6.1 Postulati kvantne mehanike

1. Valna jednadžba [WF]
   - opisuje sva stanja cijelog sistema
   - svakom stanju sistema pripada jedna valna funkcija (prostor stanja je potpun i jednoznačan)

   → treba biti kvadratno integrabilna i neprekidna

2. svaka fizikalna veličina → opisana (linearnim, Hermitskim) operatorom
   ∟ djelovanje operatora na WF daje moguć ishod mjerenja fiz veličine
   (svojstvena vrijednost operatora u Hilbertovom prostoru stanja)

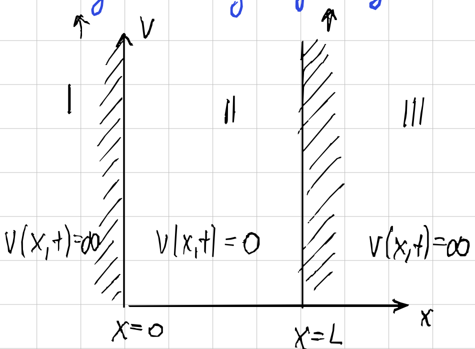
3. očekivana vrijednost
   - računa prema izrazu za srednju vrijednost, uz kompleksnu fiju gustoće vjerojatnosti opisanu s

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

4. Schrödingerova jednadžba opisuje dinamiku QM sustava

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \underbrace{\hat{H}}_{\text{operator ukupne en. sustava} \Rightarrow \text{hamiltonijan}}\Psi(x,t)$$

Primjer 2: rješenje ŠJ za česticu u beskonačnoj potencijalnoj jami



$$V(x,t) = \begin{cases} \infty & \text{za } x<0 \text{ i } x>L \\ 0 & \text{za } 0<x<L \end{cases}$$

separacija varijabli – vremenska ovisnost kao za slobodnu čest

prostorni dio – općenita superpozicija ravnih valova u $\pm x$ smjeru

dodatno – zahtjev za konačnom en. sustava vodi na rubne uvjete
$\Psi(x=0) = \Psi(x=L) = 0$

⇒ čvorovi na rubovima + putujući ravni val u dva smjera

ALGORITAM

I) vremenski ovisna SJ

II) separacija var

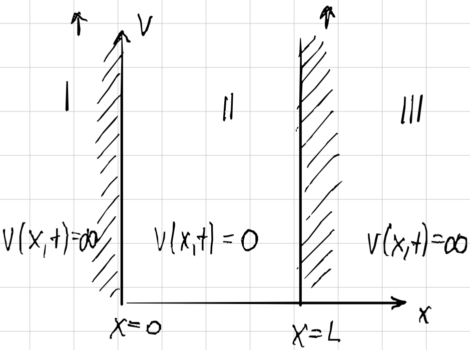
III) vremenski neovisna SJ

IV) oblik potencijala : nr' podmicija
(oblik potencijala / simetrija određuje „geometriju")

V) Rubni uvjeti – neprekidnost, glatkost $\Psi_I(x=0) = \Psi_{II}(x=0)$, $\Psi_{III}'(x=L) = \Psi_{II}'(x=L)$

VI) Slobodne konstante i normalizacija $\int|\Psi(x,t)^2|dx = \int\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = 1$

Primjer 2.)



$$V(x,t) = \begin{cases} \infty & \text{za } x<0 \text{ i } x>L \\ 0 & \text{za } 0<x<L \end{cases}$$

potencijal je zadan po domenama za područja var x, dijeli prostor na 3 dijela (imat ćemo V-n SJ različitog oblika)

ALGORITAM

I) vremenski ovisna SJ

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

II) separacija var $V(x,t)\to V(x)$

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\cdot\varphi(t)$$

izvod bi trebalo za prva 3 koraka

$$i\hbar\frac{d\varphi(t)}{dt} = E\,\varphi(t)$$

$$\varphi = \varphi_0\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\hookrightarrow \Psi(x,t) = \psi(x)\cdot\varphi_0\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

III) vremenski neovisna SJ

$$E\cdot\psi(x) = \frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) + V(x)\cdot\psi(x)$$

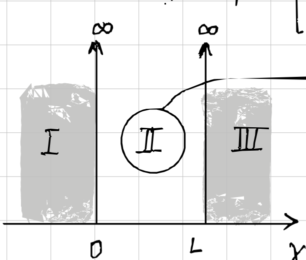
IV) oblik potencijala: tri područja
(oblik potencijala / simetrija određuje „geometriju")

$\boxed{\infty \text{ za } x<0 \text{ i } x>L}$ I. i III. područje

↳ u tim područjima bi rješenje V-n SJ trebalo dati konačnu fizikalnu energiju

• to je jedino moguće ako je valna funkcija $\Psi(x)$ u tim područjima jednaka 0

$$\Longrightarrow \psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } x<0,\ x>L \\ \psi_{II} & \text{za } 0<x<L \end{cases}$$



u II SJ je oblika valne jedn. za slobodnu č. ($V(x)=0$)

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) = E\,\psi(x)$$

↓ proizvoljna konst koju treba odrediti

probno rj oblika: $\psi_{II}(x) = \psi_0(x)\cdot e^{ax}$

$$\frac{-\hbar}{2m}\cdot a^2 \cancel{e^{ax}} = E\cancel{e^{ax}} \longrightarrow a = \pm\sqrt{\frac{E\cdot 2m}{-\hbar}} = \pm\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE} = \pm\frac{i}{\hbar}p$$

uvrštavanjem dobijemo karakterističnu jed. za α

* de Broglieu valni vektor $k = \frac{p}{\hbar}$

$$\psi_{II}(x) = Ae^{i\frac{p}{\hbar}} + Be^{-i\frac{p}{\hbar}} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

V) Rubni uvjeti – neprekidnost, glatkost $\psi_{I}(x=0) = \psi_{II}(x=0)$, $\psi'_{III}(x=L) = \psi'_{II}(x=L)$

VI) Slobodne konstante i normalizacija $\int |\psi(x,t)^2| dx = \int \psi^*(x,t)\,\psi(x,t)\,dx = 1$

→ određujemo sve uvedene konstante (E, A, B) iz rubnih uvjeta i uvjeta normalizacije

1. rubni uvjeti:

$\boxed{x=0}$ $\quad \psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \Rightarrow 0 = A + B \to B = -A$ veza konstanti

$$\psi_{II}(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = 2Ai\sin kx$$

$\boxed{X = L}$ $\quad \psi_{III}(x=L) = \psi_{II}(x=L) \to 0 = Ae^{ikL} + Be^{-ikL} = A\left(e^{ikL} - e^{-ikL}\right)$

$$\hookrightarrow 0 = 2Ai\sin(kL)$$

$$k_n L = n\pi \to k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2 \ldots$$

$n=0$ → ne zadovoljava Heisenbergov princip neodređenosti

(VF koja je $\psi(x) = 0$ u području $0 < x < L \to \Delta p \Delta x = 0$; $\Delta p \equiv 0$ ↳ uvjet u skladu)

$x = 0 \to$ vezane konst $B = -A$

$x = L \to$ veza dozvoljenih valnih vektora i dimenzije područja L

↓ vodi na kvantizaciju energije

$$\frac{2mE_n}{\hbar^2} = k_n^2 = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}}$$

⇒ Ukupna VF nakon svih prethodnih koraka:

$$\psi(x,t) = \begin{cases} \varphi(t)\,\psi_I(x) = 0 & \text{za } x < 0 \\ \varphi(t)\,\psi_{II}(x) = \varphi_0 \cdot e^{i\frac{E}{\hbar}t}\, 2Ai\cdot\sin kx & \text{za } 0 < x < L \\ \varphi(t)\,\psi_{III}(x) = 0 & \text{za } x > L \end{cases}$$

→ na takvu VF primjenjujemo uvjet normalizacije

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\cdot\psi(x,t)\,dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{0} \underbrace{\psi_I^2(x)\,dx}_{=0} + \int_0^L \psi_{II}^2(x)\,dx + \underbrace{\int_L^{\infty} \psi_{III}^2(x)\,dx}_{=0}$$

$$= \int_0^L \left[\varphi_0 \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\, 2Ai\sin kx\right]^2 dx = 1$$

$$= \underbrace{(2A\varphi_0)^2}_{\text{konstanta}} \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = (\text{Const})^2 \cdot \int_0^L \frac{1}{2}\left(1 - \cos\frac{2n\pi}{L}x\right) dx = 1$$

$$\to 1 = \frac{C^2}{2}\int_0^L \left(1 - \cos\frac{2n\pi}{L}x\right) dx = \left| \begin{matrix} u = \frac{2n\pi}{L}x \\ du = \frac{2n\pi}{L}dx \end{matrix} \right| = \frac{C^2}{2}\int_0^L (1 - \cos u)\frac{L}{2n\pi}\,du$$

$$= \frac{C^2}{2}\cdot\frac{L}{2n\pi}\int_0^L (1 - \cos u)\,du = \frac{C^2\cdot L}{4n\pi}\left(u - \sin u\right)\Big|_0^L$$

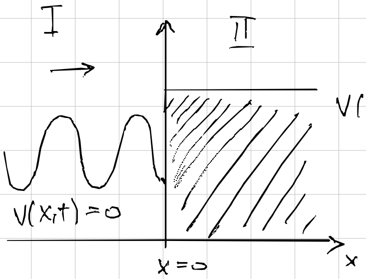
$$= \frac{C^2\cdot L}{2\cdot 2n\pi}\left(\frac{2n\pi \cancel{L}}{\cancel{L}} - \sin\frac{2n\pi L}{L} - 0 + \sin 0\right) = \frac{C^2 L}{2} - \frac{C^2 L}{2\cdot 2n\pi}\cancel{\sin 2n\pi}^{\,0}$$

$$\Rightarrow 1 = \frac{C^2 L}{2} \to \boxed{C = \sqrt{\frac{2}{L}}} \qquad {}^{*}C = 2A\varphi_0^2$$

→ uvrštavajući to, napokon dobijemo konačno rj. $\boxed{\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\sin\frac{2n\pi}{L}x}$

$n = 1, 2 \ldots$

Primjer 3.) rješenje SJ za česticu u prisustvu skoka potencijala ("potencijalna barijera")



$V(x,t) = \begin{cases} 0 & za\ x<0 \\ V_0 & za\ x>0 \end{cases}$

↳ Step funkcija!

• potencijal je vremenski neovisan

VF: $\Psi(x,t) = \psi(x)\cdot\varphi_0\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

$\boxed{\text{područje I}}$ → slobodna čestica ($V(x)=0$!)

SJ oblika valne jed.: $\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) = E\psi(x)$

↓

rj. oblika $\psi(x) = \psi_0 e^{ax}$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}(\psi_0 e^{ax}) = E\,\psi_0 e^{ax} \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\cdot a^2 \cancel{e^{ax}} = E\cancel{e^{ax}}$$

$$a = \pm\sqrt{\frac{2mE}{-\hbar^2}} = \pm i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} = p \quad = \pm\frac{i}{\hbar}p = k$$

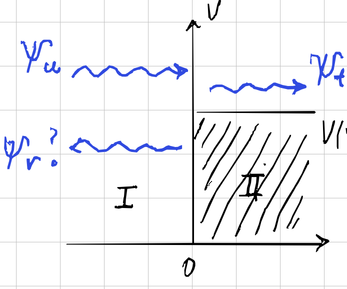
de Broglie vektor $k_1 = \frac{p}{\hbar}$

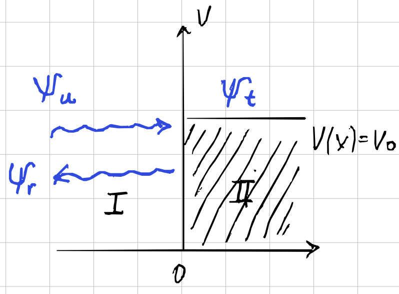
Ovisno o području

rješenje: $\psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} + Be^{\frac{-i}{\hbar}px} = \boxed{Ae^{ikx} + Be^{-ikx}}$

valni vektor ovisi o $\vec{p}$, a $\vec{p}$ ovisi o E_k
E_k je razlika energije e^- i potencijalne en.

Dvije moguće situacije koje možemo imati ovisno o iznosu energije čestice E





energija čestice je > potencijalnog skoka
$E > V_0$
↳ prelazi u područje II sa $(E-V_0)$
+($\psi_r \neq 0$) iako se očekuje da sve prođe

$E < V_0$ – prelazak zabranjen

• neiščezavajuća ψ_u → neki dio ipak prođe

↓

Vremenski neovisna SJ u II je:

→ $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = (E-V_0)\psi(x)$

→ u području II razlikujemo 2 slučaja,
↳ 2 različita rješenja karakteristične jed.

a) $E > V_0 \rightarrow E - V_0 > 0 \Rightarrow \psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II}x} + \cancel{De^{-ik_{II}x}}$, $k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

gibanje "ulijevo" — a dolazi udesno

b) $E < V_0 \rightarrow E - V_0 < 0 \Rightarrow \psi_{II}(x) = C'e^{-k_2 x} + \cancel{D'e^{k_2 x}}$, $ik_2 = k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

eksp. rast vjerojatnosti s dubinom prodiranja u zabranjeno područje

Ito bi vodilo u beskonačnu gustoću vjerojatnosti na dovoljnoj dubini → NEFIZIKALNO) → $D = 0$

$E < V_0$ → eksp raspad, rast rješ. jer faktor $\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ postaje R

→ ovo je realan fenomen

Gledamo ukupnu VF u području I i u području II te primjenjujemo uvjet da VF i njena derivacija moraju biti jednake na mjestu „spoja"

$\hookrightarrow x=0$

kontinuiranost i glatkost

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

a) $E > V_0$ $\quad \psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II}x}$

b) $E < V_0$ $\quad \psi_{II}(x) = C'e^{-k_2x}$

* uz $\quad k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \qquad ik_2 = k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

Primjena rubnih uvjeta

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0)$$

$E > V_0$: $A+B=C$

$E < V_0$: $A+B=C'$

$$\frac{d}{dx}\psi_I(x=0) = \frac{d}{dx}\psi_{II}(x=0)$$

$E > V_0$: $Aik_1 - Bik_1 = Cik_{II}$

$E < V_0$: $Aik_1 - Bik_1 = -C'k_2$

a) $\boxed{E > V_0}$ $\quad A+B=C \qquad Aik_1 - Bik_1 = iCk_{II}$

$$ik_1(A-B) = i(A+B) \;/ \cdot i$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_{II}}{k_1 + k_{II}}}$$

$$k_1(B-A) = -(A+B)k_{II} \rightarrow A(k_1 - k_{II}) = B(k_1 + k_{II})$$

koeficijent refleksije :

$$\boxed{R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_{II}}{k_1 + k_{II}}\right)^2}$$

koeficijent transmisije :

$$T+R=1 \rightarrow T = 1-R = 1-\left(\frac{k_1-k_{II}}{k_1+k_{II}}\right)^2$$

$$T = \frac{\cancel{k_1^2} + 2k_1k_{II} + \cancel{k_{II}^2} - \cancel{k_1^2} + 2k_1k_{II} - \cancel{k_{II}^2}}{(k_1+k_{II})^2}$$

$$T = \frac{4k_1k_{II}}{(k_1+k_{II})^2}$$

možemo promatrati graničnu vrijednost koef. refl. u slučaju $E \to 0$ i $E \to \infty$

$$R = \frac{\left|\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}\right|}{\left|\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}\right|} = \frac{|\cancel{\sqrt{2m}}\,(\sqrt{E} - \sqrt{E-V_0})|}{|\cancel{\sqrt{2m}}\,(\sqrt{E} + \sqrt{E-V_0})|}$$

$$\lim_{E\to\infty} R = \frac{\infty}{\infty} = 0$$ energije su puno veće od visine barijere

$\hookrightarrow$ refleksija zanemariva

$\lim_{E\to 0} R$ = nije definirano $\left(\frac{1}{0}\right)$ ograničeni pretpostavkom $E > V_0$!

b) $\boxed{E < V_0}$ $A + B = C'$ $Aik_1 - Bik_1 = -C'k_2$

$ik_1(A-B) = -(A+B)k_2$

$A(ik_1 + k_2) = B(ik_1 - k_2) \Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2} \cdot \frac{i}{i} = \boxed{\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}}$

možemo C'/A $B = C' - A$

$Aik_1 - C'ik_1 + Aik_1 = -C'k_2$

$2Aik_1 = C'(ik_1 - k_2) \rightarrow \underbrace{\frac{C'}{A} = \frac{2ik_1}{ik_1 - k_2}}$ postoji neiščezavajuća VF u klasično zab. području

takva je VF različita od 0 samo u ograničenom području koordinate x

· upadna i reflektirana VF (opisane s A i B) različite od 0 u polubeskonačnom intervalu x

$$\lim_{V_0 \to \infty} \frac{|C'|^2}{|A|^2} = \lim_{V_0 \to \infty} \left(\frac{2i\sqrt{2mE}}{i\sqrt{2mE} - \sqrt{2m(E-V_0)}} \right)^2 = \lim_{V_0 \to \infty} \frac{-8mE}{-2mE + i \cdot 2m\sqrt{E(E-V_0)} - 2m(E-V_0)}$$

$\lim = \frac{1}{\infty} = 0 \rightarrow$ nema prodiranja ~~za~~ taj granični slučaj beskonačno visoke ($V_0 \to \infty$) barijere

· ali inače prodiranje postoji

dubina prodiranja: dimenzija u kojoj amplituda VF opadne na $\frac{1}{e}$ početne vrijednosti

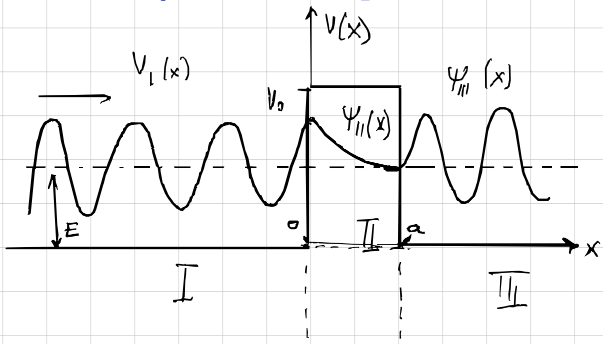
$\psi_{II}(x) = C'e^{-k_2 x} = C'\frac{1}{e} \Rightarrow e^{-k_2 x} = \frac{1}{e} \Rightarrow k_2 x_d = 1$

$\underbrace{x_d = \frac{1}{k_2}}$

~~ne~~ispravan način za određivanje koeficijenta refleksije R:

· gustoća vjv. $\rho = |\Psi(x,t)|^2$, $\vec{j}$ struja gustoće vjerojatnosti $R = \frac{|\vec{j}_-|}{|\vec{j}_+|}$

Primjer: Potencijalna barijera (tuneliranje)



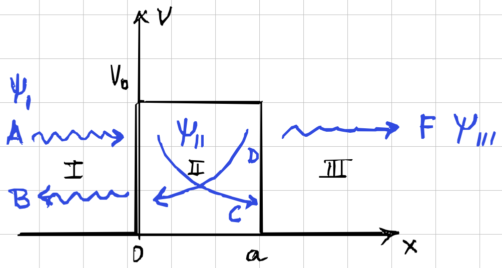
$$V(x) = \begin{cases} 0 & , x<0 \\ V_0 & 0<x<a \\ 0 & x>a \end{cases}$$

- pretpostavljamo slučaj kada čestica treba tunelirati: $E<V_0$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{ik_1x} & , x<0 \\ \psi_{II}(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} & , 0<x<a \\ \psi_{III}(x) = Fe^{ik_1x} & , x>a \end{cases}$$

→ dva člana jer je na rubovima

$k_2 = \sqrt{2m(V_0-E)}$



rubni uvjeti:

$x=0$: $\begin{cases} \psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0): & A+B=C+D \\ \frac{d}{dx}\psi_I = \frac{d}{dx}\psi_{II}: & ik_1A - ik_1B = k_2(C+D) \end{cases}$

$x=a$: $\begin{cases} \psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a): & Ce^{k_2a} + De^{-k_2a} = Fe^{ik_1a} \\ \frac{d}{dx}\psi_{II} = \frac{d}{dx}\psi_{III}: & Ck_2e^{k_2a} + Dk_2e^{k_2a} = Fik_1e^{ik_1a} \end{cases}$

--- nakon nešto alg postupaka s komplex. br.

$$\frac{j_T}{j_u} = \frac{F}{A} = T \longrightarrow T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{4}{4+(\sinh^2 k_2a)\left(4+\frac{k_1^2-k_2^2}{(k_1k_2)^2}\right)} \propto e^{-2k_2a}$$

ovo približenje vrijedi u slučaju da je $k_2a = \sqrt{2m(V_0-E)}\,a \gg 1$

(za dovoljno SLABU propusnu barijeru)

* u slučaju 2 uzastopne barijere – valni vekt opisani s k_1, k_2, a širine a_1 i a_2

vjerojatnost transmisije = umnožak

↳ $T_{1+2} = T_1 \cdot T_2 = e^{-2k_1a_1} \cdot e^{-2k_2a_2} = \underbrace{e^{-2(k_1a_1+k_2a_2)}}$

→ ukupna vjerojatnost: $T_\Sigma = \prod_i e^{-2k_ia_i} = e^{-2\sum k_ia_i} = e^{-2\sum k_i\Delta x}$

$$\boxed{T = e^{-2\int_{x_1}^{x_2} k(x)\,dx} = e^{-2\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(V(x)-E)}\,dx}}$$

$\Delta x \to dx$

valni vektor preko potencijala $k_2(x) = \sqrt{2m(V(x)-E)}$