9. Matematička osnova kvante teorije

Kao što smo videli u prethodnoj glavi, klasična fizika nije u mogućnosti da ponudi zadovoljavajuće objašnjenje strukture čak ni najprostijeg atoma vodonika. Ovo je prvi put postignuto kvantnom teorijom. Zato ćemo ići dublje u tu teoriju nego što je bio slučaj u Glavi 7. Uglavnom ćemo se baviti vezanim stanjima (ali ne jedino) od kojih je najprostiji slučaj čestica u potencijalnoj jami (boxu).

9.1. Čestica u potencijalnoj jami

Da bi smo postali familijarni sa formalizmom kvantne teorije, koja će kasnije dovesti do kvantitativnih predvidjanja, prvo razmotrimo jedno dimenzionalno kretanje zatvorene čestice. "Zatvorena" znači da se može kretati jedino u pravougaonoj potencijalnoj jami širine a. Verovatnoća nalaženja ove čestice van ove jame je 0 (Sl 9.1). Sada ćemo pokušati da konstruišemo odgovarajuću talasne funkciju. Uslov je

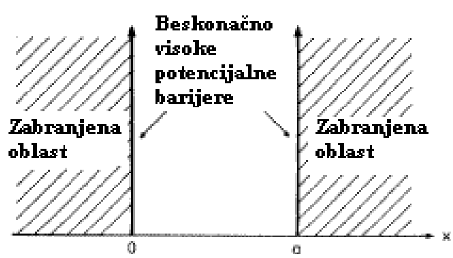
$\psi=0$ za $x<0$,
$\psi=0$ za $x>a$ (9.1)

jer čestica ne može biti izvan jame. Dalje postuliramo da je talasna funkcija $\psi(x)$ unutar jame neprekidna u odnosu na talasnu funkciju izvan kutije, tj

$$\psi(0)=0 \text{ i } \psi(a)=0 \quad (9.2)$$

Tražimo talasne funkcije koje opisuju česticu u ovoj jami i istovremeno garantuje da čestica uvek ima izvesnu definisanu energiju. Pozvaćemo se na de Broglieve talase

$$Ae^{i(kx-wt)} \quad (9.3)$$



Slika 9.1. Potencijalne barijere za česticu u potencijalnoj jami (kutiji)

Prema osnovnim zakonima kvantne teorije, talasni broj k i frekvencija ω su povezani sa energijom i impulsom čestice relacijama

$$E=\hbar\omega \quad (9.4)$$

i

$$p=\hbar k \quad (9.5)$$

Može se koristiti poznata relacija klasične fizike

$$E = \frac{p^2}{2m_0} \tag{9.6}$$

Izrazimo p preko k, i rešimo po k, dobijemo dve moguće vrednosti za k

$$k_{1,2} = \pm\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_0E} \tag{9.7}$$

za datu vrednost ukupne energije
Pored talasne funkcije (9.3) i talasna funkcija

$$Ae^{-ikx-wt} \tag{9.8}$$

daje istu vrednost energije. Ovo nas spasava odredjenih teškoća. Kao što se može videti zamenom x=0 i x=a u (9.3) talasna funkcija (9.3) ne zadovoljava granični uslov (9.2). Jedan način rešavanja tog problema je sledeći: pošto elektronski talasi prikazuju difrakciju i interferenciju, možemo da superponiramo talase u kvantnoj mehanici kao što smo radili kod talasnog paketa u sekciji 7.1. Zato kreiramo novu talasnu funkciju superponirajući (9.3) i (9.8)

$$\psi(x,t) = (C_1e^{ikx} + C_2e^{-ikx})e^{-i\omega t} \tag{9.9}$$

gde su konstante C_1 i C_2 nepoznate.
Da bi skratili pisanje (9.9) pišemo u formi

$$\psi(x,t) = \phi(x)e^{-iwt} \tag{9.9a}$$

gde je

$$\phi(x) = (C_1e^{ikx} + C_2e^{-ikx}) \tag{9.9b}$$

Da bi odredili konstante C_1 i C_2 zamenimo (9.9) u prvu od jednačina (9.2) i dobijamo

$\Phi(0)=0$; i $C_1+C_2=0$. (9.10)

Tako C_2 se može izraziti preko C_1. Sada je (9.9)

$$\phi(x) = C_1(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iC_1\sin kx \tag{9.11}$$

ovde je korišćena definicija sinusne funkcije. Da bi se zadovoljio i drugi uslov (9.2) zamenimo (9.11) u (9.2) i dobijamo:

Kako je $\Phi(a)=0$ mora biti *sinka*=0 (9.12)
Kako sinus može biti jednak nuli ako je argument celobrojni umnožak od π onda se uslov (9.12) može zadovoljiti izborom

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1,2,3,4... \tag{9.13}$$

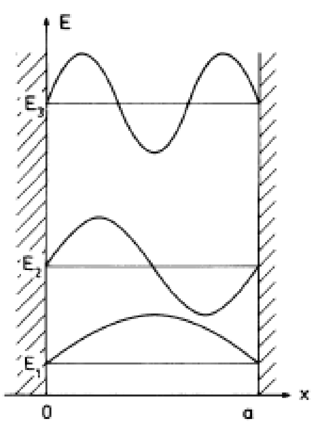
Ovaj rezultat znači da samo talasi koji zadovoljavaju ovaj uslov mogu da postoje u potenijalnoj jami. Ako zamenimo (9.13) u izraz za kinetičku energiju (9.6) dobijamo

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \tag{9.14}$$

za energiju čestice, uz uslov da $n \geq 1$ i da je celobrojno. Parametar n ne može biti jednak nuli, jer bi onda talasna funkcija bila jednaka nuli, a to znači da nema ni čestice.

Rezultat (9.14) je tipičan za kvantnu teoriju. Energije nisu više kontinualane kao u klasičnoj fizici, već su kvantovane. Da bi smo odredili C_1 u (9.11), što je još nerešeno, podsetimo se da talasna funkcija mora da bude normirana. Tako mora da bude ispunjen uslov $\int \psi\psi^* dx = 1$. Ako zamenimo (9.11) u ovaj uslov prvo se dobija

$$\int_0^a |\phi(x)|^2 dx = |C_1|^2 \int_0^a (2 - e^{i\frac{2\pi n}{a}x} - e^{-i\frac{2\pi n}{a}x})dx \tag{9.15}$$



Slika 9.2. Potencijalne barijere, energije i talasne funkcije čestice u jami. Dva različita parametra su predstavljena na istoj slici. 1) Energije E_1,E_2, E_3 prva tri stanja su nacrtane na E (=energetska) osi. (Postoji beskonačni niz viših energija iznad ovih). 2) x osa je nacrtana udesno od svake od E vrednosti, i pokazana je talasna funkcija koja odgovara tim vrednostima energije. Treba zapaziti da broj preseka talasne funkcije i x ose u jami raste za 1 za svako sledeće energetsko stanje.

Ovaj integral se može rešiti, što daje

$$\int_0^a |\phi(c)|^2 dx = |\phi(c)|^2 2a \quad (9.16)$$

Kako integral (9.15) treba da je jednak 1 da bi bio zadovoljen uslov normiranja, dobija se da je normalizaciona konstanta C_1 u obliku

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2a}} \quad (9.17)$$

Podsetimo se da C_1 može da bude odredjeno do tačnosti kontantnog faznog faktora $\exp(i\alpha)$. Kao što ćemo kasnije da vidimo, ovaj tip faznog faktora nema fizičkog značenja, jer nestaje za vreme računanja očekivanih vrednosti (vidi dalje). Naš konačan rezultat je u obliku

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2a}} e^{ixn\pi/a} - \frac{1}{\sqrt{2a}} e^{-ixn\pi/a} \quad (9.18)$$

ili u drugoj notaciji

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} i \sin(xn\pi / a) \quad (9.19)$$

Kao što ćemo da vidimo kasnije, talasna funkcija (9.18) je asocirana sa definisanom energijom. Da li to važi i za impuls. Ovo, jasno nije slučaj, jer ona opisuje i talas sa $k=n\pi/a$ i talas sa $k=-n\pi/a$. Ako bismo merili impuls, onda bi smo našli vrednosti $p = \hbar k$ i $p = -\hbar k$ sa istom učestanošću. U cilju izvodjenja verovatnoće pojavljivanja datog impulsa iz talasne funkcije prvo razmotrimo talasnu funkciju

$$\frac{1}{\sqrt{a}} \exp(ixn\pi / a) \quad (9.20)$$

koja je očigledno normalizovana u oblasti od 0 do a.

$$\int_0^a \left| \frac{1}{\sqrt{a}} \exp(in\pi x / a) \right|^2 dx = \frac{1}{a} \int_0^a dx = 1 \quad (9.21)$$

Kada merimo impuls, to znači da odredjujemo pojedinačnu konkretnu vrednost od k, tj., biramo jednu od komponenti (9.18). Ova komponenta je za faktor $1/\sqrt{2}$ manja od odgovarajuće komponente (9.20). Sa druge strane očekujemo iz razloga simetrije da se obe komponente pojavljuju sa istom verovatnoćom 1/2. Da bi smo od $1/\sqrt{2}$ došli do 1/2 potrebno je da kvadriramo $1/\sqrt{2}$. Ovo opažanje se može generalisati; verovatnoća merenja datog impulsa k se može dobiti kvadriranjem apsolutnih vrednosti koeficijenata ispred normalizovane talasne ravni.

Ostavljamo čitaocu da objasni vezu izmedju funkcije (9.18) i (9.5) koristeći Heisenbergovu relaciju neodredjenosti.

9.2. Schrodingerova jednačina

Kao što smo videli u prethodnom primeru, za dati problem čestice u potencijalnoj jami, postoji beskonačno mnogo rešenja, svako sa odgovarajućim energetskim nivoom (9.14). U ovom slučaju je relativno lako naći rešenje, što inače nije slučaj u ostalim kvantno mehaničkim problemima. U takvim slučajevima korisno je prvo videti jednačinu koja odredjuje ψ. U slučaju elektrona, koji nije pod dejstvom nikakve sile, nalazimo sledeće; pitamo se da li postoji jednačina za ψ takva da njena rešenja automatski zadovoljavaju jednačinu

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \qquad (9.22)$$

Pošto se parametri k i ω nalaze u de Broglieovom talasu *exp*(ikx-iωt), možemo formulisati pitanje na sledeći način: šta treba da se uradi da bi se dobilo $\hbar^2 k^2 / 2m_0$ iz exp(ikx) i šta učiniti da se dobije $\hbar\omega$ iz *exp*(-iωt) tako da jednačina

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \hbar\omega \qquad (9.23)$$

bude zadovoljena. Ako diferenciramo exp(ikx) dva puta po x i pomnožimo sa $-\hbar^2 / 2m_0$ dobićemo levu stranu (9.23) kao faktor. Na sličan način desna strana (9.23) se dobija ako se exp(-iωt) diferencira po vremenu i pomnoži sa $\hbar$. Na ovaj način dobija se osnovna Schrodingerova jednačina za slobodnu česticu

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dx^2}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (9.24)$$

Mora se reći, medjutim, da nije moguće izvesti osnovne jednačine fizike od još fundamentalnijih principa. Umesto toga treba shvatiti fizičku realnost i heruistički dospeti do jednačine i onda uporediti moguća rešenja sa eksperimentalno proverljivim činjenicama. Tako je nadjeno da je Schrodingerova jednačina validna u potpunosti u nerelativističkoj kvantnoj mehanici. Generališemo jednačinu (9.24) u tri dimenzije na sledeći način; prvo predstavimo kinetičku energiju kao

$$E = \frac{1}{2m_0}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2). \qquad (9.25)$$

Zatim se generališe talasna funkcija

$$e^{ik_x x + ik_y y + ik_z z} e^{-iwt} \quad . \qquad (9.26)$$

Umesto (9.23) imamo relaciju

$$\frac{1}{2m_0}\hbar^2(k_x^2+k_y^2+k_z^2)=\hbar\omega \tag{9.27}$$

Leva strana (9.27) je dobijena iz (9.26) uzimajući druge izvode (9.26) po koordinatama x,y i z sabirajući rezultate i množeći sa $-\frac{1}{2m_0}\hbar^2$. Desna strana (9.27) je dobijena diferenciranjem (9.26) po vremenu i množenjem sa $i\hbar$. Tako dobijamo jednačinu

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{9.28}$$

Leva strana se može skratiti uvodjenjem Laplace ovog operatora

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{9.29}$$

što daje uobičajenu formu Schrodingerove jednačine za slobodnu česticu u tri dimenzije

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{9.30}$$

Naravno da nismo zainteresovani samo za kretanje slobodne čestice, jer se one uvek kreću u polju neke sile. Medjutim (9.30) je vrlo značajna. Vidimo da je leva strana izvedena iz izraza $p^2/2m_0$ za kinetičku energiju, zamenjujući je pravilom diferenciranja $-(\hbar^2/2m_0)\nabla^2$. Ovo pravilo diferenciranje, koje deluje na ψ se naziva operator kinetičke energije. U prisustvu potencijalnih polja, ukupna energija prema klasičnoj mehanici jeste suma kinetičke i potencijalne energije:

$$\frac{1}{2m_0}p^2+V(r)=E \tag{9.31}$$

Možemo sada napisati operator ukupne energije prosto dodajući V na operator kinetičke energije. Tako dobijamo vremenski zavisnu Schrodingerovu jednačinu u prisustvu potencijalog polja

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2+V(r)\right)\psi(r,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) \tag{9.32}$$

Izraz

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(r) \qquad (9.33)$$

se naziva Hamiltonov operator ili Hamiltonijan.

Moguće je da neko nije naviknut da radi sa operatorima. Medjutim, moguće je brzo naviknuti se na njih, ako se shvati da su oni samo uobičajena skraćenica. Potrebno je još shvatiti da oni uvek deluju na neku funkciju.

Ako potencijal na levoj strani (9.32) ne zavisi od vremena, možemo nastaviti do vremenski nezavisne Schrodingerove jednačine. Da bi smo to uradili, kao i u (9.9a), separirajmo faktor exp(-iωt) od ψ(r,t). U Kvantnoj mehanici uobičajeno je da se piše $E/\hbar$ umesto ω, tako da pišemo:

$$\psi(r,t) = e^{-iEt/\hbar}\phi(r) \qquad (9.34)$$

Diferenciranje po vremenu se primenjuje samo na ψ na desnoj strani (9.32); ovde se diferencira samo eksponencijalna funkcija po vremenu, što daje faktor E. Ako sada obe strane jednačine podelimo sa odgovarajućim funkcijama dobijamo vremenski nezavisnu Schrodingerovu jednačinu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(r)\right)\phi(r) = E\phi(r) \qquad (9.35)$$

Kao što smo videli u prethodnoj sekciji, talasna funkcija mora da zadovoljava granične uslove (9.2). Ako oni nisu specificirani, primenjuje se takozvani prirodni granični uslov, koji zahteva da se ψ anulira u beskonačnosti, tako da se talasna funkcija normira tj.

$$\int |\psi|^2 dV = 1 \qquad (9.36)$$

Pre nego što krenemo u rešavanje Schrodingerove jednačine, obradićemo pitanje observabli, merenih vrednosti i operatora.

9.3. Konceptualna osnova kvantne teorije

9.3.1. Observable, vrednosti merenja i operatori

Odredjivanje verovatnoće položaja

U prethodnim sekcijama, videli smo da objašnjenje procesa u mikrosvetu zahteva nove načine razmišljanja, koji su fundamentalno različiti od ideja klasične fizike. U klasičnoj mehanici, kretanje tela, kao na primer padanje kamena ili let rakete, se može precizno odrediti zakonima kretanja. Prema ovim zakonima, položaj i impuls tela se mogu odrediti sa velikom željenom preciznošću.

Talasna funkcija je nov koncept i on je centralni u kvantnoj fizici. Kao rešenje vremenski zavisne Schrodingerove jednačine, ona opisuje vremensku evoluciju fizičkih procesa u mikrosvetu. U ovom poglavlju iskoristićemo fizičke implikacije talasne funkcije, ili drugim rečima, koje eksperimentalne rezultate može da predvidi teorijska fizika. Konceptualno najjednostavniji eksperiment bi bio odredjivanje položaja čestice. Kao što već znamo, talasna funkcija ψ može da da' samo verovatnoćno predvidjanje. Izraz

$$\left|\psi(x,y,z)\right|^2 dxdydz \tag{9.37}$$

daje verovatnoću da se čestica nadje u elementu zapremine $dx\cdot dy\cdot dz$ oko tačke x,y,z. Sada se postavlja pitanje da li talasna funkcija može takodje da predvidi rezultat opažanja impulsa.

9.3.2. Merenje impulsa i verovatnoća impulsa

Razmotrimo prvo kao primer talasnu funkciju čestice u kutiji (poglavlje 9.1)

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{a}}\exp(ikx)}_{u_1(x)} - \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{a}}\exp(-ikx)}_{u_2(x)} \tag{9.38}$$

Dve podvučene funkcije (obe) zadovoljavaju uslov normiranja (9.36). Prema osnovnim pravilima kvantne mehanike, impuls pridružen talasnoj funkciji $u_1(x)$ je dat sa $\hbar k$, dok je impuls druge talasne funkcije u_2 dat sa $-\hbar k$.

Oba ova impulsa su tako predstavljena talasnom funkcijom (9.38). Ako odredimo impuls čestice u jami koja je opisana talasnom funkcijom (9.38) očekujemo da opazimo bilo $\hbar k$ bilo $-\hbar k$. Medjutim, ne možemo da predvidimo koji će se od ova dva impulsa pojaviti. Ako zamislimo da čestica leti nazad napred u jami, onda je intuiciono jasno da ćemo svaki od impulsa $\hbar k$ i $-\hbar k$ da opazimo sa verovatnoćama od 1/2. Kao što smo videli u poglavlju 9.1, kvadrati apsolutnih vrednosti koeficijenata C_1 i C_2 daju verovatnoće nalaženja odgovarajućih impulsa. Ovo generališemo u svetlu odredjivanja raspodele verovatnoće impulsa u generalisanom talasnom paketu. Ovde, čestica više nije zatvorena u jami. Ovaj tip talasnog paketa ima opštu formu

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a_k e^{ikx} dk \tag{9.39}$$

Da bi smo povezali koeficijente a_k sa verovatnoćnom interpretacijom, moramo biti sigurni da je talasna funkcija exp(ikx) normalizovana u beskonačnom prostoru. Ovo je nešto teže, i to nećemo da demonstriramo ovde (vidi Apendix A). Ovde ćemo samo da navedemo rezultat. Ako uvedemo promenljivu impuls umesto integracione varijable k, i u isto vreme korektno normalizujemo talasnu funkciju u jednoj dimenziji dobijamo:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p)\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}}\, dp \tag{9.40}$$

Podvučena funkcija je normalizovana. Kao generalizacija naših razmatranja gore, vidimo da je $|c(p)|^2dp$ verovatnoća opažanja impulsa p u intervalu p, p+dp. Ovaj rezultat se može neposredno proširiti u tri dimenzije; ako se talasna funkcija $\psi(x,y,z)$ predstavi kao superpozicija normalizovanih ravanskih talasa,

$$\psi(x,y,z) = \iint\int_{-\infty}^{\infty} c(p_x, p_y, p_z)(2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\,\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar)d^3p \qquad (9.41)$$

sa

$\vec{p}\cdot\vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$. Onda je

$|c(p_x,p_y,p_z)|^2 dp_x dp_y dp_z$

verovatnoća da komponente opaženog impulsa čestice p, budu u intervalu p_x, p_x+dp_x; p_y, p_y+dp_y i p_z, p_z+dp_z.

9.3.3. Srednje vrednosti i očekivane vrednosti

Da bi smo objasnili ove koncepte, podsetimo se kocke. Pojedinačne moguće vrednosti "opažene vrednosti" su brojevi 1, 2, 3, 4, 5 i 6. Iz jednog bacanja ne može se predvideti koji će se od ovih brojeva dobiti. Predvidjanje možemo da obavimo samo ako kocku bacimo mnogo puta i čuvamo informaciju o frekvenciji Fn sa kojom se dobijaju pojedini brojevi n.

Srednji broj n_{sr} je onda dat sa

$$n_{sr} = \frac{\sum_{n=1}^{6} nFn}{\sum_{n=1}^{6} Fn} \qquad (9.42)$$

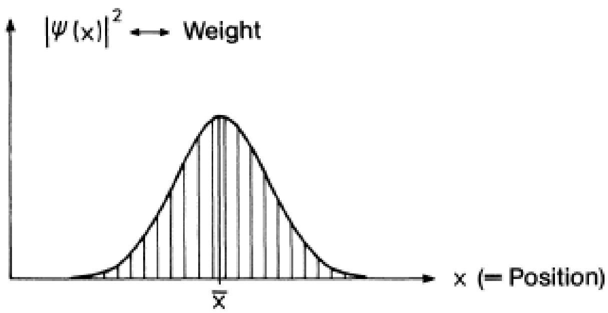
Ova srednja vrednost se može predvideti statistički (u graničnom slučaju beskonačnog broja bacanja) preko korišćenja koncepta verovatnoće. To je količnik broja pojavljivanja željenog rezultata podeljen sa ukupnim brojem pokušaja. Verovatnoća dobijanja broja n (broj n je željeni rezultat) se označava sa P_n. Pošto pojava raznih brojeva ima jednaku verovatnoću $P_1=P_2\ldots=P_6$, i pošto je $\sum_{n=1}^{6} P_n = 1$ dobija se neposredno

$P_n=1/6$, n=1,..,6 (9.43)

(naravno iz razmatranja isključujemo nehomogene kocke). Prema teoriji verovatnoće, n_{sr} se može izraziti preko P_n na sledeći način

$$n_{sr} = \sum_{n=1}^{6} n\cdot P_n = 1\cdot\frac{1}{6} + 2\cdot\frac{1}{6} + . + . + 6\cdot\frac{1}{6} \qquad (9.44)$$

Ovi relativno prosti koncepti se mogu primeniti direktno na definiciju srednje vrednosti položaja i impulsa u kvantnoj mehanici. U opšte ne možemo da damo definitivnu prognozu koji će se impuls ili položaj izmeriti; možemo da damo samo verovatnoće. Ako ponovimo merenja položaja ili impulsa mnogo puta i izračunamo srednju vrednost ona može biti definisana egzaktno kao i kod kocke. Teoretičari mogu, kao i u igri bacanja kocke, da predvide srednju vrednost za eksperimentalce. Ova srednja vrednost se zato zove *očekivana vrednost* i definiše se kao; *očekivana vrednost = suma svih proizvoda pojedinačno izmerenih vrednosti i verovatnoća da se ta vrednost pojavi.*
Primenimo sada ovu definiciju na neke primere.



Slika 9.3. Objašnjenje srednje vrednosti položaja. Lokacija vertikalne linije indicira vrednost merenja položaja koordinate x i dužina linije je proporcionalna frekvenciji sa kojom se ta vrednos nalazi (gustina verovatnoće). Ako ovo zadnje interpretiramo kao "težinu" onda računanje $\overline{x}$ odgovara računanju centra gravitacije objekta (centra masa).

a) Srednja vrednost položaja (jedno dimenzionalni primer) Slika 9.3.

Jedno merenje daje jedan rezultat da se čestica nadje u intervalu x,x+dx. Odgovarajuća verovatnoća je $|\psi(x)|^2 dx$. Pošto je položaj x neprekidna promenljiva, a broj koji se pojavljuje na kocki diskretna, koristimo integral umesto sume (9.44). Srednja vrednost položaja je tako definisana kao

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi(x)|^2 dx \tag{9.45}$$

U računanju (9.45) i na dalje, pretpostavlja se normalizovanost talasnih funkcija, tj.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \tag{9.46}$$

Možemo da uzmemo n ti stepen od x, x^n i tako generalizujemo (9.45) da bi se dobila srednja vrednost n tog stepena

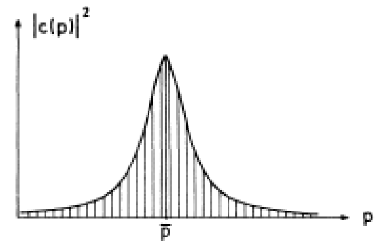
$$\bar{x^n} = \int_{-\infty}^{\infty} x^n |\psi(x)|^2 dx \tag{9.47}$$

Ako zamenimo funkciju x^n nekom opštom funkcijom potencijala V(x) dobija se definicija srednje vrednosti potencijalne energije

$$\overline{V} = \int_{-\infty}^{\infty} V(x) |\psi(x)|^2 dx \tag{9.48}$$

a) Srednja vrednost impulsa (jedno dimenzionalni primer), Slika 9.4

U ovom slučaju uzećemo da je talasna funkcija superpozicija ravnih talasa



Slika 9.4. Objašnjenje srednje vrednosti impulsa. Vidi zaglavlje slike 9.3.

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \frac{1}{\sqrt{h}} e^{ipx/\hbar} dp \tag{9.49}$$

Ako sada merimo impuls, verovatnoća nalaženja njegove vrednosti u intervalu p, p+dp je data sa $|c(p)|^2 dp$. U potpunoj analogiji sa srednjom vrednošću položaja nalazimo srednju vrednost impulsa kao

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} p |c(p)|^2 dp \tag{9.50}$$

ili n ti stepen

$$\overline{p}^n = \int_{-\infty}^{\infty} p^n |c(p)|^2 dp \tag{9.51}$$

Kao što ćemo da vidimo kasnije, talasne funkcije se normalno izražavaju kao funkcije položaja u obliku $\psi(x)$. Zato je teško da se izračuna razvoj (9.49) u cilju odredjivanja srednjeg impulsa jer je prvo potrebno izračunati koeficijente c(p). Sada ćemo videti da postoji veoma prosto pravilo koje dozvoljava da se izračuna srednja vrednost impulsa bez (9.49).

Srednja vrednost impulsa je data formulom

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx \qquad (9.52)$$

Notacija $(\hbar / i)(d / dx)\psi$ se možda čini čitaocu čudnom; ovo je česta forma zapisa u kvantnoj mehanici. Ovo znači da diferenciramo $\psi(x)$ po x, tj. računamo

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} \qquad (9.53)$$

Ova notacija se takodje naziva i primena "operatora impulsa" $(\hbar / i)(d / dx)$ na talasnu funkciju $\psi(x)$. Dokaz da (9.52) je isto kao i (9.50) je relativno prost, ali zahteva izvesno dodatno matematičko predznanje. Počećemo sa zamenom (9.49) u (9.52). Posle diferenciranja po x i zamene reda integracije po x i po p dobija se

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp'\, p' c^*(p) c(p') \underbrace{\frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ipx/\hbar)\exp(ip'x/\hbar) dx} \qquad (9.54)$$

Podvučeni deo je Diracova δ funkcija, $\delta(p-p')$ (Apendix A). Definicija δ funkcije eliminiše integraciju po p' i dovodi do p'=p, tako da je p' zamenjeno sa p. Onda direktno dobijamo

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dp\ p|c(p)|^2 \qquad (9.55)$$

Ako ponovo idemo detaljno kroz račun, videćemo da smo faktor p u (9.50) zamenili sa operatorom diferenciranja $(\hbar / i)(d / dx)$ Da bi smo dospeli do (9.51) treba da primenimo ovaj operator n puta na talasnu funkciju $\psi(x)$.

c) Srednja vrednost energije

Dosadašnji rezultati nam omogućuju izračunavanje srednje vrednosti energije. Kinetička energija čestice je $p^2/2m_0$. Verovatnoća opažanja impulsa p u intervalu p, p+dp je data sa $|c(p)|^2dp$.

Tako, srednja kinetička energija je data sa

$$\overline{E}_{kin} = \int_{-\infty}^{\infty} |c(p)|^2 \frac{p^2}{2m_0} dp \qquad (9.56)$$

Ako sada koristimo pravilo računanja dato gore, neposredno se dobija

$$\overline{E}_{kin} = \iint\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi \right) dxdydz \tag{9.57}$$

gde je korišćena skraćenica

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{9.58}$$

i generalizacija u tri dimenzije. Jednačina (9.48) se može generalisati na isti način, što daje očekivane vrednosti potencijalne energije:

$$\overline{E}_{pot} = \iint\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* V(r) \psi dxdydz \tag{9.59}$$

Kako je ukupna energija jednaka zbiru kinetičke i potencijalne, očekivana vrednost ukupne energije je konačno

$$\bar{E}_{tot} = \iint\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(r) \right) \psi dxdydz \tag{9.60}$$

9.3.4. Operatori i očekivane vrednosti

Pomoću prethodnih rezultata možemo sada da diskutujemo konceptualni okvir i računska pravila kvantne teorije. U klasičnoj fizici, imamo izvesne mehanističke parametre, kao što su položaj x(t), impuls p(t), energija i dr. U kvantnoj teoriji, ovim klasičnim parametrima su pridružene izvesne očekivane vrednosti (uporedi 9.45, 52 i 60). Ove kvantno mehaničke očekivane vrednosti se mogu dobiti preko klasične fizike vrlo prostim receptom: klasičnim parametrima se pridružuju operatori, koji nisu ništa drugo do množenje ili diferenciranje, koja deluju na talasnu funkciju iza njih. Operator položaja x (koordinate) je x(t) i predstavlja jednostavno množenje talasne funkcije ψ(x) sa x. Može se na prvi pogled učiniti čudnim da se vremenski nezavisan operator pridružuje vremenski zavisnom parametru x(t). Kao što ćemo da vidimo kasnije, vremenska zavisnost je re-introduced (nanovo uvedena) u procesu nalaženja srednje vrednosti jer talasna funkcija sama može biti vremenski zavisna. Impulsu je pridružen operator $(\hbar / i)(d / dx)$ koji diferencira talasnu funkciju. Nakon obavljanja odgovarajuće operacije množenja ili diferenciranja, rezultat se množi sa ψ* i integrali preko celog prostora da bi se dobila očekivana kvantno mehanička vrednost.

Korišćenjem ovih pravila možemo definisati i druge operatore koji nisu razmatrani do sada. Jedan važan parametar je momenat impulsa $\vec{l}$ koji ima komponente l_x, l_y, l_z . U klasičnoj fizici komponenta l_z je definisana kao $xp_y - yp_x$. U kvantnoj teoriji dobijamo odgovarajući operator zamenom p_x i p_y sa odgovarajućim operatorima $(\hbar / i)(d / dx)$ i $(\hbar / i)(d / dy)$ respektivno. z komponenta momenta impulsa ima operator

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \qquad (9.61)$$

U cilju izbegavanje konfuzije izmedju klasičnog momenta impulsa i operatora momenta impulsa, koristi se i ovde a i na dalje u tekstu simbol kapica iznad operatora.

Klasična promenljiva	Operator	Kvantno mehanička očekivana vrednost
Položaj x(t)	x	$\overline{x} = \int \psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx$
Impuls p(t)	$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ (Jordanovo pravilo)	$\overline{p} = \int \psi^*(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)dx$
Energija $\aleph(x(t), p(t))$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$	$\overline{E} = \int \psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t)dx$
Momenat impulsa $l = [rxp]$	$\left[r\,x\frac{\hbar}{i}\nabla\right]$	$\bar{l} = \int \psi\left[r\,x\frac{\hbar}{i}\nabla\right]\psi dxdydz$

U prethodnim diskusijama, nije poklonjena značajna pažnja talasnoj funkciji ψ. Moramo da razmotrimio principe koji nam omogućuju odredjivanje talasne funkcije u slučaju da nije odredjena Schredingerovom jednačinom.

9.3.5. Jednačine za odredjivanje talasne funkcije. Svojstveni problem

Mi smo već predstavili jednačine koje su eksplicitno ili implicitno primenljive za nalaženje ψ . Kao najprostiji slučaj, uzmimo ravni talas ψ∞exp(ikx). Kao što već znamo, ovaj talas odredjuje kretanje čestice sa impulsom $\hbar k$. Da li možemo da ovaj ravanski talas smatramo rešenjem jednačine koja je direktno vezana za impuls. Ovo i jeste slučaj u suštini, jer, ako diferenciramo ravanski talas po x i pomnožimo sa $\hbar / i$ dobićemo relaciju

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}e^{ikx} = \hbar k e^{ikx} = pe^{ikx} \qquad (9.62)$$

Ravanski talas tako zadovoljava jednačinu sledećeg oblika; operator impulsa $(\hbar / i)(d / dx)$ primenjen na ravanski talas daje impuls p≡$\hbar k$ *puta* ravanski talas.

Kao drugi primer razmotrimo vremenski nezavisnu Schrodingerovu jednačinu. Primena Hamiltonovog operatora na talasnu funkciju daje energiju $\overline{E}$ puta talasna funkcija. Pogled na prethodnu tabelu pokazuje da je Hamiltonijan kvantno mehanički operator pridružen klasičnom izrazu za energiju E_{kin}+E_{pot}.
Kada ekstrahujemo ono što je zajedničko za ove primere, vidimo da su ove funkcije takozvane svojstvene funkcije koje zadovoljavaju jednačinu

Operator · Svojstvena funkcija= Svojstvena vrednost · Svojstvena funkcija

Ako operator označimo sa Ω , a svojstvenu funkciju sa Φ i svojstvenu vrednost sa ω onda je generalizacija ove relacije

$$\Omega\phi = \omega\phi \tag{9.63}$$

Svojstvene vrednosti ovde i u sekciji (9.3.6) ne treba mešati sa frekvencijom. One mogu imati sasvim različito fizičko značenje, na primer impuls. U primeru (9.62) imamo

$$\Omega = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}, \quad \phi = e^{ikx}, \quad \omega = \hbar k$$

Sada je potrebno da vidimo neke osnovne operacije i matematički tretman svojstvenih jednačina bez posebnih izvodjenja. Kao što je pokazano, svojstvene funkcije i svojstvene vrednosti su odredjene jednačinom (9.63). Jedan poseban primer je skup graničnih uslova za česticu u kutiji. Ako nisu posebno dati granični uslovi, mora se zahtevati da je talasna funkcija normalizovana, što implicira da talasna funkcija mora dovoljno brzo da opada kako se odlazi u beskonačnosti.

Kada su dati operator Ω u (9.63) i granični uslovi, postoji poseban niz svojstvenih vrednosti, tj. diskretan niz vrednosti energija, kao što je to bio slučaj za česticu u potencijalnoj jami i dr. Računanje ovih svojstvenih funkcija i svojstvenih vrednosti je zadatak matematičara ili teorijskih fizičara. Da bi se uspostavila saglasnost sa eksperimentalnim opažanjima, treba koristiti postulate kvantne teorije: *svojstvene vrednosti su identične sa opaženim vrednostima*. Ovaj osnovni postulat ima izvanredno značenje i možemo ga prihvatiti jer je mnogo puta potvrdjen u brojnim eksperimentima. Ako merimo energiju elektrona u vodonikovom atomu, na primer, ona se mora složiti sa kvantno mehanički izračunatom svojstvenom vrednošću E_n. Ako postoji neslaganje, to ne treba smatrati nedostatkom kvantne teorije, već treba tražiti interakcije, koje možda nisu uzete u obzir. Na ovaj način, do sada su postignuta odlična slaganja.

Kao što se može videti iz našeg primera (9.62) Schrodingerova jednačina je samo jedan od mnogo mogućih načina za odredjivanje talasne funkcije. Ovde, uvek pre svega razmišljamo o fizičkom problemu. Tako, kad god koristimo Schrodingerovu jednačinu uvek ćemo pretpostavljati da možemo tačno da merimo energiju. Kada izmerimo energiju, potrebno je identifikovati svojstvene funkcije koja su rešenja Schrodingerove jednačine. Šta ako želimo da odredjujemo, tj. merimo impuls. Kako je talasna funkcija poznata, lako se može demonstrirati Furijeovom analizom, da ova funkcija sadrži nekoliko svojstvenih funkcija impulsa, te tako više nismo u mogućnosti da tačno predvidimo impuls čestice, već se može samo odrediti očekivana vrednost. Najprostiji primer za ovo je opet ponovo čestica u potencijalnoj jami.

9.3.6. Istovremene observable i relacije komutacije

Kao što smo videli gore, postoji vrlo bliska veza izmedju talasnih funkcija svojstvenih vrednosti na jednoj strani i pojedinačnih observabli na drugoj. Ako je talasna funkcija svojstvena funkcija nekog operatora - tj. zadovoljena je jednačina (9.63) – onda

znamo da će neka svojstvena vrednost moći biti izmerena. Ako ponovimo ovo merenje, naćićemo tačno istu svojstvenu vrednost. Iz ovoga sledi da:
Ako je ψ_λ svojstvena funkcija specifičnog operatora Ω, svojstvena vrednost ω se slaže sa očekivanom vrednošću $\overline{\Omega}$. U suštini, ako znamo operator Ω i pridružene svojstvene vrednosti ω_λ onda je

$$\Omega\psi_\lambda = \omega_\lambda\psi_\lambda \div \bar{\Omega} = \int \psi_\lambda^* \Omega \psi_\lambda dx = \int \psi_\lambda^* \omega_\lambda \psi_\lambda dx = \omega_\lambda \int \psi_\lambda^* \psi_\lambda dx = \omega_\lambda$$

Šta se dešava kada želimo da odredimo drugi parametar u drugom merenju. Jedan primer je detaljnije obradjen u poglavlju 7.3. gde smo želeli da merimo prvo impuls, a onda i položaj čestice. U ovom slučaju, merenje položaja uništava rezultat prethodnog merenja impulsa. Na drugoj strani, možemo da merimo impuls, a potom i kinetičku energiju čestice. U prvom merenju dobijamo vrednost impulsa p. Sada pripremimo česticu u posebnom stanju sa svojstvenom funkcijom operatora impulsa; talasna funkcija posle merenja je tako (ne uzimajući u obzir faktor normalizacije) data sa $\exp(ipx/\hbar)$. Ako sada merimo kinetičku energiju, ovom merenju odgovara primena matematičkog operatora kinetičke energije $-(\hbar^2/2m_0)d^2/dx^2$. U procesu "pripreme" ravanski talas daje svojstvenu vrednost $E=p^2/2m_0$, i ravanski talas ostaje svojstvena funkcija. U ovom slučaju, drugo merenje ne uništava rezultat prvog merenja. Jasno, postoje merenja koja ne remete jedna druge, ili drugim rečima, koja se mogu obaviti istrovremeno sa proizvoljnom tačnošću.

Sada ćemo izvesti nužan kriterijum za istovremenu merljivost. Za ovu svrhu, razmotrimo operatore $\Omega^{(1)}$ i $\Omega^{(2)}$ koji mogu biti, na primer operatori impulsa i kinetičke energije. Sada zahtevamo da talasna funkcija ψ bude istovremeno svojstvena funkcija obe karakteristične jednačine:

$$\Omega^{(1)}\psi = \omega^{(1)}\psi \tag{9.64}$$

i

$$\Omega^{(2)}\psi = \omega^{(2)}\psi \tag{9.65}$$

Ako sada primenimo operator $\Omega^{(2)}$ na levu stranu prve jednačine, i operator $\Omega^{(1)}$ na desnu stranu druge, ona oduzmemo jednu jednačinu od druge, preuredimo i primenimo (9.64) i (9.65) dobiće se

$$(\Omega^{(1)}\Omega^{(2)} - \Omega^{(2)}\Omega^{(1)})\psi = (\omega^{(1)}\omega^{(2)} - \omega^{(2)}\omega^{(1)})\psi = 0 \tag{9.66}$$

U jednačini (9.66) talasna funkcija ψ može izostaviti i piše se samo

$$(\Omega^{(1)}\Omega^{(2)} - \Omega^{(2)}\Omega^{(1)}) = 0 \tag{9.67}$$

Ovo je potrebno shvatiti kao skraćenicu u zapisu. Kada se vidi ovakva jednačina treba se podsetiti da operatori napisani u (9.67) deluju na talasnu funkciju ψ, koja treba da je napisana sa desne strane kao što je u (9.66). Može se matematički pokazati sledeće: ako dva operatora $\Omega^{(1)}$ i $\Omega^{(2)}$ zadovoljavaju relaciju komutacije (9.67) onda se svojstvena talasna funkcija operatora $\Omega^{(1)}$ može odrediti kao svojstvena talasna funkcija operatora $\Omega^{(2)}$; ona takodje zadovoljava (9.64) i (9.65). Ako postoji samo jedna svojstvena funkcija sa pripadajućom svojstvenom vrednošću $\omega^{(1)}$, onda je to i svojstvena funkcija operatora $\Omega^{(2)}$. Medjutim, ako postoji nekoliko svojstvenih funkcija operatora $\Omega^{(1)}$ pridruženih svojstvenoj vrednosti $\omega^{(1)}$ onda je uvek moguće naći linearnu kombinaciju ovih funkcija, koja jeste svojstvena funkcija $\Omega^{(2)}$.

Razmotrimo sada nekoliko primera. Izaberimo da je $\Omega^{(1)}$ operator impulsa $(\hbar / i)(d / dx)$ i $\Omega^{(2)}$ je operator kinetičke energije $(-\hbar^2 / 2m_0)d^2 / dx^2$, ovi operatori komutiraju. Razlog je što se u jednom slučaju talasna funkcija diferencira dvaput pa onda još jedanput, a u drugom se diferencira jednom pa posle dva puta, oba puta samo po koordinati x, što prirodno daje isti rezultat, tj.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}\cdot\frac{d^2}{dx^2}-\frac{d^2}{dx^2}\cdot\frac{d}{dx}\right)=0 \qquad (9.68)$$

Takodje se može pokazati da x komponenta impulsa komutira sa njegovom y komponentom.

Pogledajmo sada drugi primer, x komponente impulsa i x koordinate. Tako je sada $\Omega^{(1)} = (\hbar / i)(d / dx)$ i $\Omega^{(2)}$ =x

$$(\Omega^{(1)}\Omega^{(2)} - \Omega^{(2)}\Omega^{(1)})\psi = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x - x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi \qquad (9.69)$$

Izračunajmo ovaj izraz. Posmatrajmo prvo desnu stranu bez korišćenja zagrada

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x\psi - x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi \qquad (9.70)$$

$$\frac{d}{dx}(x\psi) = \frac{dx}{dx}\psi + x\frac{d\psi}{dx} \qquad (9.71)$$

Zamenimo ovo u (9.70) i dobijemo

$$\frac{\hbar}{i}\psi \qquad (9.72)$$

Ako sada napišemo desnu stranu jednačine (9.69) dobija se relacija

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x - x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi = \frac{\hbar}{i}\psi \qquad (9.73)$$

Kako je relacija važeća za bilo koju talasnu funkciju ψ može se pisati u skraćenoj formi

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x - x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} = \frac{\hbar}{i} \qquad (9.74)$$

Ovo je čuvena Heisenberg-ova relacija komutacije izmedju operatora impulsa i koordinate. Kaže, da operatori impulsa i koordinate ne komutiraju, što znači da se položaj i impuls ne mogu odrediti do bilo koje željene preciznosti (vidi sekciju (7.3).

Sledeća formulacija se često koristi da se izrazi relacija komutacije izmedju dva operatora $\Omega^{(1)}$ i $\Omega^{(2)}$.

$$\left[\Omega^{(1)},\Omega^{(2)}\right]=\Omega^{(1)}\Omega^{(2)}-\Omega^{(2)}\Omega^{(1)} \tag{9.75}$$

U ovoj formi, Heisenbergova relacija komutacije je

$$\left[\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx},x\right]=\frac{\hbar}{i} \tag{9.76}$$

Ostavljamo čitaocu da izvede sledeće relacije:

$$\left[\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx},V\right]=\frac{\hbar}{i}\frac{dV}{dx}$$

Za komponente momenta impulsa (uporedi definicije u (9.61))

$$\left[\hat{l}_x,\hat{l}_y\right]=i\hbar\hat{l}_z \tag{9.77}$$

$$\left[\hat{l}_y,\hat{l}_z\right]=i\hbar\hat{l}_x \tag{9.78}$$

$$\left[\hat{l}_z,\hat{l}_x\right]=i\hbar\hat{l}_y \tag{9.79}$$

$$\left[\hat{l}^2,\hat{l}_j\right]=0, \quad j=x,y,z \tag{9.80}$$

Ove jednačine tvrde da komponente momenta impulsa nisu istovremeno merljive, iako jedna komponenta i kvadrat momenta impulsa mogu da budu istovremeno izmerene.

9.4. Kvantno mehanički oscilator

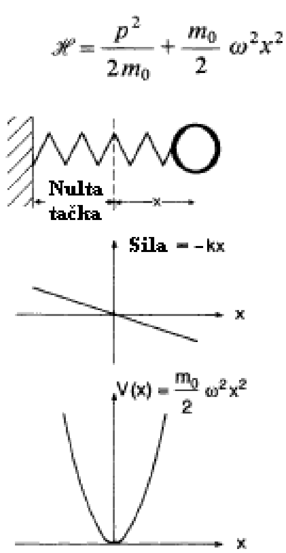
Pored čestice u potencijalnoj jami, harmonijski oscilator je jedan od najprostijih primera u kvantnoj teoriji. Iako se ovaj primer ne primenjuje na kretanje elektrona u atomu, jer su drugačije sile koje deluju, harmonijski oscilator ima bezbroj primera u svim oblastima kvantne fizike. Mi ćemo se često vraćati na njega. U klasičnoj fizici, jednačina kretanja harmonijskog oscilatora je data sa $m_0\ddot{x}=-kx$ (slika (9.5)). Kinetička energija je $m_0\dot{x}^2/2$, a potencijana energije ja (k/2)x^2. Da bi smo konvertovali ove veličine u kvantnu mehaniku, izrazimo brzinu $\dot{x}$ preko impulsa $m_0\dot{x} = p$. Takodje, koristimo klasičnu vezu izmedju frekvencije oscilovanja ω, mase i konstante sile $\omega^2 = k/m_0$. Na ovaj način dobija se sledeći izraz za Hamiltonovu funkciju

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0}{2}\omega^2 x^2 \tag{9.81}$$

Odgovarajuća Schrodingerova jednačina je

$$(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0}{2}\omega^2 x^2)\psi(x) = E\psi(x) \tag{9.82}$$

Lako je ubediti se da energija E ima samo pozitivne vrednosti. Ovo osiguravamo time što obe strane (9.82) množimo sa $\psi^*(x)$ i integralimo od $x=-\infty$ do $x=+\infty$. Integral na desnoj strani (9.82) $\int_{-\infty}^{\infty} \psi\psi^* dx$ je pozitivan jer je $\psi\psi^* = |\psi|^2 \geq 0$. Isto se primenjuje i na član koji sadrži x^2, $\int_{-\infty}^{\infty} (m_0/2)\omega^2 x^2 \psi\psi^* dx$ na levoj strani jednačine (9.82). Preostali izraz $\int_{-\infty}^{\infty} \left[-(\hbar^2/2m_0)\psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} \right] dx$ se preuredjuje parcijalnom integracijom i daje



Slika 9.5. Harmonijski oscilator. Gore, objašnjenje tačkaste mase na opruzi. Sredina, sila kao funkcija pomeraja x. Dole, potencijalna energija kao funkcija pomeraja x.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\psi^*\frac{d\psi}{dx}\bigg|_{x=-\infty}^{x=\infty}+\frac{\hbar^2}{2m_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\psi}{dx}\frac{d\psi^*}{dx}dx \tag{9.82a}$$

Ako se zamene granice integracije u prvom izrazu, on se anulira, jer se zahteva $\psi\rightarrow 0$, kada $x\rightarrow\propto$. U suprotnom integral normalizacije $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx=1$ ne bi postojao. Integral (9.82a) je pozitivan i tako je celokupni izraz koji odgovara levoj strani jednačine (9.82) pozitivan. Sada neposredno sledi da je $E\geq 0$.

Kako Schrodingerova jednačina sadrži nekoliko konstanti, izvršimo prelaz na nove bezdimenzione koordinate ζ i novu energiju uzimajući da je

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega}}\zeta\,;\ \text{i}\ \varepsilon=\frac{E}{\hbar\omega} \tag{9.83}$$

$$\psi(x)=\Phi(\zeta) \tag{9.84}$$

Sada (9.82) postaje

$$\tilde{H}\Phi\equiv\frac{1}{2}(-\frac{d^2}{d\zeta^2}+\zeta^2)\phi(\zeta)=\varepsilon\phi(\zeta) \tag{9.85}$$

Kad bi diferencijalni operator $d/d\zeta$ bio običan broj onda bi smo mogli da iskoristimo pravilo $(-a^2+b^2)=(-a+b)(a+b)$. Iako ovo, normalno, nije moguće sa operatorima, ovo ćemo da koristimo kao heurističku pomoć i pisaćemo, recimo, probe radi:

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(-\frac{d}{d\zeta}+\zeta)}_{b^+}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{d}{d\zeta}+\zeta)}_{b}\phi(\zeta) \tag{9.86}$$

Red diferenciranja mora da se striktno poštuje, tj. operator koji je desno se primenjuje pre operatora levo. Izmnožimo sada zagrade vodeći računa o redu operatora

$$\frac{1}{2}(-\frac{d^2}{d\zeta^2}+\zeta^2)\phi(\zeta)+\frac{1}{2}(-\frac{d}{d\zeta}\zeta+\zeta\frac{d}{d\zeta})\phi(\zeta) \tag{9.87}$$

Ovo je leva strana jednačine (9.85) sa još jednim dodatnim članom. Isto kao što smo radili sa Heisenbergovom relacijom komutacije (9.69) možemo primeniti diferenciranje extra člana i dobiti $-\Phi(\zeta)/2$ za drugi izraz u (9.87). Jednačina (9.86) se razlikuje od sredine izraza (9.85) samo za član $\Phi/2$. Ako sada uvedemo, kao što je pokazano u (9.86) skraćanice b i b^+ onda će originalna Schrodingerova jednačina dobiti oblik

$$b^+ b\phi \equiv (\hat{H} - \frac{1}{2})\phi = (\varepsilon - \frac{1}{2})\phi \qquad (9.88)$$

Na dalje je važno upamtiti da su b i b^+ samo skraćenice za operatore, koji su definisani u (9.86). Takodje zamenimo ε-1/2 =n i još dodajmo talasnoj funkciji Φ i ovom n, indeks λ, za šta će se opravdanje dati kasnije, i konačno dobijemo Schredingerovu jednačinu u obliku

$$b^+ b\phi_\lambda = n_\lambda \phi_\lambda \qquad (9.89)$$

Operatori b i b^+ zadovoljavaju operaciju komutacije

$$bb^+ - b^+ b = 1 \qquad (9.90)$$

Ostavljamo dokaz (9.90) čitaocu kao vežbu. Potrebno je samo zameniti definicije b i b^+ i nastaviti kao što je uradjeno kod Heisenbergovog komutacionog pravila.
Razmotrimo prvo (9.89) generalno i pomnožimo ga sleva operatorom b, tj. primenimo operator *b* na levu i desnu stranu jednačine (9.89). Dobija se

$$bb^+ b\phi = n_\lambda b\phi_\lambda \qquad (9.91)$$

Prema pravilu komutacije (9.90) možemo zameniti $1+b^+b$ sa bb^+. Kada se ovo obavi sa prva dva faktora na levoj strani dobija se

$$b^+ b(b\phi_\lambda) + b\phi_\lambda = n_\lambda b\phi_\lambda \qquad (9.92)$$

ili , ako kombinujemo izraze $b\Phi_\lambda$ na desnoj strani

$$b^+ b(b\phi_\lambda) = (n_\lambda - 1)(b\phi_\lambda) \qquad (9.93)$$

Kao što vidimo, primena operatora b na talasnu funkciju Φ_λ stvara novu talasnu funkciju $\Phi=(b\Phi_\lambda)$, koja zadovoljava (9.89) iako je njena svojstvena vrednost za 1 manja, tj, $n_\lambda \to n_\lambda - 1$. Operator b, tako smanjuje broj n za 1. Nazivamo ga operator *anihilacije*. Pošto, kao što je opaženo ranije, energija E, mora biti pozitivna, n mora da ima donji limit. Zato mora postojati najniži broj n_0 i odgovarajuća talasna funkcija Φ_0 za (9.89). Ako ovaj formalizam ponovimo za najniže svojstveno stanje sa λ=0 dolazi se do kontradikcije. Trebalo bi da nadjemo talasnu funkciju sa još manjom svojstvenom vrednošću, nasuprot pretpostavki da je Φ_0 već najniže stanje. Kontradikcija se jedino razrešava ako $b\Phi_0$ jeste identično jednako nuli. Onda je (9.89) trivijalno ispunjeno za svako n; nula nije prava svojstvena vrednost. Za najniže stanje imamo uslov

$$b\Phi_0=0. \qquad (9.94)$$

Ako zamenimo b sa operatorom koji on simbolizuje (9.86), onda je (9.94) ekvivalentno sa

$$(\frac{d}{d\zeta}+\zeta)\phi_0 = 0. \tag{9.95}$$

Ova diferencijalna jednačina prvoga reda se može još napisati u formi

$$\frac{d\phi_0}{\phi_0} = -\zeta d\zeta \tag{9.96}$$

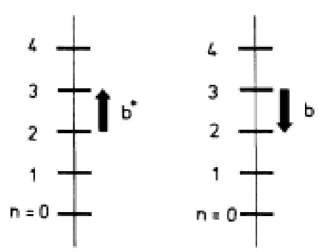
iz koje se integracijom dobija

$$\ln\phi_0 = -\frac{1}{2}\zeta^2 + C' \tag{9.97}$$

ili uzimajući antilogaritam

$$\phi_0 = Ce^{-\frac{1}{2}\zeta^2} \tag{9.98}$$

Konstanta C se može odrediti iz uslova normiranja.



Slika 9.6. Ilustracija efekta dejstva operatora kreacije i anihilacije. Levo. Primena b^+ *znači penjanje na gore po stanjima n=0,1,... za jedan stepenik. Desno. Primena b odgovara spuštanju za jedan stepen.*

Sada ćemo da ispitamo šta se dešava kada se primeni operator b^+ na obe strane (9.89). Po analogiji sa koracima (9.91-93) dobija se, uz korišćenje relacije(9.90)

$$b^+b(b^+\phi_\lambda) = (n_\lambda + 1)(b^+\phi_\lambda) \tag{9.99}$$

to jest, primenom operatora b^+ povećava se svojstvena vrednost za 1. Zato se b^+ naziva operator kreacije (Slika 9.6). Ako izaberemo osnovno stanje Φ_0 za Φ_λ dobija se proporcionalnost

$$\phi_1 \infty b^+\phi_0$$

i druga primena b^+ daje

$\phi_2 \infty b^+ \phi \infty (b^+)^2 \phi_0$ i td.

Ovde smo koristili znak proporcionalnosti, a ne znak jednako, jer još uvek ne znamo da li su funkcije $b^+\Phi_0$, $(b^+)^2\phi_0$ normirane ili ne. Uopšte, dobija se

$$\phi_\lambda = C_\lambda (b^+)^\lambda \phi_0 \tag{9.100}$$

gde konstanta C_λ služi kao faktor normiranja.

Kako n uvek raste za ceo broj pri primeni b^+, a najniža svojstvena vrednost je nula (n_0=0), možemo da identifikujemo indeks λ sa n. Uključujući faktor normiranja (koji ne izvodimo ovde), $C_n = 1\sqrt{n!}$, nalazimo normirane talasne funkcije

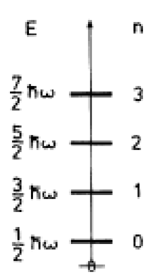
$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \phi_0 \tag{9.101}$$

Jednačina (9.101) još uvek izgleda zastrašujuće apstraktno. Zato ćemo preko nekoliko primera pokazati kako se talasne funkcije mogu eksplicitno izvesti; ovde ćemo izostaviti faktor normiranja iz razmatranja. Za n=0 već smo dobili $\Phi_0 \propto \exp(-\zeta^2/2)$. Koristeći (9.88, 83, 85) nalazimo najnižu vrednost energije $E_0=\hbar\,\omega/2$, što je ista nulta energija koja je diskutovana u sekciji 7.5. Za n=1 dobija se

$$\phi_1 \infty b^+ \phi_0$$

ili koristeći eksplicitne izraze za b^+ i Φ_0

$$\phi_1 \infty \left(-\frac{d}{d\zeta} + \zeta\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\zeta^2\right)$$



Slika 9.7. Energetski nivoi harmonijskog oscilatora.

Nakon diferenciranja imamo

$$\phi_1 \infty \zeta \exp\left(-\frac{1}{2}\zeta^2\right)$$

Odgovarajuća energija je

$$E = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

Za n=2 dobija se

$$\phi_2 \infty b^{+}\phi_1 \infty (-\frac{d}{d\zeta} + \zeta)\cdot \zeta e^{-\frac{1}{2}\zeta^2}$$

nakon diferenciranja

$$\phi_2 \infty (2\zeta^2 - 1)\cdot \zeta e^{-\frac{1}{2}\zeta^2}$$

za energiju nalazimo

$$E = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

Ako nastavimo ovu proceduru, dobiće se polinom po ζ ili diferenciranje po ζ. Generalno, za n-tu talasnu funkciju dobija se izraz oblika

$$\phi_n = H_n(\zeta) e^{-\frac{1}{2}\zeta^2} \qquad (9.102)$$

gde su H_n polinomi, koji su u matematičkoj literaturi poznati kao *Hermite*ovi polinomi. Odgovarajuće energije (vidi sl. 9.7) su date sa

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (9.103)$$

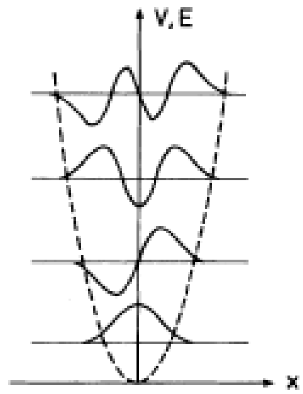
Radi kompletnosti dajemo formulu za Hermiteove polinome

$$H_n(\zeta) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n}} e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} e^{-\zeta^2} \frac{1}{\sqrt{n!\sqrt{\pi}}} \qquad (9.104)$$

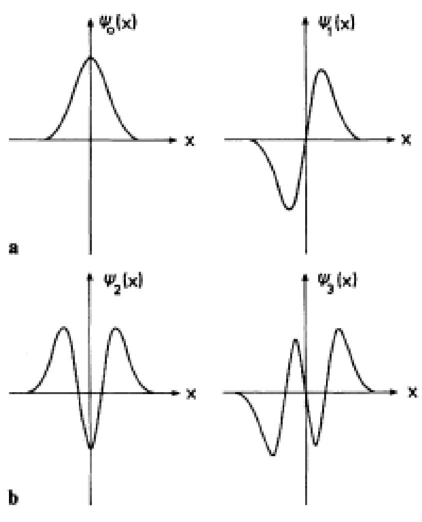
Vratimo se sada sa koordinate ζ na originalnu koordinatu x, i uz korektno normalizovanu svojstvenu funkciju Šredingerove jednačine harmonijski oscilator je dat sa

$$\psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{m_0\omega}{\hbar}} \exp(-\frac{1}{2}x^2 m_0\omega/\hbar)\cdot H_n(x\sqrt{m_0\omega/\hbar}) \qquad (9.105)$$

Na slici 9.8 nacrtan je potencijal V(x). Pored toga, energetski nivoi $(n+1/2)\hbar\omega$ su dati na ordinati, kao i same talasne funkcije. Četiri prvih talasnih funkcija na energetskoj skali su detaljnije prikazani na slici 9.9a,b. Iako ćemo u najvećem delu koristiti konfiguracionu reprezentaciju $\psi(x)$ za talasnu funkciju u ovoj knjizi, operatori kreacije i anihilacije b^+ i b, su nezamenjivi u mnogim oblastima kvantne teorije.



Slika 9.8. Reprezentacija kvantno mehaničkog harmonijskog oscilatora koja se često nalazi u knjigama. Ova slika sadrži tri crteža u jednom: 1) Ordinata znači ukupnu energiju E. Horizontalne linije (iznad x ose) daju kvantizirane energetske nivoe. 2). Ordinata daje potencijal V(x). Isprekidana kriva pokazuje oblik potencijalne krive kao funkcija položaja x. 3), Svaka horizontalna linija služi kao x osa na kojoj su date talasne funkcije odovarajućih energija.



Slika 9.9. a) Talasne funkcije harmonisjkog oscilatora za n=0,1. b) Talasne funkcije harmonijskog oscilatora za n=2,3.

Problemi

9.1. Zamenjujući talasni paket sa $\omega = \hbar k^2 / 2m_0$ iz zadatka 7.1 u Šredingerovu jednačinu, pokaži da je to rešenje za česticu na koju ne deluju nikakve sile.

9.2. Neka su talasne funkcije Φ_1 i Φ_2 rešenja Šredingerove jednačine (9.35) sa svojstvenim energijama E_1 i E_2. Pokazati da je

$$\psi(r,t) = c_1\Phi_1(r)\exp(-iE_1 t/\hbar) + c_2\Phi_2(r)\exp(-iE_2 t/\hbar)$$

rešenje Šredingerove jednačine (9.32). Koje usove moraju da zadovoljavaju c_1i c_2 da bi se normalizovalo $\psi(r,t)$. Generalizirati ovao vežbanje na talsni paket

$$\psi(r,t) = \sum_j c_j \exp(-iE_j t/\hbar)\phi_j(r)$$

Napomena

$$\int \Phi_j^*(r)\Phi_k(r)dV = \delta_{jk}\begin{cases} = 0 \; za \;\; j \neq k \\ = 1 \; za \;\; j = k \end{cases}$$

9.3. Potencijal V(r) je u jednoj dimenziji dat sa $-\beta\delta(x)$, gde $\delta(x)$ Dirakova δ funkcija (vidi matematičke dodatke). Reši Šredingerovu jednačinu za vezana stanja, tj. kada je E<0.

Napomena.
Reši Šredingerovu jednačinu za x<0 i x>0, drugim rečima tamo gde je $\delta(x) = 0$.
Tamo gde je x=0, nadjena rešenja, ψ_- i ψ_+ se moraju spojiti na neprekidan način. Takdoje, izvedi sekondarni granični uslov (uslov skoka) za ψ'_- i ψ'_+ integraleći Šredingerovu jednačinu preko $-\varepsilon < x < \varepsilon, \rightarrow 0.$ Napiši talasnu funkciju tako da se može normalizovati, i nadji konstantu normalizacije i energiju.

9.4. Naći vezana stanja čestice u jednodimenzionalnoj jami za koju je potencijal oblika

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \quad za \quad x < -L \\ V(x) &= -V_0 \quad za \quad -L \le x \le L - L \\ V(x) &= 0 \quad za \quad x > L \end{aligned}$$

Napomena:

Reši Šredingerovu jednačinu u svakom od ova tri podregiona. Zahtevaj da $\psi(x) \rightarrow 0 \quad za \quad x \rightarrow \pm\infty$ i da su $\psi(x)$ i $\psi'(x)$ neprekidne na $x=\pm L$. Prikaži svojstveni spektar za E<0, i diskutuj zavisnost od L i V_0.

9.5 Izračunati “rasejavajuća stanja”, u kojima je $E \geq 0,$ za česticu koja se kreće u δ potencijalu Problem 9.3.

Napomena: Koristi probno rešenje $\psi(x) = \exp(ikx) + a\exp(-ikx)$ za $x \leq 0$ i $\psi(x) = b\exp(ikx)$ za $x \geq 0.$ i odredi a i b. Koja je fizička interpretacija ovog probnog rešenja u polju talasne optike? Nema potrebe da se nrmalizuje. Kako se a i b menjaju kada se menja znak β , tj. kada je potencijal odbojan.

9.6. Neka se slobodna čestica sudari sa beskonačno visokom potencijalnom barijerom. Kakva je njena talasna funkcija (bez normalizacije).

9.7. Za jednodimenzionalni talasni paket, Problem 7.1. izračunati očekivane vrednosti položaja, x, impulsa p, kinetičke energije i x^2. Zašto je očekivana vrednost x^2 informativnija od oč. vrednosti x.

9.8. Izrazi očekivane vrednosti energije za talasni paket slobodne čestice u Problemu 7.1. preko svojstvenih vrednosti energija operatora kinetičke energije.

9.9. Dokaži relacije komutacije (9.77-80) za ugaoni momenat.

Napomena: Koristi kvantno mehaničku definiciju operatora ugaonog momenta i relacije komutacije izmedju položaja i impulsa u tri dimenzije.

9.10. Demonstrirati relaciju komutacije izmedju $\widehat{l}_x$ i x, i izmedju $\widehat{l}_x$ i centralnog potencijala V(r) koji zavisi samo od $r = |\vec{r}|$.

9.11 . Dve funkcije ψ_1 i ψ_2 se anuliraju u beskonačnosti.

Pokazati da važi

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* x \psi_2 dx = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* x \psi_1 dx \right)^*$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_2 dx = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_1 dx \right)^*$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \widehat{\aleph}\, \psi_2 dx = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \widehat{\aleph}\, \psi_1 dx \right)^*$$

Osobine operatora, x, $p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$, $\widehat{\aleph} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ koje treba da budu ovde dokazane, se nazivaju kao Hermitske.

9.12. Dokaži Ehrenfestovu teoremu

$$m_0 \frac{d}{dt} x = p, \qquad \frac{d}{dt} p = -\left(\frac{dV}{dx} \right)$$

za jednodimenzionalno kvantno mehaničko kretanje čestice.

Napomena: Koristi definiciju operatora x, p i dV/dx i činjenicu da ψ i ψ^* zadovoljavaju Šredingerovu jednačinu sa potencijalom V(x). Koristi takodje rezultat iz 9.1.

Kakav bi bio iskaz ove teoreme u tri dimenzije.

9.13. Izračunati talasne funkcije vrednosti energije čestice na koju deluje sila $F=kx+k_0$ ($k = m\omega^2$).
Napomena. Uzeti V(x) i izvesti novu Šredingerovu jendačinu od "stare" za harmonijski oscilator preko transformacije koordinata.

9.14. Dokaži komutacionu relaciju (9.90).

$$bb^+ - b^+b = 1$$

za operatore b i b^+ harmonijskog oscilatora.

Napomena: Koristi definicije b^+ i b iz (9.86) i komutacione relacije izmedju x i $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ (9.74).

9.15. Konstruisati talasni paket

$$\psi = \psi_0 \exp(-i\frac{\omega}{2}t) + \psi_1 \exp(-i\frac{3\omega}{2}t)$$

iz prva dva stanja harmonijskog oscilatora i prouči promene $|\psi|^2$ sa vremenom preko grafičke prezentacije.

9.16. Neka je Šredingerova jednačina harmonijskog oscilatora

$$b^+ b\Phi_n = n\Phi_n \quad \text{(n=0,1,2,...)}$$

gde je $b^+ = (1/\sqrt{2})\left(-\frac{d}{d\xi} + \xi\right)$; $b = (1/\sqrt{2})\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)$, $\Phi = \phi(\xi)$. Za b, b^+ važi relacija relacija komutacije $[b, b^+] = 1$. Dokaži sledeće relacije

a) $$\int \left[b^+\Phi(\xi)\right]^* \psi(\xi)d\xi = \int \Phi^*(\xi) b\psi(\xi)d\xi$$

$$\int \left[b\Phi(\xi)\right]^* \psi(\xi)d\xi = \int \Phi(\xi)^* b^+\psi(\xi)d\xi$$

b) $\int \left(b^+\Phi_n\right)^* \left(b^+\Phi_n\right) d\xi = (n+1)\int \Phi_n^* \Phi_n d\xi$

c) Ako je Φ_n normalizovano, onda je i $\Phi_{n+1} = 1/\sqrt{n+1}\, b^+\Phi_n$ je takodje normalizovano.

d) Normalizaciona funkcija Φ_n se može izraziti kao

$$\Phi_n = 1/\sqrt{n!}(b^+)^n \Phi_0, \qquad b\Phi_0 = 0.$$

e) $b^+\Phi_n = \sqrt{n+1}\Phi_{n+1}, \qquad b\Phi_n = \sqrt{n}\Phi_{n-1}$

f) $b(b^+)^n - (b^+)^n b = n(b^+)^{n-1}, \quad b^+(b)^n - (b)^n b^+ = -n(b)^{n-1} = -\frac{\partial b^n}{\partial b}$

Napomene: a) koristi eksplicitne izraze za b^+ i b preko ξ, d/dξ i parcijlnu integraciju.
b) Koristi a) i Šredingerovu jadnačinu
c) sledi iz a)
d) Metod matematičke indukcije.
e) Sledi iz d) i relacija komutacije.
f) Reši indukcionom metodom (Napiši $b(b^+)^n - (b^+)^n b$ kao $b(b^+)^n - (b^+)^{n-1} b^+ b$)

9.17. Izračunati očekivane vrednosti impulsa, kinetičke energije i potencijalne energije n tog ekscitovanog stanja harmonijskog oscilatora.
Napomena: Koristi (9.83 i 84) zameni x u ξ, i onda ξ u d/dξ u b^+ i b , i onda koristi

$$\int \Phi_n^*(\xi)\Phi_m(\xi)d\xi = \delta_{nm} = \begin{cases} 0 & za \quad m \neq n \\ 1 & za \quad m = n \end{cases}, \qquad \text{n,m=0.1.,2}$$

9.18.Dokazati da je za talasne funkcije harmonijskog oscilatora $\phi_n(\xi)$

$$\int \Phi_m^*(\xi)\Phi_n(\xi)d\xi = \delta_{mn}$$

Napomena: Koristi činjenicu da je

$$\Phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^+)^n \Phi_0$$

$$b\Phi_0 = 0$$

i rezultat a) problema 9.16. Nastavi sa indukcijom.

9.18. Bra i ket notacija.
Engleski fizičar, Dirak, je uveo veoma konciznu notaciju, naročito za očekivane vrednosti i funkcije, koji ćemo ovde demonstrirati za slučajh harmonijskog oscilatora.
Umesto Φ_n piše se $\left|n\right\rangle$. Integral $\int \Phi_n^*(\xi)\Phi_n(\xi)d\xi$ se predstavlja kao $\left\langle n\middle|n\right\rangle$ i očekivana vrednost $\int \Phi_n^*(\xi)b\Phi_n(\xi)d\xi$ kao $\left\langle n\middle|b\middle|n\right\rangle$. Kako je <> zagrada (na engleskom “bracket”) $\left|n\right\rangle$ je nazvano “bra”, i $\left|n\right\rangle$ je ket. Koristeći rezultate problema 9.16 i 9.18 pokazati da je

a) $b^+\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$

$b\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$

b) $\left\langle n\middle|m\right\rangle = \delta_{nm}$

c) $\left\langle n\middle|b\middle|n\right\rangle = 0$

$\left\langle n\middle|b^+\middle|n\right\rangle = 0$

d) Izračunati $\left\langle n\middle|b^+ + b^2\middle|n\right\rangle = 0$ i $\left\langle n\middle|b^+ - b^2\middle|n\right\rangle = 0$

Koji je fizički smisao ovih očekivanih vrednosti.