Δt може да се покаже дека е исполнето: ($\Delta\omega \cdot \Delta t \sim 1$) Односно, преку врската ($E = \hbar\omega$) се добива: ($\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$).

Релациите ($\Delta x \cdot \Delta k \sim 1$) и ($\Delta\omega \cdot \Delta t \sim 1$) се тврдења за каков и да било вид на локализирани бранови. Релациите ($\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$) и ($\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$) кои се изведуваат од нив со помош на релациите на де Брољ: ($p = \hbar k$) и ($E = \hbar\omega$) се релации на неопределеноста на Хајзенберг.

РАВЕНКА НА ШРЕДИНГЕР

?? каква е брановата ф-ја $\psi(x,t)$ на бранот на материјата којшто се придружува, според де Бројли на движењето на слободна честичка?

Локализирана слободна честичка може да се опише со бранов пакет од обликот

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

Бидејќи $E = K = \frac{p^2}{2m}$, $\left\{ p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda}\frac{h}{2\pi} = \hbar k,\ E = hf = \frac{h}{2\pi} 2\pi f = \hbar\omega \right\}$, со земање ($V=0$)

$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ односно се добива дисперзионата равенка $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$.

Според тоа, за $\psi(x,t)$ се добива: $\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp i\left[kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right] dk$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} &= \int A(k)\,(ik)^2 \exp i\left[kx - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} t\right] dk \\ \frac{\partial\psi}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\left(-\frac{i\hbar}{2m}k^2\right) \exp i\left[kx - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} t\right] dk \end{aligned}\right\} \Rightarrow \frac{i\hbar}{2m}\cancel{k}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \cancel{k}\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Со споредба помеѓу овие две равенки се добива, равенка на Шредингер за движење на слободна честичка во една димензија.

$$\boxed{+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi}$$ за 1 димензија, $V=0$

Врската меѓу ω и k е израз на поврзаноста меѓу импулсот p и енергијата E на нерелативистичка честичка што се движи слободно ($V=0$): $E = p^2/2m$. Оваа врска важи за секоја компонента од брановиот пакет ψ.

! Добиената равенка може директно да се добие од $\left(E = \frac{p^2}{2m}\right)$ ако овој израз се интерпретира како врска меѓу диференцијалните оператори кои дејствуваат врз ψ

$$p^2 \to -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Важно: изведувањето на равенката на Шредингер не претставува научно изведување. Равенката (1) е претпоставена форма на ψ, која веројатно треба да ја претставува слободната честичка! Таа е хипотеза која треба да се провери со споредување на предвидените резултати!! Секако, таа ќе има одредени одлики на оригиналноста. Аналогна е на примената Њутновиот закон кој и тој се однесува на движење на слободна честичка (потенцијал $V=0$)

$V \neq 0$. $\quad E = \frac{p^2}{2m} + V \quad \Rightarrow \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi}$ во една димензија

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi} \to \text{во три димензии}; \left[\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]$$

ДРУГИ АСПЕКТИ НА ТЕОРИЈАТА НА ШРЕДИНГЕР
(ВЕРОЈАТНОСНА ИНТЕРПРЕТАЦИЈА)

Виталното прашање е да се најде кој соодветна интерпретација на решенијата на новата равенка. Шредингер во почетокот (1926) мислел дека ψ е физички бран кој може визуелно да се претстави. Но Макс Борн покажал дека е подобро ψ да се интерпретира како математичка бранова ф-ја а $|\psi|^2$ да биде основен квантитет на материјалниот бран што може да се набљудува. Според Борн секое прифатливо решение на р-ката на Шредингер треба да даде потполн опис на една физичка состојба на дадениот систем. Тоа значи дека сите физички особини на системот треба да се изведат од пронајденото решение, ψ.

$|\psi|^2 = \psi^*\psi$ се интерпретира како (густина на) веројатност системот да се најде во состојбата што се опишува со брановата ф-ја ψ.

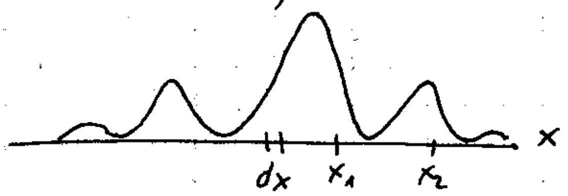
густина на веројатност

пример: интерференција низ две отвори:

Нека $\psi_1 = |\psi_1| e^{i\phi_1}$, $\psi_2 = |\psi_2| e^{i\phi_2}$, $\psi = \psi_1 + \psi_2$

$$|\psi|^2 = (\psi_1^* + \psi_2^*)(\psi_1 + \psi_2) = |\psi_1|^2 + \psi_2^*\psi_1 + \psi_1^*\psi_2 + |\psi_2|^2$$
$$= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_1||\psi_2|\left[\exp[i(\phi_1-\phi_2)] + \exp[-i(\phi_1-\phi_2)]\right]$$

Резултатот има дополнителен интерферентен член $2|\psi_1||\psi_2|\cos(\phi_1-\phi_2)$. Фазите ϕ_1, ϕ_2 се менуваат во секоја точка од просторот заради бранот, ~~...~~ и создаваат конструктивна и деструктивна интерференција, исто како за интерференција на светлината (ова е за една честичка)



густина на веројатноста за локализирана честичка во една димензија.

→ За случај веројатноста честичката да се најде во некој даден интервал dx во моментот t се претставува изразот

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

За конечен интервал (x_1, x_2) имаме:

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

; за целиот интервал $(-\infty, +\infty)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$$

; Но честичката мора да биде некаде па според тоа интегралот мора да биде еднаков на единица (сигурен настан)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad \int |\psi(\vec{r},t)|^2 d\tau = 1$$

услов за нормализација на ф-јата $\psi(x,t)$.

целиот простор

СТАЦИОНАРНИ СОСТОЈБИ

Равенката на Шредингер е парцијална диференцијална р-ка која во некои случаи (за некои форми на потенцијалот V) може да се реши со раздвојување на променливите. Значи, нека земеме $\Psi(x,t)=\psi(x)f(t)$. Со замена во р-ката на Шредингер се добива:

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

$$\frac{1}{\psi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\psi(x)\right]=\frac{1}{f(t)}\left[i\hbar\frac{d}{dt}f(t)\right]$$

! левата и десната страна зависат само од x и од t. Тоа е можно само ако се еднакви на константа,

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

A = константа на раздвојување ; V мора да се третира само како функција од x, не од t.

Од $i\hbar\frac{df}{dt}=Af \Rightarrow f(t)=e^{-iAt/\hbar}=\cos\frac{A}{\hbar}t-i\sin\frac{A}{\hbar}t$.

Тоа значи дека ψ, односно f, има константна аголна фреквенција $\omega=\frac{A}{\hbar}$. На овој вид временска ф-ја може да му се припише и еднозначна енергија $E=\hbar\omega=A$ што значи дека функцијата $\Psi(x,t)=\psi\cdot f$ опишува систем во кој честичката се наоѓа во состојба со точно определена енергија E.

Од $$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)}$$ } првата р-ка после замената {A=E}

Временски независна р-ка на Шредингер.

Ако вредноста на E соодветствува на физички прифатливо решение ψ(x) на р-ката на Шредингер, тогаш $\Psi(x,t)=\psi(x)\cdot f(t)$ е решение на почетната р-ка. Во тој случај дадената вредност E се нарекува сопствена вредност на енергијата а ψ(x) е сопствена функција.

Методот на раздвојување на променливите дава решенија на р-ката на Шредингер со следната форма: $$\boxed{\Psi(x,t)=\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}$$
Математичките особини на решенијата од овој вид опишуваат стационарни состојби на системот:

$|\Psi(x,t)|^2=|\psi(x)|^2$ (што е независно од t): Веројатностите асоцирани на соодветната временска ф-ја се независни од времето.

Нема никаква основа да се претпостави дека секоја временска ф-ја мора нужно да е од овој облик. Суперпозицијата на произволен број вакви решенија е исто така прифатливо решение на Шредингеровата р-ка затоа што таа е линеарна. Освен тоа определувањето на $\Psi(x,t)$ во секој конкретен проблем зависи од информацијата за почетната временска ф-ја $\Psi(x,0)$.

Со решавање на стационарната р-ка на Шредингер:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi+V\psi=E\psi \quad \text{или} \quad \psi''+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0$$ или во три димензии:

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

се добиваат множество од дозволени вредности за E и ψ за секоја зададена потенцијална ф-ја V(x). Тоа се енергетските нивоа и временските ф-ии на стационарните состојби за конкретниот физички систем.

НЕСТАЦИОНАРНИ СОСТОЈБИ (пример)

Нека $E_1, E_2, \dots$ бидат сопствените вредности на енергијата кои соодветствуваат на [illegible] бранови фун на стационарните состојби,
$\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}$, $\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$, …

Честичка може се најде во една од двете состојби со стационарна густина на веројатноста. Но да претпоставиме дека состојбата во која се наоѓа честичката е суперпозиција на две стационарни состојби и дека состојбата може да се опише со брановата ф-ја

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

Оваа ф-ја ја добиваме од [illegible] решение од р-ката на Шредингер ако во почетниот $t=0$ имаме: $\psi(x,0) = a_1\psi_1(x,0) + a_2\psi_2(x,0) =$ (почетен услов)

$$= a_1\psi_1(x) + a_2\psi_2(x)$$

Во ваков случај може да се види дека $\psi^*\psi$ __не е__ независно од t:

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(a_1^*\psi_1^*(x)e^{iE_1t/\hbar} + a_2^*\psi_2^*(x)e^{iE_2t/\hbar}\right)\left(a_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + a_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}\right) = |a_1|^2|\psi_1(x)|^2 + a_1^*a_2\psi_1^*(x)\psi_2(x)e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} + a_2^*a_1\psi_2^*(x)\psi_1(x)e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar} + |a_2|^2|\psi_2(x)|^2$$

Овој израз содржи два __осцилирачки__ членови со аголна фреквенција

$$\omega = \frac{|E_1-E_2|}{\hbar}, \quad |E_1-E_2| = hf$$

Состојбата која е претставена со брановата ф-ја $\psi(x,t)$ не е стационарна што значи дека при(?) се очекува дека сите нејзини веројатносни карактеристики ќе осцилираат со истата аголна фреквенција ω.

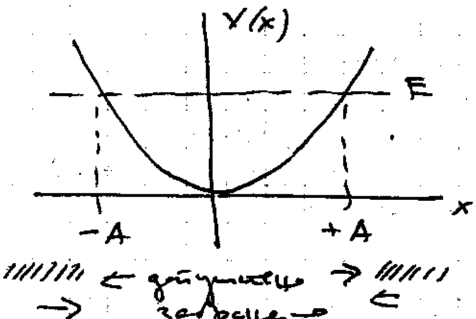
(КВАНТЕН) ХАРМОНИСКИ ОСЦИЛАТОР

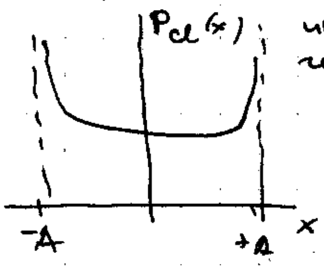
$V(x) = \frac{k}{2}x^2 \Rightarrow F = -\frac{dV}{dx} = -kx$. Од Њутновиот закон: $m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx$

$x(t) = A\cos(\omega_0 t + \phi)$, $v(t) = \frac{dx}{dt} = -\omega_0 A \sin(\omega_0 t + \phi)$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$

A: амплитуда, ω_0: аголна фреквенција, ϕ: фазен агол. $E = K + V = \frac{mv^2}{2} + \frac{k}{2}x^2 =$
$= \frac{m}{2}\omega_0^2 A^2 \sin^2(\omega_0 t + \phi) + \frac{k}{2}A^2\cos^2(\omega_0 t + \phi) = \frac{k}{2}A^2$; се зачувува.

$v = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{k}{2}x^2\right)} = \sqrt{\frac{k}{m}(A^2 - x^2)}$ Очигледно е дека x^2 не смее да го надмине A^2 за v да може да се интерпретира како брзина на класична честичка.



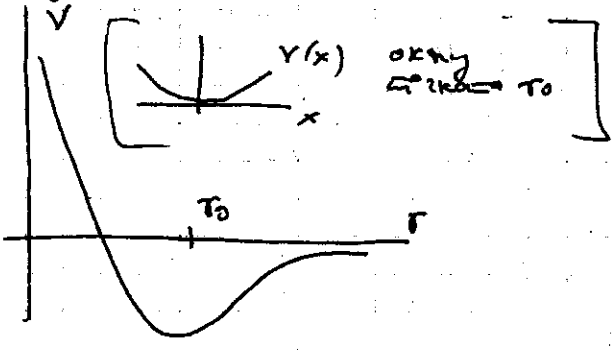


класична веројатност за наоѓање на честичка

$$P_{cl}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}$$

Веројатноста честичката да се најде во некој одреден интервал dx изнесува $(P_{cl}(x)dx)$ и таа е пропорционална со $(\omega_0 dt)$ односно со делот од циклусот на осцилирање што честичката го поминува во дадениот интервал.

Пример:
потенцијалната енергија на двоатомна молекула.



$$V = V(r_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2V}{dr^2}\right)_{r_0} x^2 + \dots$$

! нема линеарен член затоа што $\left.\frac{dV}{dr}\right|_{r_0} = 0$.

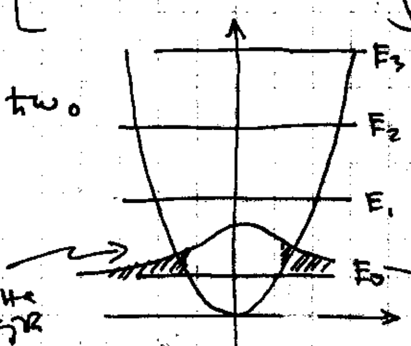
квантномеханички: р-ка на Шредингер $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{kx^2}{2}\right)\psi = 0$

Целобројните решенија даваат: $E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)$
За $n=0$ се добива $E_0 = \hbar\omega_0/2$

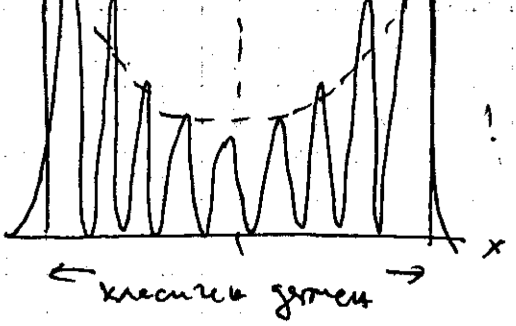
$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$ е најниската енергија што може да ја има осцилаторот. Соодветната состојба ја е зададена со изразот:

$$\psi_0(x,t) = \left(\frac{mk}{\pi^2\hbar^2}\right)^{1/8} e^{-\sqrt{mk}\cdot x^2/2\hbar}\, e^{-iE_0 t/\hbar}$$ [основна состојба]

Разликата меѓу нивоата е константна: $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0$
Таа е еднаква со разликата што ја претпоставил Планк кога го разгледувал зрачењето од црното тело.



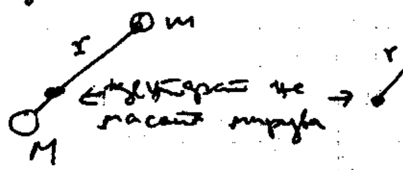
! тунелирање во недозволената област.



! Густина на веројатноста за состојбата $n=10$ на хармонискиот осцилатор. Средната вредност на распределбата се совпаѓа со класичната густина на веројатноста $P_{cl}(x)$.

ЦЕНТРАЛНИ СИЛИ

Од искуството со класичната физика знаеме дека општиот проблем на движење под дејство на централна сила покажува дека општиот проблем се сведув[а]



$\mu = \frac{mM}{M+m}$ (редуцирана маса)

проблем на две тела $\Leftrightarrow$ проблем на едно тело

Под претпоставка дека силата што дејствува врз телото со маса μ е конзервативна, таа може да се изведе од потенцијалната енергија V:
$$\boxed{\vec{F} = -\hat{\vec{r}}\,\frac{dV(r)}{dr}}$$

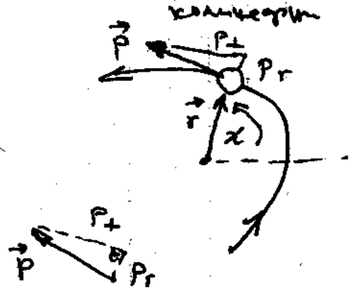
Од $\vec{p} = \mu\frac{d\vec{r}}{dt}$ и $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \frac{d\vec{L}}{dt} = \underbrace{\frac{d\vec{r}}{dt}\times\vec{p}}_{\text{колинеарни}} + \vec{r}\times\frac{d\vec{p}}{dt} = \underbrace{\vec{r}\times\vec{F}}_{\text{колинеарни}} = 0$$

$\Rightarrow$ $\vec{L}$ е константен вектор, односно класичната орбита на честичката лежи во една фиксна рамнина

$|\vec{L}| = L = r p_\perp$

каде што ~~$p_r = \mu\frac{dr}{dt}$~~ $p_\perp = \mu r\frac{d\chi}{dt}$



$$p_r = \mu\frac{dr}{dt}$$
$$p_\perp = \mu r\frac{d\chi}{dt}$$

Со помош на овој резултат е претставен изразот за кинетичката енергија,

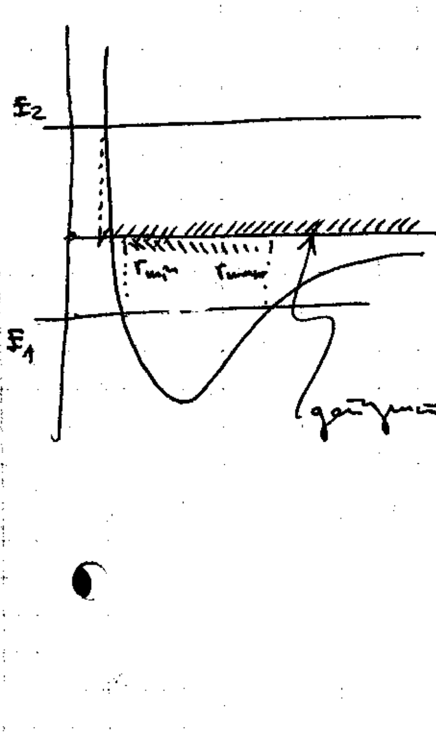
$$\frac{p^2}{2\mu} = \frac{p_r^2 + p_\perp^2}{2\mu} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2} \Rightarrow \underbrace{\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2}}_{\text{кинетичка енергија}} + V(r) = E$$

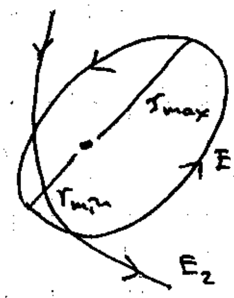
Оваа равенка е искажана само за радијалното растојание r.

Ако дефинираме: $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2}$ равенката станува $\frac{p_r^2}{2\mu} + V_{eff}(r) = E$

односно, се добива форма иста за еднодимензионално движење со некој ефективен потенцијал $V_{eff}(r)$ во кој е вклучена и таканаречената центрифугална потенцијална бариера: $L^2/2\mu r^2$.

Пример: Нека V има привлечна потенцијална енергија во Кулоновска форма: $V(r) = -b/r$ $(b>0)$ $\Rightarrow$ $V_{eff}(r) = -\frac{b}{r} + \frac{L^2}{2\mu r^2}$





L = фиксно!

дозволени области за E_1, E_2.

Центрифугалната бариера секогаш е одбивна и за мали r доминира; честичката не може да дојде до $r=0$.

Од равенката $E = V_{eff}(r)$ се добиваат повратните точки односно минималното и максималното растојание за зададена енергија E. За $E_1<0$ имаме врзана орбита со две повратни точки, r_{min}, r_{max} а за $E_2>0$ имаме неврзана орбита со една повратна точка.

ШРЕДИНГЕРОВА РАВЕНКА ВО СФЕРНИ КООРДИНАТИ ... →

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi \qquad ; \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\Psi = \psi(r,\theta,\varphi)\, e^{-iEt/\hbar} \qquad r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

Со ваквата форма на брановата ф-ја, зависноста од времето се претставува со стационарна вредност на енергијата E, бидејќи брановата ф-ја ја задоволува равенката $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi$ што стриктно значи дека состојбата е со стационарна вредност на енергијата.

Претпоставената состојба ψ е стационарна, брановата ф-ја ја дава густината на веројатноста која што е независна од времето: $|\Psi|^2 = |\psi|^2$ а енергијата на таа состојба се добива без неопределеност!

се очекува добивање на множество дискретни енергии и функции ψ, ⇒

Брановата ф-ја $\psi(r,\theta,\varphi)$ и вредноста за E се определуваат натаму со решавање на равенката на Шредингер во сферни координати, аналитички или нумерички:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi\right) + V(r)\psi = E\psi$$

Оваа парцијална диференцијална равенка се решава со методот на раздвојување на променливите. Првиот чекор е решението да се бара во форма: $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$ ... Како резултат на конечното решавање, се добива множество на ~~стационарни~~ бранови ф-ии за стационарните состојби со следнава структура:

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi,t) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)\, e^{-iE_{nl}t/\hbar}$$

Состојбите на овој централносиметричен проблем се одредени со специфицирањето на три квантни броја: n, l, m. Квантниот број m се појавува во факторот $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ кој ќе се добие во формата: $Y_{lm}(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\, e^{im\varphi}$

(сферни хармоници)

За него важи условот:
$m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$

~~Квантниот број l може да прима вредности од N~~

Главниот заклучок од проблемот на централните сили е фактот дека постојат бранови ф-ии (состојби) кои истовремено се својствени ф-ии на енергијата E, квадратот на аголниот момент L^2 и z-компонентата на аголниот момент. Овие три независни физички величини можат да се определат истовремено без неопределеност. Појавувањето на квантните броеви n, l, m е резултат на овие состојби.

Бидејќи зависноста на Ψ_{nlm} од φ, t е само преку едноставни фазни фактори $e^{im\varphi}$, $e^{-iE_{nl}t/\hbar}$, чии модули се еднакви на единица, густината на веројатноста е независна од φ, t односно: $|\Psi_{nlm}|^2 = |R_{nl}(r)|^2 |\Theta_{lm}(\theta)|^2$:

Овој "облак од веројатност" е стационарен и симетричен околу оската z.

$|\Psi^2|d\tau$ = веројатноста (густина) да се најде во елементот $d\tau$.

$\langle L^2\rangle = \hbar^2 l(l+1)$, $\langle L_z\rangle = \hbar m$

ЕДНОЕЛЕКТРОНСКИ АТОМ — НИВОИ

На секоја стационарна состојба на атомот и се придружува тројка квантни броеви (nlm). За секое фиксно n (главен квантен број) $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ (орбитален квантен број) и за секое фиксно l, $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ (азимутален квантен број). Сите овие комбинации на дозволени вредности на (nlm) за фиксно l означуваат состојби со иста енергија E_n. Ваквата појава на повеќе различни состојби со иста енергија се нарекува дегенерација.

$n=1$ $\quad l=0 \quad m=0 \qquad \psi_{100} = R_{10} Y_{00} e^{-iE_1 t/\hbar}$ — недегенерирана

$n=2$ $\quad l=0 \quad m=0 \qquad \psi_{200} = R_{20} Y_{00} e^{-iE_2 t/\hbar}$
$\qquad\;\; l=1 \quad m=-1,0,+1 \qquad \psi_{21m} = R_{21} Y_{1m} e^{-iE_2 t/\hbar}$ — четири дегенерирани состојби

$n=3$ $\quad l=0 \quad m=0 \qquad \psi_{300} = R_{30} Y_{00} e^{-iE_3 t/\hbar}$
$\qquad\;\; l=1 \quad m=-1,0,+1 \qquad \psi_{31m} = R_{31} Y_{1m} e^{-iE_3 t/\hbar}$
$\qquad\;\; l=2 \quad m=-2,-1,0,+1,+2 \qquad \psi_{32m} = R_{32} Y_{2m} e^{-iE_3 t/\hbar}$ — девет дегенерирани состојби

...

$\uparrow E_n = E_{nl}$ (не зависи од l)

0 $\quad E_\infty$

$-0{,}85$ $\quad E_4 - n=4 \quad \underline{l=0}\ 4s \quad \underline{l=1}\ 4p \quad \underline{l=2}\ 4d \quad \underline{l=3}\ 4f$ — N слој, 16 состојби

$-1{,}51$ $\quad E_3 - n=3 \quad \underline{l=0}\ 3s \quad \underline{l=1}\ 3p \quad \underline{l=2}\ 3d$ — M слој, 9 состојби

$-3{,}4$ $\quad E_2 - n=2 \quad \underline{l=0}\ 2s \quad \underline{l=1}\ 2p$ — L слој, 4 состојби

E_n (eV)

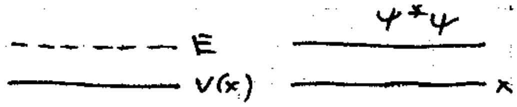
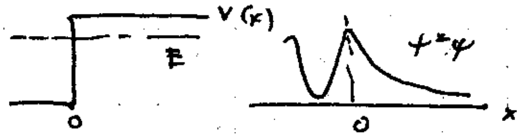
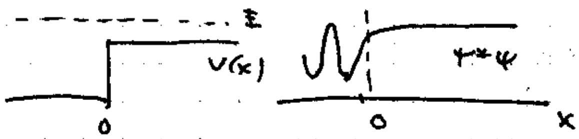
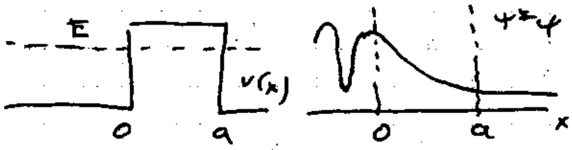
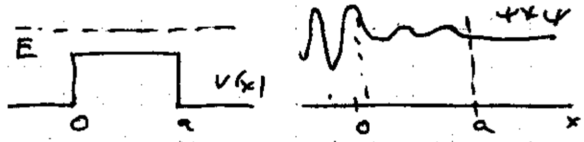
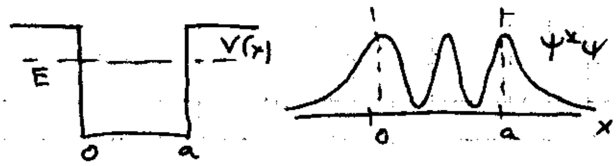
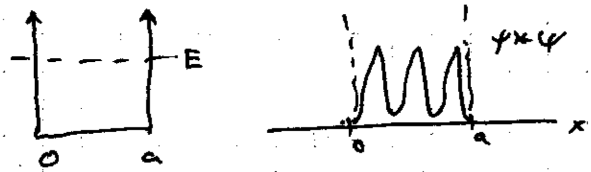
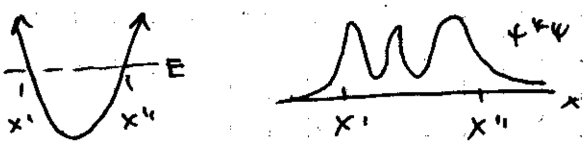
$-13{,}6$ $\quad E_1 - n=1 \quad \underline{l=0}\ 1s$ — K слој, една состојба

Секој слој (n) се состои од n орбитали $(l=0,1,2,\dots,n-1)$ и секоја таква (nl) орбитала се состои од вкупно $(2l+1)$ состојби $(m=-l,-l+1,\dots,l-1,l)$.
Според спектроскопските ознаки на секое $(l=0,1,2,\dots)$ му се придружува $(s\,p\,d\,f\,g\,h \dots)$; на секое $(n=1,2,3,4\dots)$ имаме (KLMN... слоеви).

Визуелизацијата на атомот во некоја од неговите состојби (стационарни) пак (денешно) ќе се спроведе со веројатносната интерпретација на соодветната бранова функција ψ_{nlm}. Веројатноста за наоѓање на електронот во дел на просторот, во елемент од просторот $d\tau = r^2 dr\, d\Omega$ е дадена со изразот преку

$$|\psi_{nlm}|^2 d\tau = \left[(R_{nl})^2 r^2 dr\right]\left[|Y_{lm}|^2 d\Omega\right]$$

ПРИМЕРИ НА ПОТЕНЦИЈАЛИ

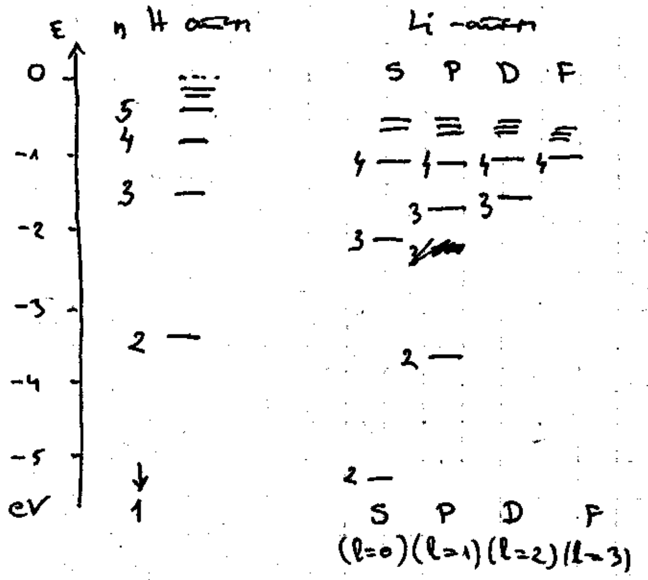
нулти потенцијал	протон во сноп		резултатите се користат во други системи
скалест потенцијал	спроведен електрон во близина на површина од метал		пробивање во исклучената област
потенцијален скалест	неутрон во внатрешноста на јадрото		делумна рефлексија од дисконтинуитетот
потенцијална бариера	α честичка во Кулонова бариера		тунелирање
потенцијална бариера	електрон се расејува од позитивно јонизиран атом		нема рефлексија при одредени енергии
конечна правоаголна јама	врзан неутрон во јадрото		квантизирање на енергијата
бесконечна правоаголна јама	молекула затворена во "кутија"		апроксимација на конечна правоаголна јама
потенцијал на едноставен осцилатор (хармониски)	атом во молекула под вибрации		"нулта" енергија

ГУБЕЊЕ НА ОРБИТАЛНАТА ДЕГЕНЕРАЦИЈА ВО СПЕКТРИТЕ НА АЛКАЛНИТЕ АТОМИ

Алкалните атоми имаат по еден слабо врзан надворешен електрон т.н. валентен електрон додека сите други (Z−1) електрони се поцврсто врзани. Индивидуалните електронски состојби, дури и кај повеќеелектронските атоми можат да се опишат со помош на квантни броеви n, l, m, но соодветните енергии веќе не се истите како кај водородниот атом, како резултат на дополнителното заемодејство меѓу електроните.

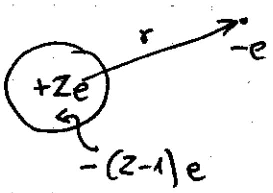
енергии за јонизација на неутрален атом (eV)

$_1H$	13,59
$_2He$	24,5 ← скок надолу
$_3Li$	5,4
$_4Be$	9,3
$_5B$	8,3
$_6C$	11,3
$_7N$	14,6
$_8O$	13,6
$_9F$	17,4
$_{10}Ne$	21,6 ← скок надолу
$_{11}Na$	5,14
$_{12}Mg$	7,64

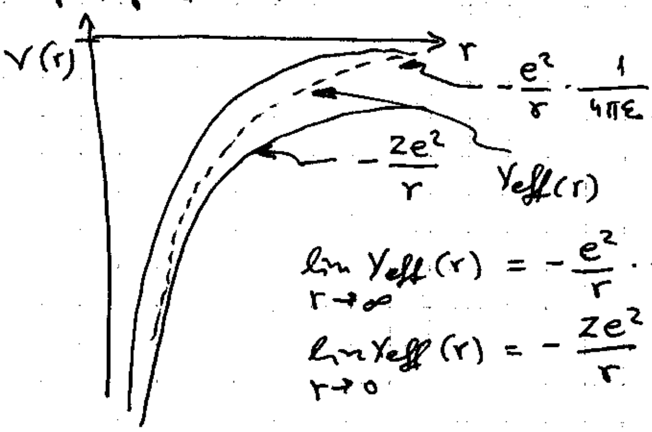


емпириски податоци на највисоките енергетски нивоа на Li

Од цртежот се гледа дека е укината орбиталната дегенерација (по l); состојбите со исто n, но различно l, имаат различни енергии. Наједноставен модел за овој тип атоми е едноелектронски екраниран атом.



„валентниот електрон" е лоциран на релативно големо растојание r од јадрото и се движи во ефективен потенцијал $V_{eff}(r)$



$$\lim_{r\to\infty} V_{eff}(r) = -\frac{e^2}{r}\cdot\frac{1}{4\pi\varepsilon}$$

$$\lim_{r\to 0} V_{eff}(r) = -\frac{Ze^2}{r}\cdot\frac{1}{4\pi\varepsilon}$$

Ефективниот потенцијал повеќе не е пропорционален со r^{-1} а токму таа пропорционалност е главниот (математички) фактор за дегенерацијата на енергетските нивоа кај водородниот атом!

ОРБИТАЛЕН И СПИНСКИ МАГНЕТИЗАМ. ФИНА СТРУКТУРА

експеримент: Голем број од спектралните линии на атомите се дублети.

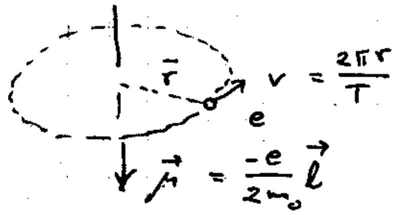
теорија: За објаснување на ваквата дублетна структура потребно е да се направат дополнувања на досегашната теорија.

1) орбиталниот агол. момент l е придружен со магнетен момент $\vec{\mu}_l$.
2) електронот има спин $\vec{s}$ и нему мора да му се придружи магнетен момент $\vec{\mu}_s$.
3) двата магнетни моменти заемодејствуваат, тие можат да бидат паралелни или антипаралелни. Овие две конфигурации имаат различни енергии што доведува до појава на фина структура во спектрите.

МАГНЕТЕН МОМЕНТ НА ОРБИТАЛНОТО ДВИЖЕЊЕ

Од електродинамиката е познато дека течење на струја во круг создава поле на магнетен дипол, дефиниран како $\vec{\mu} = I \cdot \vec{A}$ [Am^2]

$\vec{A}$ – вектор што е нормален на рамнината на струјната јамка, а еднаков на опфатената површина.



Ако времето на еден завртување на електронот е $T = 1/f = 2\pi/\omega$ тогаш низ оваа струјна јамка тече струја ($q = -e$): $I = \frac{q}{T} = -\frac{e\omega}{2\pi}$

Според тоа: $\mu = IA = -\frac{1}{2} e\omega r^2$

Ако го воведеме модулот орбиталниот агол. момент $|\vec{L}| = mvr = m\omega r^2$ добиваме:

$$\boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_0}\vec{L}}$$

!! $\vec{L}$ орбитален агол. момент
$|\vec{L}|$ негова магнитуда
l орбитален квантен број !!

Ако полнежот q е позитивен, $\vec{\mu}$ и $\vec{L}$ ќе бидат во иста насока ([illegible]

Пропорционалноста меѓу аголниот момент и магнетниот момент е позната уште и како магнетомеханички паралелизам. Фактот дека важи и во атомот произлегува од експериментите.

$$\boxed{\mu_B = \frac{e}{2m_0}\hbar = 9{,}27 \cdot 10^{-24}\ Am^2}$$

Боровиот магнетон е магнетниот момент на модул еднаков на "електрон со орбитален агол. момент" $|\vec{L}| = \hbar$. Магнетните моменти на електроните често ќе се даваат во единици на μ_B.

За магнитудата на магнетниот момент на некоја орбита со агол. момент l (орбитален квантен број) важи следниот израз:

$$\boxed{\mu_l = \mu_B\sqrt{l(l+1)} \Rightarrow |\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}}$$

Бидејќи $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_0}\frac{\hbar}{\hbar}\vec{L} = -\mu_B\frac{\vec{L}}{\hbar}$

во општ случај $\vec{\mu}_l = -g_l \cdot \mu_B \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}$; g_l = жиромагнетен фактор на пропорционалност на Ланде.

$$g_l = \frac{\text{магнетен момент во единици } \mu_B}{\text{агол. момент во единици } \hbar} = \frac{-\vec{\mu}_l/\mu_B}{\vec{L}/\hbar}$$

СПИН И МАГНЕТЕН МОМЕНТ НА ЕЛЕКТРОНОТ 1/2

Спинот го воведуваат Uhlenbeck и Goudsmit во 1925 година за да ги објаснат спектроскопските набљудувања. Расцепувањето на број спектрални линии во магнетно поле може да се објасни ако се претпостави дека електронот има спински аголен момент $\vec{S}$

$$\boxed{|\vec{S}| = \hbar\sqrt{s(s+1)}}$$

и придружен магнетен момент: $\boxed{\vec{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m_0}\vec{S}}$

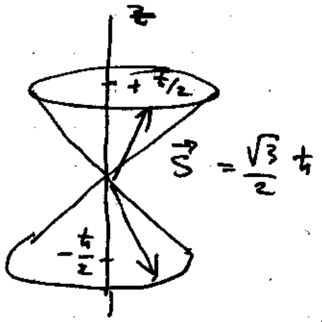
s = спински квантен број

Разликата со изразот $\left[\vec{\mu}_L = -g_L \frac{e}{2m_0}\vec{L}\right]$ е во различниот "g" фактор.

g_L (за електрон) = 1
g_s (за електрон) = 2,0023

Во 1928 година Дирак покажал дека спинот на електронот е нужна последица на релативистичката квантна теорија (теоријата на Шредингер е нерелативистичка) од која се добива $g_s = 2$. Малата разлика меѓу предвидената и експерименталната вредност нема да ја објаснуваме да се ...

Во однос на некоја зададена оска, проекцијата на спинот може да ги има вредностите $m_s = -s, \dots, +s$ слично како за орбиталниот момент. За електронот $s = 1/2$, $m_s = -1/2$ или $+1/2$. По магнитуда спинот е еднаков на $|\vec{S}| = \hbar\sqrt{3}/2$.



z-компонентата на $\vec{S}$ има вредност $\pm\hbar/2$ **без** неодреденост.

Со воведувањето на уште еден квантен број се менува претходната ознака за магнетниот квантен број m. Сега имаме два независни индекси m_l, m_s со кои се одредуваат состојбите во зависност од z компонентите на $\vec{L}$ и $\vec{S}$.

Една стационарна состојба на еднoелектронски атом е одредена со придружување на четири квантни броја $(n\, l\, m_l\, m_s)$ за комплетна конфигурација на квантната состојба.

$$\Psi_{nlm_lm_s} = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\theta,\varphi)\, e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}}\ (\uparrow \text{ или } \downarrow)$$

Новиот квантен број го удвојува бројот на состојбите со што сега во K слојот има 2 електрони, во L слојот има 8 состојби, во M има 18 ...

Пример: векторот $\vec{S}$ во однос на z оската е под агол $\arccos\left(S_z/\sqrt{S^2}\right) = \arccos\left(\frac{\hbar/2}{\sqrt{3}\hbar/2}\right) = 54,7°$. Азимуталната ориентација е потполно неодредена.

Спинскиот магнетен момент $\vec{\mu}_s$ е антипаралелен со $\vec{S}$. Неговата големина, изразена во Боров магнетон е: $\sqrt{\mu_s^2} = \frac{g_s\mu_B}{\hbar}\sqrt{S^2} = \frac{2\mu_B}{\hbar}\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar = \sqrt{3}\mu_B$

! Споредете со магнитудата на орбиталниот магнетен момент за еднoелектронски атом $\sqrt{\mu_L^2} = g_L\mu_B\sqrt{l(l+1)}$

од каде може да се добијат вредностите: $0, \sqrt{2}\mu_B, \sqrt{6}\mu_B \dots$ за $l = 0, 1, 2, \dots$

Енергетски нивоа E_n и дегенерирани состојби $\psi_{n l m_l m_s}$ за едноелектронски атом. Динамиката на атомот е раководена од само од Кулоновата сила. За секоја тројка квантни броеви $(n\, l\, m_l)$ спинот на електронот може да биде или ↑ или ↓.

		$l=0$ ↑ или ↓	$l=1$ ↑ или ↓	$l=2$ ↑ или ↓	$l=3$ ↑ или ↓	…	
… E_4	$n=4$	4s (1×2)	4p (3×2) …	4d (5×2)	4f (7×2)		N 32 состојби
E_3	$n=3$	3s (1×2)	3p (3×2)	3d (5×2)			M 18 состојби
E_2	$n=2$	2s (1×2)	2p (3×2)				L 8 состојби
E_1	$n=1$	2s (1×2)					K 2 состојби

$$\psi_{n l m_l m_s} = R_{nl}(r)\, Y_{l m_l}(\theta,\varphi)\, e^{-iE_n t/\hbar}\ (\uparrow \text{ или } \downarrow)$$

СОБИРАЊЕ НА ОРБИТАЛЕН И СПИНСКИ АГОЛЕН МОМЕНТ (1/2)

Аголниот момент на едноелектронскиот атом ги вклучува и орбиталното движење и електронскиот спин. Секој од нив придонесува со по свој магнетен момент што значи и свое сопствено заемодејство со применето магнетно поле.

Под <u>вкупен аголен момент</u> на атомот се подразбира збирот $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Ова равенство треба да важи за орбиталниот и спинскиот аголен момент со <u>квантувани</u> магнитуди и ориентации. Доколку векторот $\vec{J}$ е квантномеханички аголен момент што значи двете величини (J^2) и (J_z) би морале да задоволуваат правила за квантување слични на квантните својства на $\vec{L}$ и $\vec{S}$. Значи мора да постои дискретен квантен број (j) таков што квантуваните вредности на (J^2) да се појавуваат како сопствени вредности од обликот: $\hbar^2 j(j+1)$. (j) се нарекува <u>квантен број на вкупниот аголен момент.</u>

На секоја дозволена вредност на j и се придружува множество квантни броеви m_j и соодветни групи сопствени вредности на J_z.

$(\hbar m_j)$ со $m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$

Со парот на (j, m_j) овие правила ги изразуваат квантуваните магнитуди и ориентации на векторот $\vec{J}$, исто како што квантните броеви (l, m_l) го одредуваат квантуваното поведение на векторот $\vec{L}$.

Од $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \Rightarrow m_j = m_l + m_s$, $J_z = L_z + S_z$

m_j е полуцелоброен број $= m_l$ (целоброен) $+ m_s$ (полуцелоброен број)

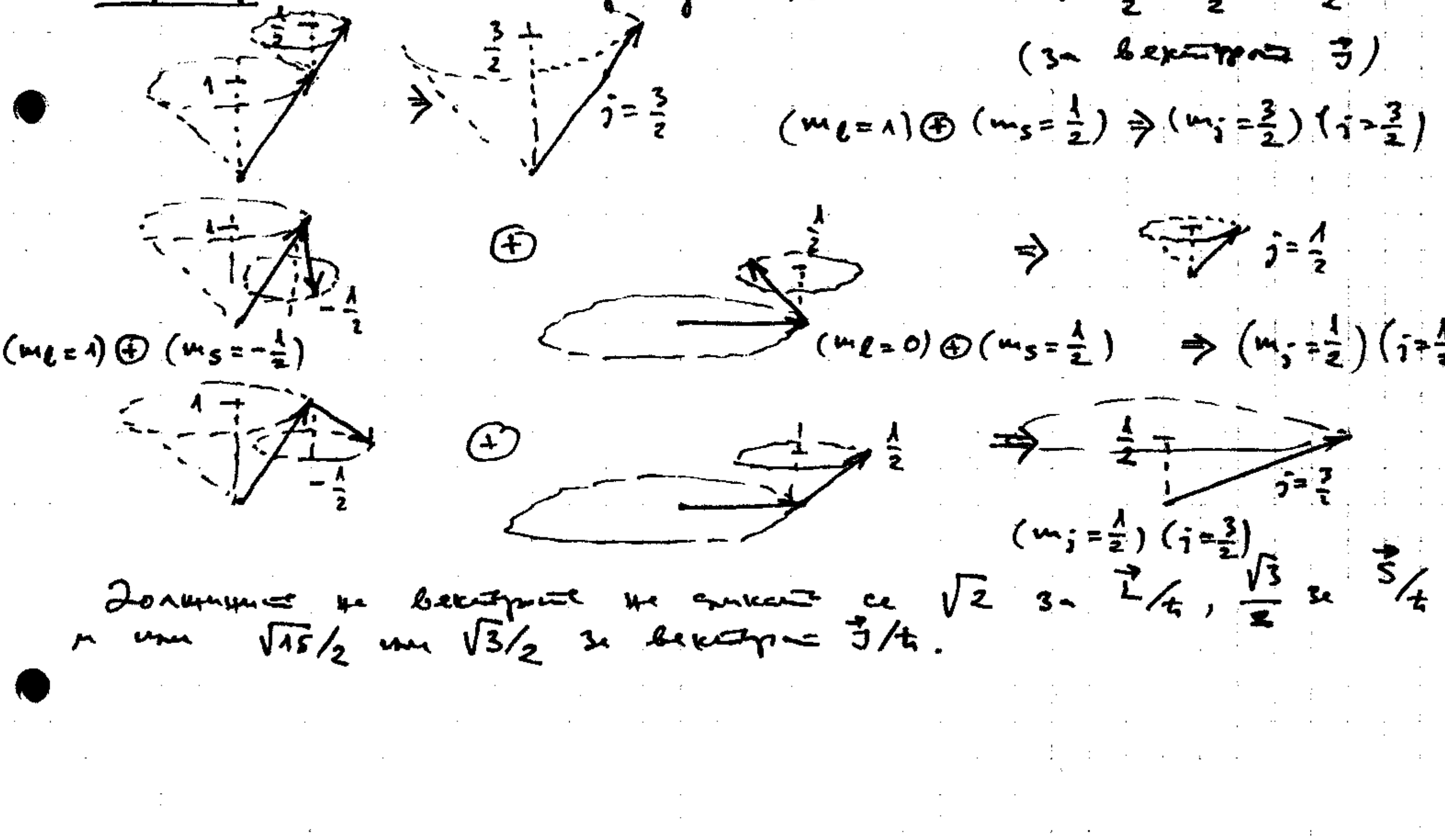
$\Rightarrow (j)$ се движи меѓу позитивните полуцели броеви $1/2, 3/2, 5/2, \ldots$

Во специјалниот случај $l=0$, $\vec{L}$ не придонесува кон $\vec{J}$ $\Rightarrow j = \frac{1}{2}$

За секое $l \neq 0$ [illegible] $\Rightarrow j = l + 1/2$, $j = l - 1/2$.

<u>пример</u>: $l=1$ (во единици $\hbar$). $1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ или $\frac{1}{2}$

(за векторот $\vec{J}$)



Должините на векторите на сликата се $\sqrt{2}$ за $\vec{L}/\hbar$, $\frac{\sqrt{3}}{2}$ за $\vec{S}/\hbar$ и или $\sqrt{15}/2$ или $\sqrt{3}/2$ за векторот $\vec{J}/\hbar$.

СОБИРАЊЕ НА ОРБИТАЛЕН И СПИНСКИ АГОЛЕН МОМЕНТ (2/2)

Енергетски нивоа E_n и дегенерирани состојби Ψ_{nljm_j} за еднoелектронски атом како алтернативен начин за нумерирање на состојбите во споредба со $\Psi_{nlm_lm_s}$.

Оваа трансформација не ги променува функциите туку го пренесува првичното множество $(n l m_l m_s)$ квантни броеви во $(n l j m_j)$. Состојбата со дадена енергија E_n има дозволени квантни броеви $l = 0, 1, \dots, n-1$ како и претходно со тоа што сега секоја вредност на l (освен $l=0$) дозволува два избора за (j): $(j = l + 1/2)$ или $(j = l - 1/2)$ и секоја од овие (j) вредности дозволува $(2j+1)$ вредности за (m_j). Бројот на дегенерирани состојби со енергија E_n сега е даден преку вкупниот број на (m_j) вредности и сè уште е еднаков на $(2n^2)$ како што и се очекува.

На сликата е воведена спектроскопската нотација (nL_j) со $S\,(l=0)$, $P\,(l=1)$, … аналогно на симболите s, p, d, f … за еднoелектронските состојби.

	$l=0$, $j=1/2$	$l=1$, $j=1/2$	$l=1$, $j=3/2$	$l=2$, $j=3/2$	$l=2$, $j=5/2$	$l=3$, $j=5/2$
E_4 $n=4$	(2) $4S_{1/2}$	(2) $4P_{1/2}$	(4) $4P_{3/2}$	(4) $4D_{3/2}$	(6) $4D_{5/2}$	(6) $4F_{5/2}$
E_3 $n=3$	(2) $3S_{1/2}$	(2) $3P_{1/2}$	(4) $3P_{3/2}$	(4) $3D_{3/2}$	(6) $3D_{5/2}$	
E_2 $n=2$	(2) $2S_{1/2}$	(2) $2P_{1/2}$	(4) $2P_{3/2}$			
E_1 $n=1$	(2) $1S_{1/2}$					

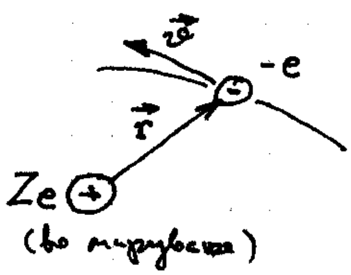
!! Треба да се истакне дека овие енергетски нивоа сè уште се одредени само од ефектите на Кулоновата сила. Физичкото оправдување зошто се користат квантните броеви $(n l m_l m_s)$ во однос на $(n l j m_j)$ ќе биде дадено подоцна.

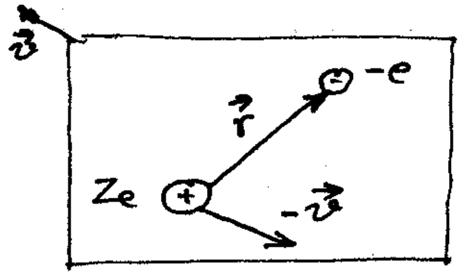
!! Можеме да продолжиме со употребата на m_l и m_s со дадени L_z и S_z ако ги задржуваат својството да се одделно зачувани аголни моменти.

пример:

СПИН - ОРБИТАЛНО ЗАЕМОДЕЈСТВО

Енергетските нивоа на еднoелектронскиот атом отстапуваат од резултатите што беа прикажани на претходните мени благодарение на два дополнителни динамички ефекти. Нивната природа е релативистичка а поранешната е внатрешна во споредба со Кулоновата енергија. Еден од нив е појавата на фина структура меѓу дегенерираните состојби кое резултира на спин-орбитално заемодејство односно на внатрешното магнетно поле на атомот - неговото влијание врз спинот на електронот.





орбиталното движење во атомот во два референтни системи; во првиот мирува јадрото а во вториот мирува електронот

Во референтниот систем на електронот јадрото се движи со брзина $(-\vec{v})$ и создава магнетно поле во моменталната локација на електронот. Од Био-Савар-овиот закон (Biot-Savart)

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{Ze(-\vec{v})\times\vec{r}}{r^3} \quad \text{Бидејќи} \left(\vec{E} = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{r}}{r^3} \quad \text{и} \quad \mu_0\varepsilon_0 = \frac{1}{c^2}\right) \Rightarrow \vec{B} = -\frac{\vec{v}\times\vec{E}}{c^2}$$

Овој израз опишува релативистички ефект во кој електронот што се движи со мала брзина $\vec{v}$ чувствува влијание на магнетно поле (низ електричното поле $\vec{E}$)

$$\vec{B}_{\text{внатрешно}} = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{r}\times\vec{v}}{c^2 r^3} = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{L}}{m_e c^2 r^3} \qquad (\vec{L} = m_e\vec{r}\times\vec{v})$$

Магнетниот момент на електронскиот спин заемодејствува со ова внатрешно магнетно поле на местото на кое моментално се наоѓа електронот, со истата енергија на заемодејствување како во случајот со Лармаровата прецесија.

$$V_{SL} = -\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}_{\text{внатрешно}} \Rightarrow V_{SL} = \left(+g_s\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}\right)\cdot\left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 m_e c^2 r^3}\vec{L}\right)$$

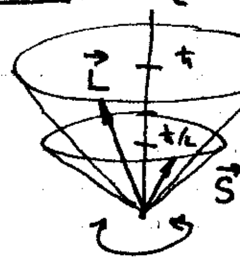
Бидејќи $g_s \approx 2$ за електрон

$$V_{SL} = \left(\frac{e}{m_e}\vec{S}\right)\cdot\left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 m_e c^2 r^3}\vec{L}\right) = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{S}\cdot\vec{L}}{m_e^2 c^2 r^3}$$

Бидејќи електронот е во состојба на забрзано движење треба да се додаде уште еден кинематски (релативистички) член познат како прецесија на Томас (според L.H.Thomas) па сè заедно даваат:

$$\boxed{V_{SL} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{S}\cdot\vec{L}}{2m_e^2 c^2 r^3}}$$

Спин-орбиталното заемодејство ја оневозможува полезноста на состојбите $\psi_{n l m_l m_s}$. Квантните броеви m_l, m_s можат да се користат како добри квантни броеви за определување на стационарните состојби сè додека можеме да ги одредиме сопствените вредности независно за L_z и за S_z. Имено, кога независно прецесирачки вектори $\vec{L}$ и $\vec{S}$ претставуваат состојби со добри квантни броеви m_l, m_s.

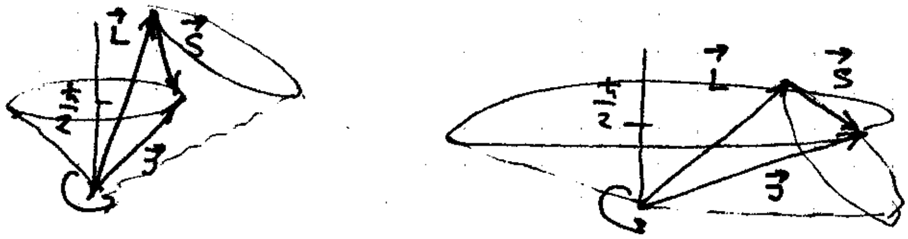


$m_l = 1,\ l = 1$

случајни ориентации

Факторот $\vec{S}\cdot\vec{L}$ ја менува сликата на понатаму следните позиции меѓу $\vec{S}$ и $\vec{L}$; спин-орбиталното заемодејство воведува зависност на енергијата од релативната ориентација меѓу $\vec{L}$ и $\vec{S}$. Велиме дека овие два вектори се спарени како резултат на оваа нова динамичка зависност на енергијата.

Состојбите со добро дефинирана енергија (што значи фиксиран агол меѓу $\vec{S}$ и $\vec{L}$) во општ случај: нормалните комбинации на $\vec{S}$ и $\vec{L}$ во кои на L_z и S_z повеќе не може да им се припишат дефинитивни вредности но затоа пак на J_z може.



! прецесија на $\vec{L}$ и $\vec{S}$ околу $\vec{J}$; J_z има дефинитивна вредност, L_z и S_z немаат $\Rightarrow$ j и m_j се добри квантни броеви

- $\vec{J}$ има произволна ориентација околу z-оската. Двете можни вредности на $j = l \pm 1/2$ соодветствуваат на два различни агли меѓу $\vec{L}$ и $\vec{J}$ односно на две различни енергии. Од тука произлегува дека дегенерираните состојби ψ_{nljm_j} се расцепуваат.

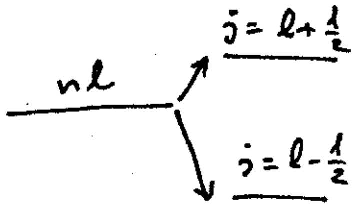
Ако спин-орбиталното спарување одново стане ~~мало~~ занемарливо (на пример ако атомот е во надворешно магнетно поле, многу посилно од внатрешното), L_z и S_z одново стануваат добро дефинирани броеви.

$$V_{SL} = Z\alpha \frac{\hbar}{2m_e^2 c} \frac{\vec{S}\cdot\vec{L}}{r^3} \quad \text{каде што} \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}$$ (константа на фината структура)

Може да се покаже дека расцепувањето δE_{SL} меѓу двете нивоа, $j = l \pm 1/2$ изнесува

$$\delta E_{SL} = \frac{Z^4 \alpha^2 E_0}{n^3 l(l+1)}$$

- Спарувањето меѓу $\vec{L}$ и $\vec{S}$ придонесува состојбата $(nL_{l+1/2})$ да лежи повисоко од состојбата $(nL_{l-1/2})$ што доведува до дублети за состојбите со исто n, l. За $l=0$ имаме само една состојба $j = \frac{1}{2}$.



(дублети кај едноелектронски атом)

пример:

За $2P$ состојбите на водородниот атом $(Z=1)$; $n=2$, $l=1$ имаме

$$\delta E_{SL} = \frac{\alpha^2 E_0}{16} = \frac{13,6\ eV}{16\,(137)^2} = 4,53\cdot 10^{-5}\ eV.$$

$\ldots \Rightarrow$ фина структура.