- Квантна механика -

- Квантна механика се заснива на одређеним постулатима. Постулати се не изводе већ се постављају на основу широког спектра експерименталних опажања и теоријских поставки.

1) Опис стања система - стање физичког система је у неком фиксном тренутку t_0 одређено таласном функцијом $\Psi(x, y, z, t_0)$

2) Опис физичких величина - свака физичка величина A која се може мерити описује се неким ермитским оператором $\hat{A}$ који делује на таласне функције.

6) Временска еволуција система - Временска еволуција ~~вектора стања~~ таласне функције $\Psi(t)$ одређена је Шредингеровом једначином

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,y,z,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x,y,z,t) + V(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,y,z,t) = \hat{H}(x,y,z,t)\,\Psi(x,y,z,t)$$

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

- Таласна функција

↳ решење Шредингерове једначине

↳ садржи све податке о систему, и на основу ње могу се израчунати све величине за дати систем које у принцип могу да се мере

↳ познавање Ψ у почетном тренутку и поље сила $[V(x,y,z,t)]$ и решавањем временски зависне Ш.Ј. може се одредити таласна функција, односно стање система у било ком тренутку.

↳ комплексна функција и сама нема физичко значење

– Борново тумачење таласне функције

- Макс Борн – Нобелова награда 1954. за истраживања у квантној механици и нарочито за њену интерпретацију

- статистичко тумачење таласне функције – класична и ~~квантна~~ квантна

- Оригинално Шредингерово тумачење: Ψ се заснива на претпоставци о стварности постојања таласа материје – честица је „размазана" у простору, а функција $\Psi(x,y,z,t)$ је повезана са густином „електронског облака" у тачки (x,y,z) у тренутку t.
  - ↳ овој густини се придружује $\Psi^*\Psi$ који је реална функција.
  - ↳ тешкоће при описивању вишечестичних система.
  - ↳ немогуће је придружити стварне таласе материје.

- Борн 1926.: производ $\Psi^*\Psi$ је функција густине вероватноће – постулат.

$\rho V = m$

$$\Psi^*_{(x,t)}\Psi(x,t)\,dx$$

$$\underbrace{\Psi^*_{(x,y,z)}\Psi_{(x,y,z)}}_{\text{вероватноћа по јединичној запремини}}\,dx\,dy\,dz$$

→ густина вероватноће → може се израчунати у тачки

↓ множење запремином елемента простора

вероватноћа

↓ за коначну запремину V – сабирамо вероватноће за елементарне запремине

$$\boxed{P_V = \int_V \Psi^*\Psi\,dx\,dy\,dz} \neq 1$$ у општем случају за цео простор

Ψ и $N\Psi$ подједнако добра решења

$$P_V = N^2 \iiint_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi\,dx\,dy\,dz = 1$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int_V \psi^* \psi \, dx\, dy\, dz}}$$ – услов нормирања таласне функције

↓

константа нормирања

- таласна функција мора бити
  - једнозначна
  - коначна у коначном делу простора
  - непрекидна и диференцијабилна
  - да има непрекидне прве изводе

вишезначна, неограничена, функција са преломом

Оператори

$\hat{A}$ „^" – симбол за примену одређене математичке операције на неку функцију $\hat{A} f = g$

- мултипликативни оператори (x, y, z, C)
- диференцијални оператори $\left(\frac{d}{dx}, \frac{d^2}{dx^2}, \Delta = \nabla^2\right)$

$$\frac{d}{dx} \sin x = \cos x$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

$* \quad \frac{d}{dx} x \sin x = \sin x + x \cos x$

$x \frac{d}{dx} \sin x = x \cos x$

↓

не комутирају

Својствени проблем оператора

$$\hat{A} f = a f$$

→ својствена функција

↓ својствена вредност

$$\frac{d^2}{dx^2}\sin x = -1 \sin x$$

$$-i\frac{d}{dx} e^{ikx} = k\, e^{ikx}$$

– Координатна репрезентација

- Оператори положаја: $x \to \hat{x}$, $y \to \hat{y}$, $z \to \hat{z}$

- Оператори компонената импулса:

$$p_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$
$$p_y \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$$
$$p_z \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$
$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$$

- Оператор укупне енергије

Хамилтонијан:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}_{\Delta} + \hat{V}$$

- Оператор момента импулса:

$$\vec{l} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \longrightarrow l_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$\vdots$

- Шредингерова једначина

Временски зависна Шредингерова једначина:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \hat{V}\right]\psi$$

$$\hat{V} = \hat{V}(x,y,z,t) \qquad \psi = \psi(x,y,z,t)$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}$$

$$\hat{V} \neq f(t) \qquad \hat{V} = \hat{V}(x,y,z)$$

$$\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\, f(t)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi \frac{\partial f}{\partial t} \qquad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = f \frac{\partial \psi}{\partial t^2} \quad \dots$$

$$i\hbar\, \psi \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} f \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}\right) + V\psi f \quad / \psi f$$

$$i\hbar \frac{1}{f}\frac{df}{dt} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi^2}{\partial y^2} + \frac{\partial \psi^2}{\partial z^2}\right) + V$$

$$i\hbar \frac{1}{f}\frac{df}{dt} = E \Rightarrow f = C e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\int \frac{df}{f} = \frac{E}{i\hbar}\int \left(-\frac{iE}{\hbar}\right)$$

$$\ln f = -\frac{iE}{\hbar} t$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial \psi}{\partial z^2}\right) + V = E$$

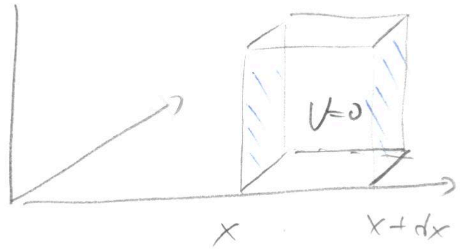
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E$$

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi = E\psi} \rightarrow \text{Стационарна Шредингерова једначина}$$

$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$$

- Струја густине вероватноће

Једначина континуитета



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{S} = 0$$

густина ~~...~~ струје – флукс

$\vec{S}(x,y,z)$

- број честица које пролазе кроз неку површину у јединици времена (флукс честица)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi \qquad /\psi^*$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + U\psi^* \qquad /\cdot\psi$$

1Д случај

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)\right] = 0$$

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

↳ струја густине вероватноће.

вероватноћа да честица у 1s прође кроз површину x смеру позитивне нормале на ту површину.

3Д: $\vec{S} = -\frac{i\hbar}{m}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$

- Хајзенбергова релација неодређености -

макросвет: положај и брзина сваке честице у t.
↓ могу се добити мерењем

истовремено мерење

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sigma$

↓

стандардна девијација

‖

UNCERTAINTY

неодређеност несигурност

мало σ вредности блиске (средњој)

тело 1g $\Delta x = 10^{-4}\,cm$

$$\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m} = \frac{h}{4\pi m \Delta x} = 5.2 \cdot 10^{-26}\,m/s$$

електрон у атому

$\Delta x = 10^{-11}\,m \qquad m = 9.1 \cdot 10^{-31}\,kg$

$\Delta v_x = 6.1 \cdot 10^{6}\,\frac{m}{s} \qquad E = 10\,eV \Rightarrow v = 1.87 \cdot 10^{6}\,\frac{m}{s}$