Електротехнички факултет, Универзитет у Београду - Летњи семестар 2023.

Белешке - Квантна Механика

Михаило Стојковић
24. април 2023.

Садржај

Предавање - 8.3.2023.

Само предавање креће са тим да посматрамо стационарну Шредингерову једначину:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U(x)\psi = E\psi} \tag{1}$$

али у случају када је $U(x) = 0$. Заменом $k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$ у претходну једначину[1] добијамо диференцијалну једначину:

$$\boxed{\psi^{''} + k\psi = 0} \tag{2}$$

Решење ове диференцијалне једначине можемо изразити у два облика:

1. Као збир експоненцијала[2]: $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
2. Као збир синуса и косинуса[3]: $\psi(x) = C\sin(kx) + D\cos(kx)$

Оба облика су решење дате диференцијалне једначине и може се лако показати како једно можемо представити преко другог.

Посматрамо решење у експоненцијалном облику. Због хомогености диференцијалне једначине, негативно и позитивно решење можемо посматрати као два засебна решења са додатом функцијом времена.

$$\psi_1(x,t) = A_1 e^{i(kx-\omega t)} \tag{3}$$

$$\psi_2(x,t) = B_1 e^{-i(kx-\omega t)} \tag{4}$$

и заправо, једначина (3) представља талас који се креће на десно, а једначина (4) представља талас који се креће на лево[4].

Питање које се увек поставља при добитку неког решења једначине: "Да ли ово може представљати таласну једначину". Услови који морају бити испуњени за таласну функцију на неком интервалу су следећи:

1. Таласна функција мора бити нормирана[5]
2. Таласна функција мора бити непрекидна
3. Први извод таласна функције мора бити непрекидан

При почетку решавања проблема нисмо експлицитно специфицирали интервал решавања, тако да сматрамо да је интервал цело поље $\mathbb{R}$. Овде настаје сада проблем јер решење које смо добили не може да се нормира.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*\psi_1 dx = |A_1|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \not< \infty \tag{5}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^*\psi_2 dx = |B_1|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \not< \infty \tag{6}$$

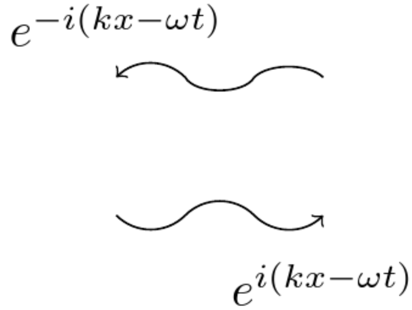
[1] Оваква смена се често појављује у курсу тако да после неког времена постане стандардно да када год се појави неко k сматрамо да је једнако наведеном изразу

[2] Овај облик решења је јако користан у ситуацијама где нам се Шредингерова једначина сведе на облик сличан једначини (2), где ако је испред коефицијента уз ψ знак минус, функција ће бити чисто реална. Решења у овом облику се често узимају у ситуацијама где разматрамо константну потенцијалну енергију или честицу која се налази у коначној баријери

[3] Овај облик решења је јако користан ако на интервалу решавања имамо неку бесконачну баријеру

[4] Смер кретања таласа можемо одредити преко струје вероватноће

[5] Погледати (Услов нормираности)



Слика 1: Кретање таласа

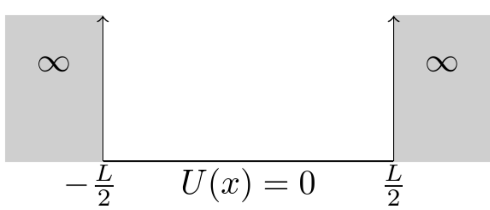
Начин на који ово решавамо је мало шкакљив. Претпоставимо да потенцијална енергија није свуда нула, већ само на интервалу $(-\frac{L}{2}, \frac{L}{2})$. Ван тог интервала сматрамо да је потенцијална енергија бесконачна, то јест, да честица сигурно мора да се налази на овом интервалу. Ван овог интервала $\psi(x,t) = 0$. Бирамо сада функцију (3), без додате функције времена и проверавамо да ли сада можемо да је нормирамо.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\psi_1\|^2 \, dx = 1$$
$$|A_1|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |e^{ikx}|^2 dx = 1$$
$$|A_1|^2 \cdot L = 1 \implies A_1 = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

Овим смо добили константу нормирања. Истим поступком можемо добити B_1 за једначину (4) и испоставиће се да је једнака A_1. Тако да сада имамо решења функција у облику:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \tag{7}$$
$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikx} \tag{8}$$

Наравно, како би повратили наш првобитни случај, захтевамо да $L \to \infty$.

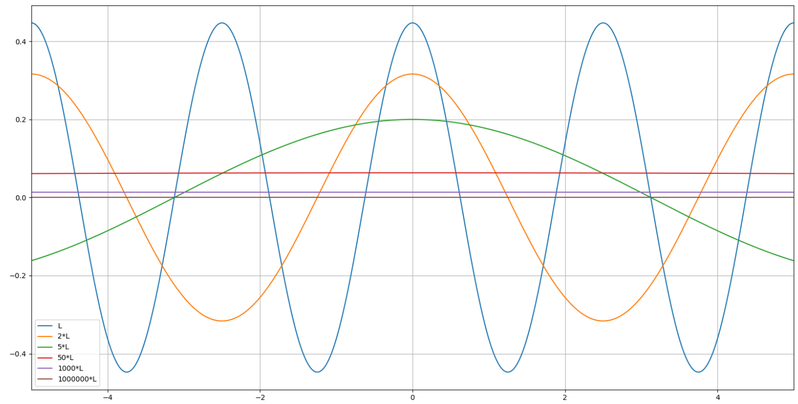


Слика 2: График потенцијалних баријера. У интервалу $\left(-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right)$ потенцијална енергија је једнака 0. Ван тог интервала потенцијална енергија је једнака ∞

Како би проблем у потпуности решили, морамо да сазнамо какав је спектар енергија. Услов који постављамо за проблеме овог типа(проблеми где уводимо фиктивне границе које теже бесконачности) је да сама функција има исте вредности на оба краја граница.

$$\psi_1\left(\frac{L}{2}\right) = \psi_1\left(-\frac{L}{2}\right)$$
$$e^{ik\frac{L}{2}} = e^{-ik\frac{L}{2}}$$
$$e^{ikL} = 1$$

Из последње релације можемо да одредимо вредност k и самим тим и вредност E. Овде је битно назначити глав-



Слика 3: Графички приказ реалног дела таласне функције $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ са повећањем границе L

ни детаљ код оваквих проблема: Увођењем граница довели смо до тога да је спектар дискретан. Једино у граничном случају када баријере теже бесконачности ће се спектар "претворити"у континуалан. Из овога такође закључујемо да проблеми овог типа (без граница) поседују континуални спектар.

Додатан детаљ: Ако покушамо да нађемо исти услов за талас који се креће у лево, добићемо идентичну релацију. Одатле закључујемо да у оваквом континуалном спектру постоје две таласне функције које одговарају истој енергији. Број таласних функција у континуалном домену спектра које одговарају истој вредности енергије се назива дегенерација спектра[6].

[6] У случају који смо разматрали, имамо двоструко дегенерисани континуални спектар

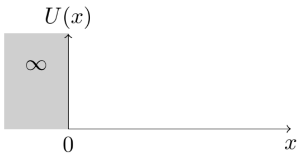
Слободна честица на полубесконачном домену

Није нигде експлицитно поменуто у претходном делу, али у квантној сматрамо да најмања могућа енергија која честица може да поседује је једнака минималној потенцијалној енергији. С обзиром да потенцијална енергија може да се постави увек тако да јој минимална енергија буде 0, сматрамо да је $E > 0$.

Посматрамо сада потенцијалну енергију као на слици (4). Аналитички би то могли да запишемо као:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x > 0 \\ \infty & , \quad x \leq 0 \end{cases} \tag{9}$$

За овако дефинисану потенцијалну енергију имамо само (једноструко дегенерисани) континуални спектар. Али, пре него што решимо овај проблем, можда прво мало да га преформулишемо на такав начин да обухватимо још један случај.



Слика 4

Преформулисаћемо га тако да потенцијална баријера није бесконачна, већ коначна. Самим тим, када решимо тај проблем, можемо касније да пустимо да висина баријере тежи бесконачности и бум, вратили смо се на првобитни проблем. С обзиром да нам потенцијална енергија сада изгледа овако

$$U(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x > 0 \\ U_0 \in \mathbb{R}^+ & , \quad x \leq 0 \end{cases} \tag{10}$$

или као на слици (5). Сада, имамо две могућности за опсег енергије: или је $E \in (0, U_0)$ или је $E > U_0$. Посматрамо први случај и то када је честица унутар баријере, то јест, $x \in (-\infty, 0)$. Шредингерова једначина онда има облик:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi = E\psi$$

Увођењем смене $\gamma^2 \equiv \frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$ добијамо следећи облик диференцијалне једначине[7]:

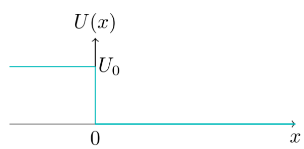
$$\boxed{\psi'' - \gamma^2\psi = 0} \tag{11}$$

Тада решење једначине може се написати у облику:

$$\psi(x) = Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x} \tag{12}$$

[7] Слично као код једначине (2), једначина (11) је јако карактеристична и константно се враћамо на њу. Из тог разлога где год се појави симбол γ(на предавањима се углваном обележава са капа: κ, али је мени то слово мало незграпно, јер јако личи на k, тако да га замењујем са гама), сматрамо да је на исти начин дефинисан

Како би уопште могли да нормирамо било коју функцију, она мора "нестати"(бити једнака нули) када $|x| \to \infty$. Пошто сагледавамо негативне вредности координате у овом случају, функција мора бити једнака нули када тежимо ка минус бесконачности. Одатле видимо да члан уз B дивергира, тако да нам је први услов $B = 0$.



Слика 5

Ово доводи до мало чудног феномена. У класичној механици знамо да за потенцијал овог облика ми не бисмо имали решење за енергију унутар баријере, али овде оно постоји. Што је још бизарније, при почецима баријере таласна функција има ненулту вредност и како се удаљавамо од координатног почетка, све је мања и мања вероватноћа да нађемо честицу у том домену. Корак даље би било посматрање члана γ. Из дефиниције видимо да што је енергија ближа вредности U_0, то је фактор мањи, што само значи да што нам је енергија ближа том прагу, то је већа вероватноћа да ми нађемо честицу у баријери. Језиво...

Гурамо сада баријеру до бесконачности, то јест, $U_0 \to \infty \implies \gamma \to \infty$. Због тога што нам је координата негативна нам следи да у лимесу $\psi \to 0$. Ово ће нам послужити за касније јер знамо која је вредност функције у 0 (битно нам је ово јер функција мора бити непрекидна). Додатно, при оваквим трансформацијама, губимо један услов, а то је услов непрекидности првог извода (због бесконачног скока потенцијалне баријере).

Гледамо сада случај када је $x > 0$. Разматрање је идентично случају који смо разматрали за слободну честицу на почетку, тако да можемо усвојити исто решење. Бирамо тригонометријски облик таласне функције.

$$\psi(x) = C\sin(kx) + D\cos(kx)$$

Из услова да $\psi(0) = 0$ добијамо услов $D = 0$. Феноменално! То значи да таласну функцију онда можемо да опишемо као

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x \leq 0 \\ C\sin(kx) & , \quad x > 0 \end{cases} \tag{13}$$

Што значи да смо решили проблем? Одговор је: за мало... Ствар је што овако дефинисана таласна функција не може да се нормира ☹. Тако да враћамо се на стару добру технику - постављамо бесконачну баријеру од координате L и касније је пуштамо да тежи бесконачности. Услов нормираности се онда своди на:

$$\begin{aligned}
&\int_0^L \|\psi(x)\|^2 \, dx = 1 \\
&C^2 \int_0^L \sin^2(kx) dx = 1 \\
&C^2 \int_0^L \frac{1-\cos(2kx)}{2} dx = 1 \\
&C^2 \left[\frac{L}{2} - \frac{1}{4k}\sin(2kL)\right] = 1 \\
&C^2 \left[\frac{L}{2} - \frac{1}{2k}\sin(kL)\cos(kL)\right] = 1 \\
&C^2 \left[\frac{L}{2} - \frac{1}{2k}\cancelto{0}{\sin(kL)}\cos(kL)\right] = 1 \\
&C^2 \cdot \frac{L}{2} = 1 \implies C = \sqrt{\frac{2}{L}}
\end{aligned}$$

У претпоследњем реду синус је нула јер представља таласну функцију на граници баријере, што знамо да је 0. Коначно, добијамо решење таласне функције

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x \leq 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(kx) & , \quad x > 0 \land L \to \infty \end{cases} \tag{14}$$

Као и у претходним случајевима, док је коначно, спектар енергија је дискретизован. Једино у граничном случају добијамо континуални спектар.

Zadatak 0.1: Енергетски спектар слободне честице у полубесконачном домену

Одредити енергетски спектар таласне једначине (14).

Решење:

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

Quisque ullamcorper placerat ipsum. Cras nibh. Morbi vel justo vitae lacus tincidunt ultrices. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. In hac habitasse platea dictumst. Integer tempus convallis augue. Etiam facilisis. Nunc elementum fermentum wisi. Aenean placerat. Ut imperdiet, enim sed gravida sollicitudin, felis odio placerat quam, ac pulvinar elit purus eget enim. Nunc vitae tortor. Proin tempus nibh sit amet nisl. Vivamus quis tortor vitae risus porta vehicula.

Fusce mauris. Vestibulum luctus nibh at lectus. Sed bibendum, nulla a faucibus semper, leo velit ultricies tellus, ac venenatis arcu wisi vel nisl. Vestibulum diam. Aliquam pellentesque, augue quis sagittis posuere, turpis lacus congue quam, in hendrerit risus eros eget felis. Maecenas eget erat in sapien mattis porttitor. Vestibulum porttitor. Nulla facilisi. Sed a turpis eu lacus commodo facilisis. Morbi fringilla, wisi in dignissim interdum, justo lectus sagittis dui, et vehicula libero dui cursus dui. Mauris tempor ligula sed lacus. Duis cursus enim ut augue. Cras ac magna. Cras nulla. Nulla egestas. Curabitur a leo. Quisque egestas wisi eget nunc. Nam feugiat lacus vel est. Curabitur consectetuer.

Suspendisse vel felis. Ut lorem lorem, interdum eu, tincidunt sit amet, laoreet vitae, arcu. Aenean faucibus pede eu ante. Praesent enim elit, rutrum at, molestie non, nonummy vel, nisl. Ut lectus eros, malesuada sit amet, fermentum eu, sodales cursus, magna. Donec eu purus. Quisque vehicula, urna sed ultricies auctor, pede lorem egestas dui, et convallis elit erat sed nulla. Donec luctus. Curabitur et nunc. Aliquam dolor odio, commodo pretium, ultricies non, pharetra in, velit. Integer arcu est, nonummy in, fermentum faucibus, egestas vel, odio. □

Коначна јама са бесконачним зидовима

Можда и најпознатији mainstream проблем из квантне, на енглеском познат као Particle in a box. Овај проблем решавамо у једној просторној димензији, али лако може да се генерализује за 3D. Крећемо од тога да нам је дата потенцијална енергија следећег облика:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x \in (0,d) \\ \infty & , \quad x \notin (0,d) \end{cases} \tag{15}$$

Примећујемо да честица једино може да се нађе у задатом домену и да енергија честице мора бити већа од нуле. Постављамо Шредингерову једначину на стандардан начин у домену где је потенцијална енергија 0.

$$\boxed{\psi'' + k\psi = 0} \tag{16}$$

Решење записујемо у тригонометријском облику

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \tag{17}$$

Због непрекидности таласне функције знамо $0 = \psi(0^-) = \psi(0^+) = \psi(0)$ тако да из једначине (17) следи да је $B = 0$. Сада посматрамо таласну функцију на другој баријери, у $x = d$.

$$\begin{aligned} & 0 = \psi(d^+) = \psi(d^-) = \psi(d) \\ \Longrightarrow\ & A\sin(kd) = 0 \\ \Longrightarrow\ & kd = n\pi, & n \in \mathbb{N} \end{aligned}$$

Последњи ред није у потпуности математички тачан (n би требало да буде елемент скупа $\mathbb{Z}$), али постоји разлог због тога што је баш овако изабран. Прво, $n = 0$ би био тривијалан случај где или не постоји јама или је енергија једнака нули. Друго, с обзиром да су k и d позитивни, следи да $n \not< 0$. Ако квадрирамо последњу релацију и изразимо енергију, добијамо[8]

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2md^2} \tag{18}$$

[8] Приметимо да разлика између суседних енергија $\Delta E_n = E_n - E_{n-1} \sim \frac{1}{d^2}$. Ако би се баријера бесконачно удаљавала, то јест, $d \to \infty$, суседне енергије су све ближе и у граничном случају добијамо континуалан спектар исти оном који смо добили у претходном проблему.

Додатно, можемо да заменимо последњу релацију у нашу таласну једначину и онда добијамо решење

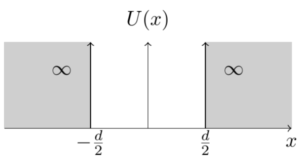
$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x \notin (0,d) \\ A\sin(\frac{n\pi}{d}x) & , \quad x \in (0,d) \end{cases} \tag{19}$$

Једино што је остало је да одредимо константу A. То одређујемо преко услова нормираности таласне функције.

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

$$A^2 \int_0^d \sin^2(\frac{n\pi}{d}x)dx = 1$$

$$A^2 \cdot \frac{d}{2} = 1 \implies A = \sqrt{\frac{2}{d}}$$



Слика 6: Бесконачна симетрична потенцијална јама

Посматрамо сада идентичан проблем, само са помереним потенцијалом тако да се јама налази у интервалу $x \in (-\frac{d}{2}, \frac{d}{2})$. Питање је сада да ли ћемо добити другачије решење и због чега би било ко нормалан променио проблем након што га је решио[9]. Одговор лежи заправо у својству које се манифестује код таласних функција када имамо симетричну потенцијалну енергију.

[9] Одговор је наравно не, решење остаје исто. Разлог за то је нешто што толико није обрађено у курсу, а то су инваријантности Шредингерове једначине под одређеним трансформацијама. У овом случају имамо само транслацију координате, али у општем случају то може да се докаже за Галилејеву трансформацију. За додатно објашњење погледати материјал на овом линку

> Ако је потенцијална енергија парна функција, онда су таласне функције или парне или непарне.

С обзиром да нам је потенцијална коначна једино на интервалу $\left(-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}\right)$, на том једино домену ћемо решавати Шредингерову једначину. Решавање се своди на исти случај као код једначине (2), тако да нам је решење у облику

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \tag{20}$$

Према услову о парности потенцијалне енергије, разматраћемо засебно парна и непарна решења.

Посматрајмо прво парна решења. Таласна функција је онда облика $\psi_p(x) = B_p\cos(kx)$. Из услова непрекидности знамо да $\psi_p\left(\frac{d}{2}\right) = 0$. Одатле следи да

$$\cos\left(k\frac{d}{2}\right) = 0$$

то јест,

$$k_p = \frac{(2p-1)\pi}{d}$$

Ако изразимо енергију преко новодобијеног k_p

$$E_p = \frac{(2p-1)^2\pi^2\hbar^2}{2md^2} \tag{21}$$

Примећујемо да ова енергија одговара енергији из једначине (18) за непарне вредности n.

Предавање - 10.3.2023.

Предавање - 22.3.2023.

Предавање - 24.3.2023.

Предавање - 29.3.2023.

Предавање - 5.4.2023.

Предавање - 7.4.2023.

Предавање - 12.4.2023.

Струја вероватноће

Услов нормираности

Услов нормираности се своди на услов да је функција f квадратно интеграбилна:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f|^2 dx < \infty$$

али тако да је на целом пољу $\mathbb{R}$ једнака 1. То произилази из Копенхагенове интерпретације квантне механике: "$\|\psi\|^2\, dx$ представља вероватноћу да се честица налази у домену dx, тако да честица се сигурно налази негде на целом простору". С обзиром да је Шредингерова једначина хомогена, решење ће нам увек бити нека функција g помножена са неком константном A тако да када одредимо интеграл од $|g|^2$, рецимо да је вредност интеграла I, потребно је само да поставимо $A = \frac{1}{\sqrt{I}}$. Прецизније, константа је одређена на овај начин до неког мултипликативног фактора $e^{i\alpha}$, где је α неки реалан број. Овај фактор се занемарује јер, иако то мења облик таласне функције са математичког аспекта, физички смисао остаје исти, јер ће при поновном нормирању да се изгуби. Због претходне дискусије увек узимамо да је A реална позитивна константа.