

9 OSNOVI KVANTNE MEHANIKE

9.1 Hajzenbergov princip neodređenosti (1927. god.)

1923. god. Luj de Broj daje hipotezu: *čestica supstancije pored korpuskularne ima i talasne osobine, koje su izraženije ukoliko je čestica manja.*

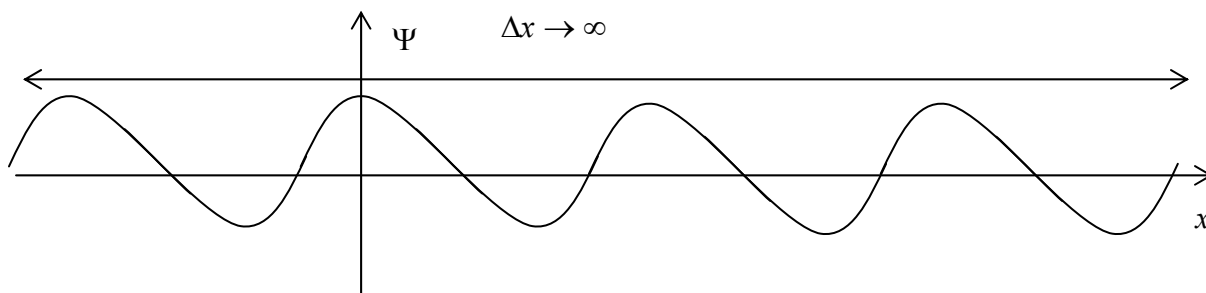
Dao je vezu između korpuskularne (količine kretanja) i talasne prirode (talasne dužine) čestice u obliku

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (9.1)$$

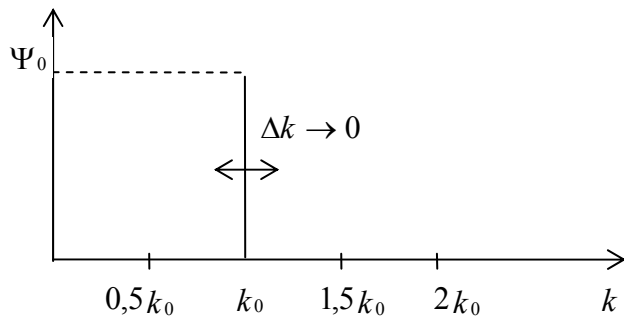
Dakle čestici pridružujemo talas talasne dužine λ . Kakvu nam informaciju nosi takav talas?

9.1.1 Lokalizovanje talasa u prostoru

Neka je pridruženi talas oblika $\Psi(x, t) = \Psi_0 \cos(\omega t - k_0 x)$, što znači da posmatramo jednodimenzionalno kretanje čestice duž pozitivnog smera x ose. Fiksiramo talas u trenutku $t = 0$, odnosno lokalizujemo ga u prostoru (vidi sl. 9.1.a).



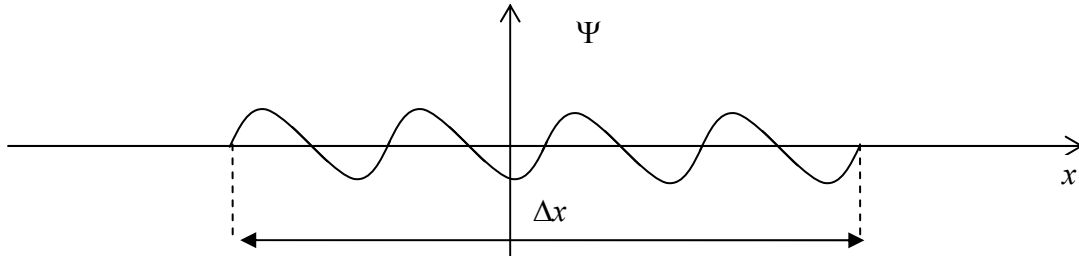
Sl. 9.1a Prostorno lokalizovanje talasa



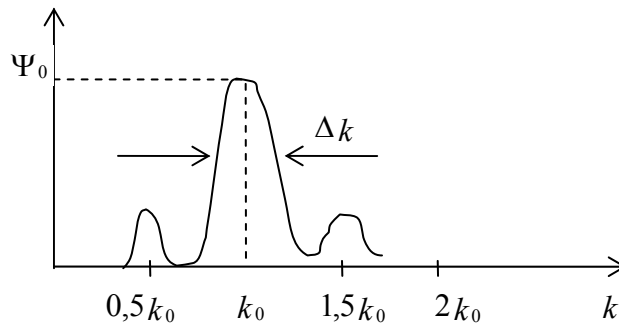
Sl.9.1b Amplitudska raspodela pridruženog talasa

Talas se širi od $x = -\infty$ do $x = \infty$ sa tačno definisanim talasnim brojem k_0 (talasnom dužinom $\lambda_0 = 2\pi/k_0$) i ništa u ovom talasu ne sugerise na lokalizaciju u prostoru nečega čemu pridružujemo reč "čestica". To znači da se čestica može naći bilo gde u gore navedenom intervalu, odnosno neodređenost nalaženja čestice je $\Delta x \rightarrow \infty$. Talasni broj je tačno određen $k = k_0$ pa je neodređenost talasnog broja $\Delta k = 0$ (vidi sl. 9.1.b).

Kako pridruživanjem jednog talasa ne možemo lokalizovati česticu u prostoru čestici ćemo pridružiti talasni paket $\Psi(x,t) = \sum_{i=1}^n \Psi_{0i} \cos(\omega_i t - k_i x)$ koji daje harmonijski talas u konačnom intervalu Δx , a preko destruktivne interferencije nulu izvan regiona širine Δx (vidi sl. 9.2a). Na taj način imamo lokalizaciju čestice u prostoru izmerenu preko prostornog intervala širine Δx .



Sl.9.2a Prostorno lokalizovanje talasnog paketa



Sl.9.2b Amplitudska raspodela pridruženog talasnog paketa

Pokazuje se da ukoliko je prostorna neodređenost manja da je neodređenost talasnog broja veća i obrnuto. Proizvod tih neodređenosti je reda veličine jedinice

$$\Delta x \cdot \Delta k \sim 1. \quad (9.2)$$

Kako je $k = 2\pi/\lambda$ i iz de Brojjeve relacije $\lambda = h/p_x$ gornja relacija dobija oblik

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h/2\pi \sim \hbar, \quad (9.3)$$

što predstavlja *prostorno-impulsni Hajzenbergov princip neodređenosti*.

U slučaju tordimenziionalnog kretanja čestice pored navedene relacije imali bi i

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \sim \hbar \text{ i } \Delta z \cdot \Delta p_z \sim \hbar. \quad (9.4)$$

9.1.2 Lokalizovanje talasa u vremenu

U ovom slučaju talas bi fiksirali pri $x = 0$ i crtali bi vremensku zavisnost talasne funkcije i amplitudsku raspodelu u zavisnosti od kružne frekvencije. Problem je analogan sa prethodnim tako da koristimo iste relacije samo što umesto prostorne koordinate stavljamo vremensku $x \rightarrow t$ i umesto talasne dužine stavljamo kružnu frekvenciju $\lambda \rightarrow \omega$.

$$\Delta t \cdot \Delta \omega \sim \hbar. \quad (8.5)$$

kako je $\omega = 2\pi\nu = 2\pi E/h$ gornju relaciju možemo napisati u obliku

$$\Delta t \cdot \Delta E \sim \hbar, \quad (9.6)$$

što predstavlja *vremensko-energetski Hajzenbergov princip neodređenosti*.

Hajzenbergov princip neodređenosti nam kazuje da je nemoguće istovremeno odrediti poziciju čestice u prostoru i njenu količinu kretanja sa apsolutnom preciznošću ili njenu ukupnu energiju i trenutak nekog događaja vezanog za česticu.

Pri predstavljanju čestice u kvantnoj mehanici cilj je predstaviti je talasnim paketom sa velikom amplitudom u oblasti gde se čestica može naći i malom amplitudom bilo gde drugde. Širina talasnog paketa nam ukazuje na moguću lokaciju čestice.

9.2 Talasna funkcija Ψ (psi)

Čestici koje se kreće pridružujemo talas (talasni paket).

Koja je to fizička veličina čije promene u prostoru i vremenu čine taj talas?

Po Maksu Bornu talasna funkcija Ψ , koja je obično kompleksna f-ja, nema fizičko značenje ali kvadrat njene apsolutne vrednosti $|\Psi|^2$ predstavlja u bilo kojoj tački prostora gustinu verovatnoće (verovatniću po jedinici zapremine) da se čestica nađe baš u toj tački prostora. Ako je dV elementarna zapremina koja sadrži posmatranu tačku prostora ond verovatnoća nalaženja čestice u uočenoj tački iznosi $|\Psi|^2 dV$. Kako se čestica mora negde nalaziti u prostoru (siguran događaj) onda je

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1. \quad (9.7)$$

9.3 Šredingerova j-na u slučaju jednodimenzionalnog kretanja nerelativističke čestice u polju konzervativnih sila

Pridružimo čestici talasnu f-ju

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 \cos(\omega t - kx). \quad (9.8)$$

kako je

$$p = h/\lambda = 2\pi\hbar/\lambda = k\hbar \text{ i } E = h\nu = 2\pi\hbar\nu = \omega\hbar, \quad (9.9)$$

iz (9.8) i (9.9) sledi

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 \cos\left[\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right]. \quad (9.10)$$

U konzervativnom polju energija čestice se ne menja ($E = \text{const}$).

Parcijalnim diferenciranjem (9.10) po prostornoj koordinati x dobijamo

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\Psi_0 \left(-\frac{p}{\hbar}\right) \sin\left[\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right]. \quad (9.11)$$

Još jednim parcijalnim diferenciranjem dobijamo

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \Psi_0 \cos\left[\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right] = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \Psi, \quad (9.12)$$

odnosno

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \left(\frac{p}{\hbar} \right)^2 \Psi = 0. \quad (9.13)$$

Za nerelativističku česticu

$$p = 2m E_k = 2m(E - E_p). \quad (9.14)$$

Iz (9.13) i (9.14) dobijamo Šredingerovu jednačinu u obliku

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - E_p)\Psi = 0. \quad (9.15)$$

U slušaju slobodne čestice (van dejstva sila) $E_p = 0$.

Od svih mogućih rešenja Šredingerove jednačine fizičkog smisla imaju samo jednoznačne, neprekidne, glatke i konačne f-je Ψ koje zadovoljavaju granične uslove datog fizičkog problema. Takve f-je se nazivaju *sopstvene f-je* i one se dobijaju za tačno određene vrednosti totalne energije E čestice, a te vrednosti se nazivaju *sopstvene vrednosti energije*.

Skup sopstvenih vrednosti energije čini energetski spektar čestice (dozvoljenje vrednosti energije čestice).

9.4 Jednodimenzionalni kvantni oscilator

Čestica koja se kreće kao linearni harmonijski oscilator ima potencijalnu energiju

$$E_p = \frac{m \omega^2 x^2}{2}.$$

Primenom Šredingerove jednačine na takvu česticu dobijamo

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m \omega^2}{2} x^2 \right) \Psi = 0. \quad (9.16)$$

F-ja Ψ ima jednoznačna, neprekidna i konačna rešenja za vrednosti totale energije E

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (9.17)$$

što predstavlja energetski spektar jednodimenzionalnog kvantnog oscilatora. Čestica se naziva kvantni oscilator iz razloga što je energija kvantovana. Za $n = 0$ dobijamo energiju nultih oscilacija čestice (oscilacije na temperaturi apsolutne nule $T = 0 K$ ili $t = -273,16 ^\circ C$).

Postavlja se pitanje kada koristimo zakone kvantne mehanike a kada klasične mehanike?

Ako je brojna vrednost neke fizičke veličine koja karakteriše stanje fizičkog sistema, a ima dimenziju dejstva (energija $\times$ vreme), npr. moment količine kretanja L , uporediva sa vrednošću Plankove konstante h ponašanje fizičkog sistema opisujemo zakonima kvantne mehanike.