3. predavanje

Vladimir Dananić

17. listopada 2011.

Sadržaj

1 Valni paket

2 Vlastiti vektori i valni paket

3 Operator evolucije

4 Zadatci

Zašto se valni paket tako zove?

Valni je paket superpozicija ravnih valova takva da valna funkcija iščezava svugdje osim u jednom dijelu prostora. Riječ je o tzv. lokaliziranoj valnoj funkciji koja predočuje stanje čestice vrlo blisko pojmu klasične točkaste materijalne čestice. Klasična se čestica giba po Newtonovim zakonima klasične mehanike. Prirodno se nameće pitanje hoće li se valni paket gibati po istim zakonima kao i klasična čestica? Općeniti odgovor na to pitanje je odrječan, tj. valni se paket ne giba po zakonima klasične mehanike jednostavno zato što za njega vrijedi Schrödingerova jednadžba, koju ne možemo svesti na klasičnu jednadžbu gibanja. Promatrajmo tzv. slobodnu česticu, tj. gibanje čestice u potencijalnom polju $V(x) = 0$. Ako je $\Psi(x,t)$ valna funkcija valnoga paketa tada ona zadovaljava jednadžbu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \qquad (1)$$

Zašto se valni paket tako zove?

Da bismo potpuno riješili jednadžbu (1) moramo znati kako valna funkcija $\Psi(x, t)$ izgleda u jednom trenutku. Razlog tomu je što se u jednadžbi (1) pojavljuje samo prva derivacija valne funkcije po vremenu. Po svojemu obliku ta je jednadžba istovjetna s klasičnom jednadžbom difuzije u **imaginarnom vremenu**. Zanemarujući tu matematičku činjenicu, razmotrimo tu sličnost s više potankosti. Naprimjer, kada kapljicu tinte stavimo u posudu s vodom, tinta će se početi širiti po vodi u svim smjerovima, tj. difundirat će, sve dok koncentracija tinte po cijeloj količini vode ne postane jednakom na svim mjestima. Dakle, na početku smo imali kapljicu tinte tj. dobro definirani "valni paket" tinte, a nakon nekog vremena taj se je "valni paket" rasplinuo tj. tinta se je proširila po svoj vodi u posudi. Od lokalizirane koncentracije (kapljice) nakon određenoga vremena dobili smo delokaliziranu koncentraciju tj. homogenu koncentraciju tinte po svoj vodi. Pri tome je jasno da jednadžba difuzije nije opisivala gibanje svake pojedine molekule tinte, nego je opisivala kolektivno ponašanje sviju molekula tinte.

Zašto se valni paket tako zove?

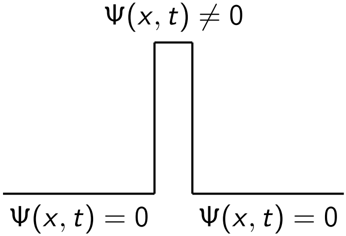
No, valna funkcija $\Psi(x,t)$ ne opisuje kolektivno gibanje mnoštva čestica, nego opisuje amplitudu vjerojatnosti nalaženja čestice u okolini određene točke u prostoru. U lokaliziranome stanju ta je vjerojatnost znatna samo u određenome dijelu prostora. Što će se dogoditi s tim i takvim stanjem ako se razvija po Schrödingerovoj jednadžbi? Po sličnosti s jednadžbom difuzije očekujemo da će se to stanje delokalizirati, tj. rasplinuti. Jednadžba (1) ima vrlo jednostavno rješenje:

$$\Psi_k(x,t) = Ae^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \tag{2}$$

gdje je A konstanta. Rješenje (2) zove se **ravni val**. Valna funkcija $\Psi_k(x,t)$ opisuje delokalizirano stanje čestice jednostavno zato što je gustoća vjerojatnosti $\rho = |\Psi_k(x,t)|^2 = |A|^2$ svugdje jednaka, tj. vjerojatnost nalaženja čestice u okolini bilo koje točke u prostoru ne ovisi o točci. Ravni val nije "spakiran" nego je raspodijeljen po cijelome prostoru.

Zašto se valni paket tako zove?

Kada upotrebljavamo izraz "valni paket" onda mislimo na "spakiranost" u prostoru.



Slika: Jedna moguća valna funkcija stanja koja opisuje valni paket.

Valni paket prikazan na slici moguć je u jednome trenutku. Kakav će njegov oblik biti u svakom drugom trenutku ovisi o tome u kakvom se potencijalnom polju valni paket giba, tj. kakva je Schrödingerova jednadžba koja opisuje odvijanje valne funkcije.

Vlastiti vektori i vlastite funkcije operatora

No, tzv. ravni val predočen valnom funkcijom (2) nema "spakirani" položaj ali ima "spakiranu" količinu gibanja, što je u suprotnosti s klasičnom predodžbom o valu kojemu ne možemo pripisati količinu gibanja nego samo tok energije i količine gibanja. Naime, zato što je količina gibanja operator $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, njegovim djelovanjem na funkciju $\Psi_k(x,t)$ dobivamo:

$$p\Psi_k(x,t) = -i\hbar\frac{\partial\Psi_k(x,t)}{\partial x} = \hbar k\Psi_k(x,t) \tag{3}$$

Kažemo da je valna funkcija **vlastita funkcija, ili vlastiti vektor** operatora količine gibanja, a valni je vektor k, pomnožen konstantom $\hbar$, **vlastita vrijednost** operatora količine gibanja. Vlastite funkcije $\Psi_k(x,t)$ tvore bazu Hilbertovoga prostora koja je vlastita baza operatora količine gibanja. Ta je baza "numerirana" vlastitim vrijednostima k, koji je kontinuirana veličina i koji ima smisao valnoga vektora.

Vlastiti vektori i vlastite funkcije operatora

Schrödingerova je jednadžba (1) linearna, pa za njezina rješenja vrijedi načelo linearne superpozicije, tj. zbroj dvaju ili više rješenja opet je rješenje iste jednadžbe. No, rješenja se razlikuju po valnome vektoru k. Zbrajajući takva rješenja zbrajamo, odnosno integriramo, po valnome vektoru k, pri čemu amplituda određenoga ravnoga vala smije ovisiti o valnome vektoru. Međutim, u takvom lineanom spoju gubimo svojstvo valne funkcije kao vlastite funkcije operatora količine gibanja. **Zbroj dvaju vlastitih vektora s različitim vlastitim vrijednostima više nije vlastiti vektor.** Dakle, integriranjem po k prelazimo u drugu i drugačiju bazu u Hilbertovu prostoru koja više nije vlastita baza operatora količine gibanja. Možemo reći da time gubimo "spakiranost" količine gibanja. Naravno da je to posljedica Heisenbergovih relacija neodređenosti. Pitanje je možemo li takvim postupkom postići prostornu "spakiranost" valne funkcije? Odgovor je potvrdan. Ali, što je onda s količinom gibanja? Ona više nije "oštro spakirana" kao što to opisuje valna funkcija (2), nego ima "razmazanu" količinu gibanja u skladu s relacijama neodređenosti.

Vlastiti vektori i vlastite funkcije operatora

Opće rješenje Schrödingerove jednadžbe (1) ima sljedeći oblik:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} dk \tag{4}$$

Pri tome možemo zadati proizvoljni oblik valne funkcije u jednome trenutku, recimo $t = 0$, pa imamo:

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ikx} dk \tag{5}$$

Vidimo da su amplitude $A(k)$ zapravo **Fourierov transformat** funkcije $\Psi(x,0)$. Jednakost (5) možemo invertirati, pa dobivamo:

$$A(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx \tag{6}$$

Opći valni paket slobodne čestice

S pomoću jednadžbi (4) i (6) dobivamo rješenje Schrödingerove jednadžbe (1) u sljedećem obliku:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk \int_{-\infty}^{+\infty} dy\ e^{i\left(k(x-y)-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}\Psi(y,0) \tag{7}$$

Ako zadamo valni paket u trenutku $t = 0$, onda nam jednadžba (7) opisuje odvijanje toga paketa za sva vremena. Jednadžbu (7) možemo napisati u razvidnijem obliku:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} U(x-y;t,0)\Psi(y,0)dy \tag{8}$$

gdje je

$$U(x-y;t,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left(k(x-y)-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \tag{9}$$

Dakle, stanje $\Psi(x,t)$ dobijemo djelovanjem operatora U na stanje zadano u jednom trenutku $\Psi(x,0)$. Operator U zove se **operator evolucije**.

Opći valni paket slobodne čestice

Od mnoštva valova možemo Fourierovom transformacijom složiti valni paket proizvoljnoga oblika i s pomoću operatora U, definiranoga jednadžbama (8) i (9), možemo vidjeti vremensko odvijanje, tj. gibanje, toga valnoga paketa. Integracijom po valnomu vektoru k operator U dobiva konkretniji oblik:

$$U(x-y;t,0)=\sqrt{\frac{m\pi}{i\hbar t}}e^{i\frac{m(x-y)^2}{\hbar t}} \tag{10}$$

Ovaj nam izraz za operator evolucije valnoga paketa slobodne čestice otkriva "difuziju u imaginarnom vremenu". Naime, argument eksponencijlne funkcije u jednadžbi (10) ima jednu te istu vrijednost za sve udaljenosti $x-y$ koje su razmjerne kvadratnome korijenu vremena t. To znači da se argument oscilatorne funkcije ne mijenja, tj. stacionaran je, ako vrijedi $(x-y)^2 \propto t$. No, takav odnos između prostornih koordinata i vremena svojstven je procesu difuzije. Trunčica neke tvari stavljene u neku tekućinu, zbog uzastopnih sudara s molekulama tekućine, pomicat će se

Opći valni paket slobodne čestice

nasumično od svog početnog položaja tako da joj udaljenost od njega raste s kvadratnim korijenom iz vremena, a s prvom potencijom od vremena, što bi bilo karakteristično za gibanje slobodne čestice. Zbog te "difuzije", kvantno će se stanje slobodne čestice "rasplinuti", tj. valni će se paket širiti bez obzira na to kakav je bio njegov početni oblik. To vrijedi za slobodnu česticu. A što vrijedi za neslobodnu, tj. za česticu u vezanomu stanju? Za vezano stanje karakteristično je to da je valna funkcija **stacionarnoga stanja** lokalizirana. Gustoća vjerojatnosti za stacionarno stanje ne ovisi o vremenu. Prema tome, lokaliziranost valne funkcije ostat će nepromjenjenom tijekom vremena. Naprimjer, elektron u vodikovu atomu u stacionarnome stanju ima lokaliziranu valnu funkciju oko atomske jezgre. Prosječna brzina, odnosno količina gibanja, elektrona mora biti takva da ne udaljava elektron iz atoma. No, valni se paket može sastaviti od više stacionarnih stanja i tada će gustoća vjerojatnosti biti ovisna o vremenu.

Zadatci

1. Dokažite da vrijedi jednakost
$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = 2\pi\delta(x). \tag{11}$$
2. Elektron je u početnom trenutku bio u stanju opisanom Gaussovim valnim paketom širine $a = 1nm$. Prosječna brzina elektrona u tom stanju iznosi $v = 10^5 ms^{-1}$. Procijenite vrijeme u kojem za elektron još uvijek možemo reći da je čestica, tj. da je dobro "spakiran".
3. Napišite operator evolucije za općeniti operator hamiltonijana H, koji ne ovisi eksplicitno o vremenu. Pokažite da taj operator nije hermitski i da je unitaran, tj. da vrijedi $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$. Što znači svojstvo unitarnosti operatora U?

Zadatci

4. Prikažite operator količine gibanja u obliku integralnoga operatora tj.

$$p\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, y)\Psi(y)dy$$

gdje se $K(x, y)$ zove **jezgrom operatora**. Nađite $K(x, y)$ za operator količine gibanja.

5. Za valnu funkciju vezanoga stanja karakteristično je svojstvo lokaliziranosti. Izračunajte amplitude $A(k)$, definirane jednadžbom (5), za elektron u prvom pobuđenom stanju unutar jednodimenzijske neprobojne potencijalne jame širine $a = 1nm$.