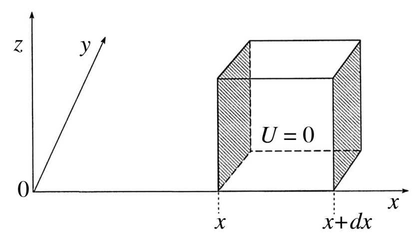
$$\langle(\Omega-\langle\Omega\rangle)^2\rangle = \frac{\int \psi^*(\hat{\Omega}-\langle\Omega\rangle)^2\psi dV}{\int \psi^*\psi dV}. \tag{8.4.31}$$

8.4.3 Struja gustine verovatnoće

DODATAK 8.4

D-8.4.3 Jednačina kontinuiteta



Slika D-8.4.1 Uz fluks gustine verovatnoće.

Pokazaćemo u tekstu koji sledi da funkcija gustine verovatnoće zadovoljava neku vrstu jednačine kontinuiteta koja nam je poznata iz mehanike fluida. Podsetićemo se sada u pojednostavljenom vidu o čemu je tu reč.
Uzmimo zapreminu u obliku kocke. Neka su ivice kocke postavljene duž koordinantih osa, *x, y* i *z*, Slika D-8.4.1 Pustimo da u ovu zapreminu utiče tečnost i to paralelno *x*-osi. Gustinu struje (fluksa) tečnosti označićemo sa:

$$\vec{s}(x, y, z) = s_x(x, y, z)\vec{i} .$$

Ako je kocka dovoljno mala, tada $s_x(x, y, z)$ može da se smatra stalnim duž cele stranice kocke. Količina tečnosti koja utiče kroz levu stranu kocke, u jedinici vremena je:

$$s_x(x, y, z)\ dy\ dz. \tag{D-8.4.24}$$

Količina tečnosti koja ističe kroz desnu stranu kocke je:

$$-s_x(x + dx, y, z)\ dy\ dz \tag{D-8.4.25}$$

ili približno:

$$-s_x(x + dx,y,z)\ dy\ dz = -s_x(x,y,z)\ dy\ dz - \frac{\partial s_x(x,y,z)}{\partial x}dx\ dy\ dz. \tag{D-8.4.25a}$$

Promena količine tečnosti unutar zapremine jednaka je algebarskom zbiru izraza (D-8.4.24) i (D-8.4.25a):

$$s_x(x)\ dy\ dz - s_x(x)\ dy\ dz - \frac{\partial s_x(x,y,z)}{\partial x}dx\ dy\ dz = -\frac{\partial s_x(x, y, z)}{\partial x}dx\ dy\ dz. \tag{D-8.4.26}$$

Ako bismo posmatrali proticanje tečnosti u pravcu y-ose $[\vec{s}(x, y, z) = s_y(x, y, z)\vec{j}$ odnosno z-ose $\vec{s}(x, y, z) = s_z(x, y, z)\vec{k}]$ promena količine tečnosti iznosila bi:

$-\partial s_y/\partial$ *dx dy dz,* odnosno $-\partial s_z/\partial z$, *dx dy dz,* saglasno izrazu (D-8.4.26). U opštem slučaju gustinu struje tečnosti koja protiče u proizvoljnom pravcu prikazaćemo vektorom: $\vec{s}(x, y, z) = s_x(x, y, z)\vec{i} + s_y(x, y, z)\vec{j} + s_z(x, y, z)\vec{k}$, pa bi u tom slučaju promena količine tečnosti unutar zapremine iznosila $-\nabla \cdot \vec{s}$, gde je ∇ vektorski operator:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}\cdot$$

Ako se ukupna količina tečnosti održava (a to je slučaj kada unutar zapremine nema ni izvora ni ponora), promena količine tečnosti koja nastaje, jednačina (D-8.4.26) mora da se nadoknadi promenom gustine ρ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dxdydz \tag{D-8.4.27}$$

što ćemo napisati na sledeći način:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial s_x}{\partial x} = 0 \tag{D-8.4.28}$$

za slučaj prostiranja fluida u pravu x-ose i:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{s} = 0 \tag{D-8.4.28a}$$

u opštem slučaju. Jednačine (D-8.4.28) i (D-8.4.28a) predstavljaju jednačine kontinuiteta.

Pomoću funkcije gustine verovatnoće $\Psi^*\Psi$ može da se odredi verovatnoća nalaženja čestice u nekoj zapremini *V*. Nekada nas, međutim, zanima broj čestica koje prolaze kroz neku površinu u jedinici vremena ili fluks čestica. Naslućujemo da bi određena kombinacija funkcija gustine verovatnoće mogla da se poveže i sa fluksom čestica. U proračunu koji je izveo Maks Born može da se pokaže da funkcija $\Psi\Psi^*$ ostaje stalna i da eventualni višak $\Psi\Psi^*$ koji nastaje u nekom trenutku i na nekom mestu mora da se nadoknadi manjkom $\Psi\Psi^*$ na nekom drugom mestu. Pokazaćemo sada da funkcija gustine verovatnoće zadovoljava jednačinu po obliku analognu jednačini kontinuiteta [videti jednačinu (D-8.4.28) i (D-8.4.28a)] koja nam je poznata iz mehanike fluida.

Izvešćemo sada ovu jednačinu. Napisaćemo prvo vremenski zavisnu Šredingerovu jednačinu (8.4.18):

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi \tag{8.4.32}$$

i njoj odgovarajuću jednačinu čije je rešenje konjugovano kompleksna funkcija Ψ^* :

$$+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + U\Psi^*\cdot \tag{8.4.33}$$

Prvu jednačinu (8.4.32) ćemo pomnožiti sa $-\Psi^*$, a drugu (8.4.33) sa Ψ, a zatim ih sabrati:

$$+\frac{\hbar}{i}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}(\Psi^*\Delta\Psi-\Psi\Delta\Psi^*)$$

ili u jednodimenzionom slučaju:

$$+\frac{\hbar}{i}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right)\cdot$$

Prethodni izraz možemo da napišemo i u obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)\right] = 0\cdot \tag{8.4.34}$$

Sada možemo da uporedimo jednačinu (8.4.34) sa jednačinom kontinuiteta (D-8.4.28). Jednačina (8.4.34) ima istu strukturu kao hidrodinamička jednačina, s tim što ulogu gustine ρ ima funkcija $\Psi^*\Psi$ dok izraz:

$$S = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) \tag{8.4.35}$$

predstavlja **struju gustine** verovatnoće. Ovom veličinom označavamo verovatnoću da čestica u jednoj sekundi prođe kroz površinu u smeru pozitivne normale na tu površinu. U opštijem, trodimenzionom slučaju, jednačina održanja (8.4.34) može da se napiše i u sledećem obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)+\nabla\cdot\vec{S} = 0 \tag{8.4.36}$$

pri čemu bi sada $\vec{S}$ predstavljao vektor struje gustine verovatnoće:

$$\vec{S} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\cdot \tag{8.4.37}$$

Ako se izraz (8.4.36) integrali po nekoj zapremini *V*, dobija se:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V\Psi^*\Psi\ dV = -\int_V\nabla\vec{S}\ dV = -\oint_A\vec{S}\cdot d\vec{A} \tag{8.4.38}$$

gde je $d\vec{A}$ površinski element koji je jednak veličini površine dA, a usmeren je isto kao i pozitivna normala na tu površinu. Dakle, integral vektora $\vec{S}$ po površini A daje verovatnoću prolaska čestice kroz tu površinu u jedinici vremena. Desni deo jednačine (8.4.38) dobijen je primenom Stoksove (George Stokes, 1819-1903, engleski fizičar i matematičar) jednačine pomoću koje trostruki integral po zapremini *V* može da se zameni površinskim integralom po zatvorenoj površini koja obavija zapreminu *V*.

Integral jednačine (8.4.34) između koordinata x_1 i x_2, glasi:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\int_{x_1}^{x_2}(\Psi^*\Psi)dx\right] = \frac{i\hbar}{2m}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)\right]dx = S(x_1)-S(x_2)\cdot \quad (8.4.39)$$

Kako smo formalno pokazali ranije, jednačina (8.1.29), kretanje čestice u pravcu *x*-ose sa impulsom *p* (takođe u pravcu *x*-ose) i amplitudom Ψ_0, može da se prikaže De Broljijevim talasom:

$$\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}.$$

Napišimo sada konjugovano kompleksnu funkciju ovoj funkciji:

$$\Psi^* = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et-px)}.$$

Izračunajmo zatim struju gustine verovatnoće:

$$\Psi^*\Psi = \Psi_0^2; \quad \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}p\Psi^*\Psi; \quad \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} = -\frac{i}{\hbar}p\Psi^*\Psi \Rightarrow$$

$$S = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) = \frac{p}{m}\Psi_0^2 = \upsilon\Psi_0^2\cdot \quad (8.4.40)$$

Jednačinom (8.4.40) pokazali smo to da struja gustine verovatnoće ili verovatnoća da čestica prođe kroz neku površinu zavisi i od brzine kretanja čestice, što se moglo i očekivati. U sledećem poglavlju, pri određivanju koeficijenata propustljivosti različitih barijera vratićemo se ponovo na izraz (8.4.39) odnosno na struju funkcije gustine verovatnoće.

8.5 STACIONARNA ŠREDINGEROVA JEDNAČINA

DODATAK 8.5

D-8.5.1 Dirakova delta funkcija

δ (delta) funkciju (Dodatak D-8.2), uveo je P. Dirak (Paul Adrien Maurice Dirac, 1902-1984, bitno doprineo razvoju kvantne mehanike i kvantne elektrodinamike, podelio sa E. Šredingerom Nobelovu nagradu za fiziku 1933). Delta (δ) funkcija definiše se kao:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases} \tag{D-8.5.1}$$

i:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1. \tag{D-8.5.2}$$

Jedno od najvažnijih svojstava δ funkcije, koje, naravno, matematički može da se dokaže, je:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)dx = f(0). \tag{D-8.5.3}$$

Prethodni izraz može da se napiše u obliku:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)f(x)dx = f(a) \tag{D-8.5.4}$$

Podsetimo se na to da se svaka funkcija $f(x)$ može razviti u Furijeov red:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k)e^{ikx}dk \tag{D-8.5.5}$$

dok se koeficijenti razvoja dobijaju iz jednačine:

$$a(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-ikx}dx \tag{D-8.5.6}$$

δ-funkcija, takođe, može da se razvije u Furijeov red:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}dk \tag{D-8.5.7}$$

a koeficijent *a(k)* je:

$$a(k) = \frac{1}{2\pi}. \tag{D-8.5.8}$$

8.5.1 Mlaz elektrona

Posmatrajmo mlaz elektrona čija je kinetička energija E i koji se kreće brzinom $\upsilon(=\sqrt{2E/m})$ u pravcu ose x. U ovom slučaju potencijalna energija U čestice (elektrona) jednaka je nuli, pa stacionarna Šredingerova jednačina glasi:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0\cdot \tag{8.5.1}$$

Jednačina (8.5.1) je standardna diferencijalna jednačina drugog reda čije rešenje tražimo u obliku $\psi = e^{rx}$. Zamenjivanjem pretpostavljenog rešenja i njegovog drugog izvoda u (8.5.1), dobija se karakteristična kvadratna jednačina:

$$r^2+\frac{2m}{\hbar^2}E = 0$$

koja ima dva kompleksna korena:

$$r_{1/2} = \pm\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE} = \pm ik; \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot$$

Pošto se elektron slobodno kreće, sa impulsom $\vec{p}$ u pravcu x-ose, njegova energija je kinetička, pa važi:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}\cdot$$

Impuls elektrona p u navedenoj jednačini zamenili smo (prema De Broljijevoj jednačini) količnikom h/λ gde je λ De Broljijeva talasna dužina pridružena elektronu koji se kreće brzinom υ. Sada rešenja karakteristične jednačine dobijaju oblik:

$$r_{1/2} = \pm\frac{2\pi i}{\lambda} = \pm\frac{i}{\hbar}p$$

pa diferencijalna jednačina (8.5.1) ima dva rešenja, ψ_1 i ψ_2:

$$\psi_1 = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x} = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} = Ae^{\frac{2\pi i}{\lambda}x}; \qquad \psi_2 = Be^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x} = Be^{-\frac{i}{\hbar}px} = Be^{\frac{-2\pi i}{\lambda}x}. \tag{8.5.2}$$

A i B su konstante normiranja. Funkcije ψ_1 i ψ_2 su neprekidne i konačne u celom opsegu za bilo koju, pozitivnu vrednost energije E. U ovom slučaju spektar svojstvenih vrednosti energije je kontinualan. Kako postoje dva rešenja Šredingerove jednačine za istu vrednost energije, stanje može da se smatra i dvostruko degenerisanim.

Da bismo razumeli poreklo ove degeneracije, napisaćemo operator impulsa, jednačina (8.4.26) i odredićemo rezultat njegovog delovanja na funkcije ψ_1 i ψ_2:

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}. \tag{8.5.3}$$

U jednačinama koje slede umesto p_x pisaćemo samo p, podrazumevajući da je reč o impulsu čestice koja se kreće u pravcu x-ose. Primenimo prvo operator impulsa na funkciju ψ_1:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(Ae^{\frac{i}{\hbar}px}\right) = p\psi_1 \tag{8.5.4}$$

a zatim na talas ψ_2:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_2 = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(Be^{-\frac{i}{\hbar}px}\right) = -p\psi_2. \tag{8.5.5}$$

Vidimo da jednačine (8.5.4) i (8.5.5) imaju oblik jednačine svojstvenih vrednosti jer se dejstvom operatora na funkciju dobija ista ta funkcija pomnožena nekom konstantom. Možemo, takođe, da zaključimo da su svojstvene funkcije operatora energije istovremeno i svojstvene funkcije operatora impulsa, ali tako da svojstvenoj funkciji ψ_1 odgovara svojstvena vrednost $+p$, a svojstvenoj funkciji ψ_2 odgovara svojstvena vrednost $-p$. To znači da dve talasne funkcije ψ_1 i ψ_2 odgovaraju stanjima čestice istog intenziteta impulsa ali suprotnog smera kretanja, Slika 8.5.1. To dalje znači da se pomoću znaka u eksponentu talasne funkcije određuje smer kretanja čestice duž određene ose.

Posmatrajmo sada funkciju ψ koja je linearna kombinacija funkcija ψ_1 i ψ_2:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} + Be^{-\frac{i}{\hbar}px} \tag{8.5.6}$$

sa ciljem da utvrdimo da li je i funkcija ψ svojstvena funkcija operatora impulsa. Rešenje $\psi(x)$, jednačina (8.5.6.) uz pomoć Ojlerove formule:

$$e^{\pm i\rho} = \cos\rho \pm i\sin\rho$$

može da se napiše u trigonometrijskom obliku:

$$\psi(x) = C\cos kx + D\sin kx; \qquad k = \frac{i}{\hbar}p \tag{8.5.7}$$

pri čemu su konsantne C i D povezane sa A i B iz jednačine (8.5.1) sledećim vezama:

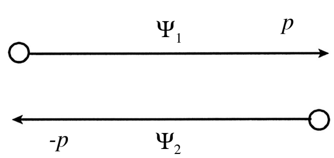
$$C = A + B; \qquad D = i(A - B).$$

Neka je D u jednačini (8.5.8) jednako 0, što znači da je $\psi = C\cos kx$. Ispitaćemo sada dejstvo operatora impulsa na ovu funkciju:

$$\hat{p}\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(C\cos kx) = -\frac{k\hbar}{i}C\sin kx. \tag{8.5.8}$$

Poslednja jednačina nema oblik jednačine svojstvenih vrednosti jer se dejstvom operatora **ne** dobija ista ta funkcija (pomnožena nekim činiocem), pa ovakva funkcija nije svojstvena funkcija operatora impulsa, te, prema tome, ne predstavlja određeno stanje čestice sa određenim impulsom p. Pokušajmo da rastumačimo i zašto. Napisaćemo funkciju cos kx kao zbir dva člana:

$$\psi = C\cos kx = \frac{1}{2}Ce^{ikx} + \frac{1}{2}Ce^{-ikx}. \tag{8.5.9}$$



Slika 8.5.1 Talasne funkcije kod linearnog kretanja.

Funkcija ψ izražena jednačinom (8.5.9) predstavlja kombinaciju ili bolje rečeno slaganje (superpoziciju) dva stanja. Jedno stanje odgovara kretanju čestice udesno, a drugo predstavlja kretanje čestice ulevo.

Podvucimo da se kod funkcija sa kontinualnim spektrom svojstvenih vrednosti kao u ovom slučaju dobija:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \cdot \psi^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{\frac{i}{\hbar}p} \cdot Ae^{-\frac{i}{\hbar}px} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 dx \to \infty \tag{8.5.10}$$

zbog čega talasna funkcija mora da se normira na poseban način. U ovakvim slučajevima obično se vrši normiranje na tzv. δ-funkciju. Može da se zapazi da integral proizvoda talasnih funkcija ima oblik δ-funkcije razvijene u Furijeov red:

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p)x} dx \propto \delta(p-p) \propto \delta(0). \tag{8.5.11}$$

Razvoj δ funkcije razvijene u Furijeov red ima oblik:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \tag{8.5.12}$$

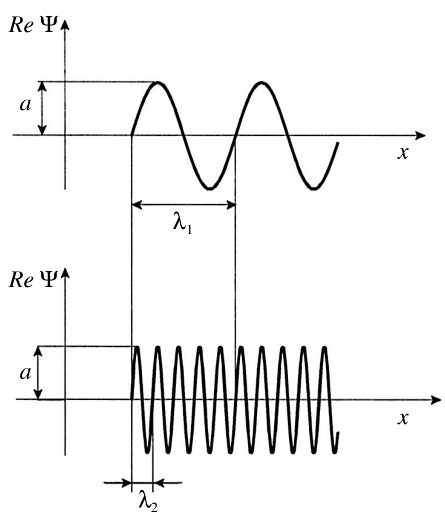
pa se upoređivanjem jednačina (8.5.11) i (8.5.12) dolazi do vrednosti konstante normiranja A:

$$A^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} = \frac{1}{h} \tag{8.5.13}$$

a talasna funkcija (odnosno svojstvena funkcija operatora impulsa) ψ konačno ima oblik:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{h}} e^{\frac{i}{\hbar}px} . \tag{8.5.14}$$

Na Slici 8.5.2 prikazana je zavisnost realnog dela funkcije ψ od koordinate x, jednačina (8.5.2). Period ove oscilatorne funkcije jednak je De Broljijevoj talasnoj dužini koja je pridružena elektronu, $\lambda = (h/p)$. Na Slici 8.5.2 prikazana su dva slučaja: u prvom, elektroni se kreću sa impulsom p, a u drugom slučaju njihov impuls je pet puta veći u odnosu na prethodni.



Slika 8.5.2 Realni deo rešenja Šredingerove jednačine za mlaz elektrona koji se slobodno kreće duž x-ose: (gore) mlaz sa impulsom p; (dole) mlaz sa impulsom $5p$.

8.5.2 Prolaz čestice kroz potencijalnu barijeru: energija čestice *E* je veća od potencijalne energije barijere *U*, *E* > *U*

Posmatrajmo česticu, na primer, elektron koji, krećući se u pozitivnom smeru x-ose kroz oblast I, nailazi u tački $x = 0$ na oblast II, Slika 8.5.3. U oblasti I ($x \leq 0$) potencijalna energija U čestice jednaka je nuli, pa je ukupna energija E čestice jednaka njenoj kinetičkoj energiji. U okolini tačke $x = 0$, pod dejstvom polja sile, potencijalna energija (ili potencijal) čestice se menja skokovito do neke stalne vred-