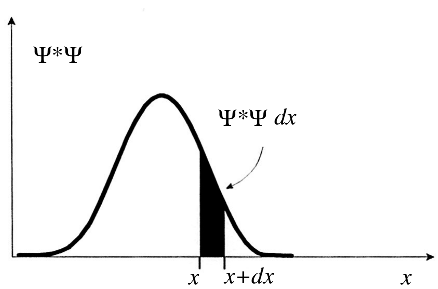
8.4.1 Bornovo tumačenje talasne funkcije

Statističko tumačenje talasne funkcije Ψ predložio je Maks Born (Max Born, 1882–1970, za istraživanja u kvantnoj mehanici a naročito za njenu intepretaciju dobija 1954. godine Nobelovu nagradu za fiziku). Potrebno je, međutim, istaći bitnu razliku između statističkog koncepta u klasičnoj i kvantnoj mehanici. U klasičnoj fizici statistički pristup se koristi iz praktičnih razloga – za sisteme s ogromnim brojem čestica nemoguće je poznavati početne koordinate i impulse svih čestica. U kvantnoj mehanici mora se pribeći statističkim predstavama jer postoji ograničenje mogućnosti poznavanja početnih koordinata i momenata koje je sadržano u relaciji neodređenosti. Kvantna mehanika je suštinski statistička disciplina – ona u principu daje iskaze o verovatnoćama i kada je reč o sistemima sa malim brojem čestica.

Originalno Šredingerovo tumačenje talasne funkcije, Ψ, zasniva se na pretpostavci o stvarnosti postojanja talasa materije. Čestica, na primer, elektron, „razmazana" je u prostoru, a funkcija Ψ (x, y, z, t) je povezana sa gustinom „elektronskog oblaka" u tački sa koordinatama (x, y, z) i u trenutku t. Sama talasna funkcija, pošto je najčešće kompleksna, nije pogodna za opisivanje funkcije gustine (koja mora biti realna). Umesto talasne funkcije gustini se pridružuje proizvod $\Psi\Psi^*$ koji je realna funkcija. Međutim, ovakvo tumačenje talasne funkcije, nailazi na teškoće pri opisivanju višečestičnih sistema. Na primer, talasna funkcija za dve čestice određena je u šestodimenzionom prostoru i nemoguće joj je pridružiti stvarne talase materije u smislu originalne Šredingerove ideje.

Born je 1926. godine predložio da se proizvod $\Psi\Psi^*$ proglasi **funkcijom gustine verovatnoće** i ovakvo tumačenje talasne funkcje predstavlja jedan od **postulata** kvantne mehanike. Tako je u jednodimenzionom slučaju, Slika 8.4.1, verovatnoća nalaženja čestice u intervalu $(x, x + dx)$, u trenutku t određena je proizvodom:

$$\Psi^*(x,t)\ \Psi\ (x,t)dx.$$



Slika 8.4.1 Bornovo tumačenje talasne funkcije u jednoj dimenziji. Proizvod $\Psi^*\ \Psi dx$ predstavlja verovatnoću da se čestica nađe u intervalu dx u okolini tačke sa koordinatom x.

Slično, u trodimenzionom slučaju, verovatnoća nalaženja čestice u elementu zapremine $dx\ dy\ dz$ data je proizvodom:

$$\Psi^*(x,y,z)\ \Psi\ (x,y,z)\ dx\ dy\ dz. \tag{8.4.20}$$

Proizvod $\Psi^*\Psi$ označava verovatnoću po jediničnoj zapremini (u jednodimenzionom slučaju po jediničnoj dužini), dakle, predstavlja gustinu verovatnoće; ima dimenzije recipročne zapremine (dužine). Verovatnoća nalaženja čestice u elementu zapremine $dx\ dy\ dz$ dobija se kada se $\Psi^*\Psi$ pomnoži zapreminom elementa. U končanoj zapremini, V, verovatnoću nalaženja čestice nalazimo sabiranjem verovatnoća za elemenarne zapremine, tj., integraljenjem izraza (8.4.20) po celoj zapremini V:

$$p_V = N^2 \int_V \Psi^* \Psi dx\ dy\ dz \tag{8.4.21a}$$

gde je N konstanta normiranja. Problem normiranja se javlja otuda što je $N\Psi$ jednako dobro rešenje Šredingerove jednačine kao i samo Ψ. Međutim, konstantu normiranja lako izračunavamo na osnovu toga što znamo da nalaženju čestice bilo gde u prostoru, odgovara siguran događaj, koji po definiciji ima jediničnu verovatnoću:

$$N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx\ dy\ dz = 1 \tag{8.4.21b}$$

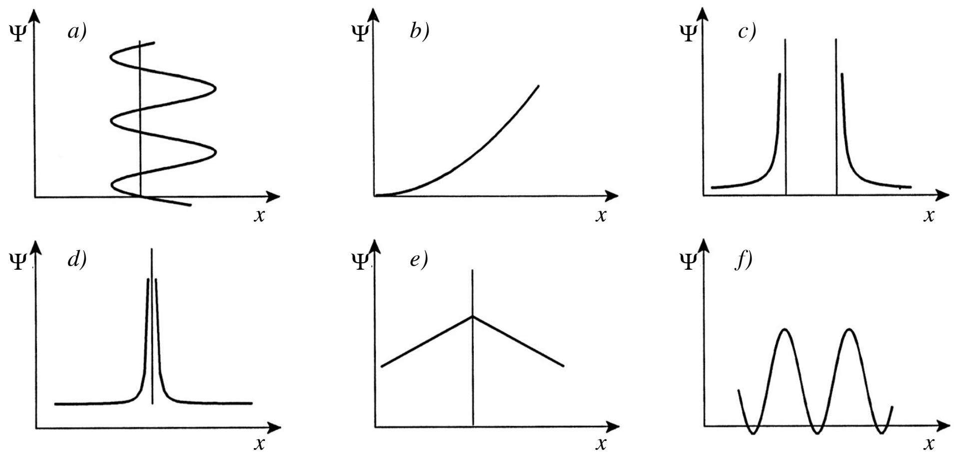
odakle rešavanjem po N nalazimo:

$$N = \frac{1}{\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx\ dy\ dz}}. \tag{8.4.21c}$$

Jednačina (8.4.21b) označava **uslov normiranja talasne funkcije**.

Bornovim tumačenjem koje je izraženo jednačinom (8.4.21a) posredno se postavljaju zahtevi o matematičkoj prirodi talasne funkcije. Talasna funkcija mora da bude **jednoznačna**, jer jedna čestica ne može da ima različite verovatnoće nalaženja u istoj tački prostora, Slika 8.4.2a. Iz uslova normiranja sledi da talasna funkcija mora da bude **konačna** u konačnom delu prostora jer integral (8.4.21a) mora da bude konačan u svim delovima prostora, Slika 8.4.2b i 8.4.2c. Međutim, talasna funkcija može da liči na Dirkovu δ-funkciju, tj., da ima jako veliku vrednost u veoma malom delu prostora a da pri tome vrednost integrala $\Psi^*\Psi$ po tom vrlo malom delu prostora bude konačna, Slika 8.4.2d. Ovakva talasna funkcija odgovara čestici koja ima tačno određen položaj u prostoru.

Kako je Šredingerova jednačina diferencijalna jednačina drugog reda po koordinatama, to talasna funkcija Ψ i njen prvi izvod moraju da budu neprekidni da bi drugi izvod uopšte postojao, Slika 8.4.2f. U izvesnim slučajevima uslov da prvi izvod talasne funkcije mora da je, takođe, neprekidna funkcija nije matematički strogo ispunjen. Na primer, na granici dve oblasti koordinata potencijal, a time i talasna funkcija, mogu da imaju skokovitu promenu. Ovo je slučaj kod čestice u pravougaonoj jami, o čemu će u sledećim poglavljima biti više reči.



Slika 8.4.2 Primeri različitih funkcija: a) višeznačna; b) neograničena; c) neograničena u određenom opsegu; d) neograničena u jednoj tački; e) funkcija sa prelomom; f) neprekidna funkcija.

8.4.2 Svojstvene funkcije i svojstvene vrednosti

Vratimo se sada stacionarnoj Šredingerovoj jednačini (8.4.17):

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

Levu stranu ove jednačine možemo da shvatimo kao niz instrukcija za izvršenje određenih matematičkih operacija nad talasnom funkcijom Ψ. Treba, dakle, da se odrede drugi izvodi funkcije Ψ po koordinatama (Laplasov operator) i da se pomnože sa $-\hbar^2/(2m)$, a ovaj rezultat treba sabrati sa proizvodom talasne funkcije i potencijalne energije U. Desna strana Šredingerove jednačine je jednostavno proizvod talasne funkcije Ψ i nekog određenog broja (vrednosti energije E). Niz instrukcija s leve strane Šredingerove jednačine predstavlja kvantnomehanički operator ukupune energije i obično se obeležava sa H:

$$\hat{H} = (E)_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}(r) . \tag{8.4.22}$$

$\hat{U}$ je oznaka operatora potencijalne energije. Koristeći prethodnu jednačinu, vremenski nezavisnu Šredingerovu jednačinu napisaćemo na sledeći način:

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{8.4.23}$$

dok vremenski zavisna Šredingerova jednačina ima oblik:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{8.4.24}$$

Rešavanje jednačine (8.4.23) odnosno (8.4.24) sastoji se u nalaženju partikularnih rešenja Ψ_n koja zadovoljavju određene granične uslove. Takve funkcije Ψ_n nazivaju se **svojstvene funkcije** operatora H, a energija E naziva se **svojstvena vrednost** operatora energije. Sama Šredingerova jednačina predstavlja, dakle, u matematičkom smislu svojstveni problem operatora energije.

Skup svojstvenih vrednosti naziva se **spektar svojstvenih vrednosti**. On može da bude diskretan i kontinualan. Ako određenoj svojstvenoj vrednosti odgovara samo jedna svojstvena funkcija (pri tome treba da se ima na umu da se svojstvene funkcije koje se razlikuju samo za stalni činilac smatraju identičnim), ta svojstvena vrednost naziva se **nedegenerisanom**. Svojstvena vrednost, kojoj odgovaraju dve ili više linearno nezavisnih svojstvenih funkcija, je **degenerisana**.

Ako se sistem može nalaziti u stanjima koje opisujemo funkcijama ψ_1, ψ_2....ψ_n koje su svojstvene funkcije istog operatora (pri istoj svojstvenoj vrednosti), onda se stanje sistema može opisati i funkcijom $\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2+...$ koje je linearna kombinacija funkcija ψ_1, ψ_2. Takva funkcija, takođe, je svojstvena funkcija istog operatora. Linearnom kombinacijom talasnih funkcija izražavamo princip *superpozicije*.

Prema postulatu kvantne mehanike, dinamičkim promenljivim kao što su koordinata, impuls, moment impulsa, energija, pridružuju se, tako da uzajamno zadovoljavaju određene komutacione jednačine, kvantnomehanički operatori. Za svaki od ovih operatora mogu da se napišu jednačine svojstvenih vrednosti slične izrazu (8.4.23):

$$\hat{\Omega}\psi = \omega\psi \tag{8.4.25}$$

gde su ψ svojstvene funkcije operatora $\hat{\Omega}$, a ω njegove svojstvene vrednosti. Kako su dinamičke promenljive veličine koje, uopšte uzevši, mogu da se mere, svojstvene vrednosti ω moraju da budu realne. Kvantnomehaničke operatore prikazujemo (kao i u slučaju operatora energije) u tzv. koordinatnom predstavljanju (postoje i drukčija predstavljanja, npr. impulsno). U ovom predstavljanju koordinatama položaja x, y i z pridružuju se operatori položaja x, y i z koje jednostavno tumačimo kao „pomnožiti sa x”. Komponentama impulsa p_x, p_y, p_z pridružuju se operatori:

$$\hat{p}_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}. \tag{8.4.26}$$

Operator impulsa možemo formalno da odredimo pomoću poznatog operatora energije $\hat{H}$, jednačina (8.4.22). Kada je potencijalna energija U jednaka nuli, energija E je samo kinetička (T):

$$p_x^2 = 2mE; \; \hat{p}_x^2 = 2m(\hat{T}) = 2m\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right] \Rightarrow \hat{p}_x = \pm\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}.$$

Od dve moguće vrednosti za $\hat{p}_x$ uzima se ona sa pozitivnim znakom.

Kvantnomehanički operatori drugih važnih dinamičkih promenljivih dobijaju se tako što se ove veličine izraze preko koordinata i impulsa, koji se zatim zamene odgovarajućim operatorima.

Tako se, momentu impulsa $\vec{l}$ pridružuje operator momenta impulsa $\vec{l}_{op}$:

$$\vec{l} = \vec{r}\times\vec{p} = \begin{bmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{bmatrix} \rightarrow \vec{l}_{op} = \frac{\hbar}{i}\begin{bmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \tag{8.4.27}$$

a komponentama momenta impulsa l_x, l_y i l_z pridružuju se operatori:

$$l_x = yp_z - zp_y \rightarrow \hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$l_y = zp_x - xp_z \rightarrow \hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{8.4.28}$$

$$l_z = xp_y - yp_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Postulatom kvantne mehanike definiše se srednja vrednost ili očekivana vrednost operatora [videti relacije (D-8.4.15) i (D-8.4.18)], kao i disperzija rezultata merenja neke dinamičke promenljive sistema, koju ćemo označiti sa Ω kada se njeno merenje ponovi mnogo puta. Pomnožimo prvo (8.4.25) funkcijom ψ^* (koja je konjugovano kompleksna funkciji ψ) i integralimo po čitavom prostoru:

$$\omega = \frac{\int \psi^* \hat{\Omega} \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}. \tag{8.4.29}$$

Prema jednačini (8.4.29) se kao rezultat preciznog merenja dinamičke promenljive Ω kada je ψ svojstvena funkcija operatora Ω dobija vrednost ω. Kada je, međutim, sistem u stanju ψ, pri čemu je ψ dobijena npr. rešavanjem svojstvenog problema (8.4.23) ali nije svojstvena funkcija operatora Ω, kvantnomehaničkim postulatom se definiše očekivana vrednost operatora (ili srednja vrednost) $\langle\Omega\rangle$:

$$\langle\Omega\rangle = \frac{\int \psi^* \hat{\Omega} \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}. \tag{8.4.30}$$

Kada je npr. operator Ω jednak operatoru impulsa tada se izračunavanjem desne strane jednačine (8.4.30) dobija srednja vrednost impulsa čestice za stanje ψ. Disperzija rezultata merenja [videti i (D-8.4.21)] dobija se iz relacije: