KVANTNA MEHANIKA

Zadaci za vježbe 10. 3. 2025.

2 Osnovna svojstva Schrödingerove jednadžbe

2.1 Dokažite sljedeće tvrdnje:
(a) Za normalizabilna rješenja, konstanta E (energija) mora biti realna.
Uputa: napišite E u jednakosti

$$\Psi(x,t) = u(x)\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

kao $E_0 + i\Gamma$ gdje su E_0 i Γ realni, i pokažite da ako jednadžba

$$\int |\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = 1$$

vrijedi za svaki trenutak t, konstanta Γ mora biti jednaka nuli.
(b) Za svako rješenje vremenski neovisne Schrödingerove jednadžbe $u(x)$, možemo naći ekvivalentnu *realnu* funkciju koja je također rješenje.
(c) Ako je $V(x)$ parna funkcija, tada uvijek možemo naći parno ili neparno rješenje Schrödingerove jednadžbe.

2.2 Pokažite da energija E mora biti veća od *minimalne* vrijednosti od $V(x)$ za svako normalizabilno rješenje vremenski neovisne Schrödingerove jednadžbe. Koja je analogna tvrdnja u klasičnoj fizici? ***Uputa*:** zapišite vremenski neovisnu Schrödingerovu jednadžbu u obliku

$$\frac{\mathrm{d}^2u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left\{V(x) - E\right\}u(x)$$

Ako je $E < V_{\min}$ tada u i njena druga derivacija imaju isti predznak − argumetirajte da takva funkcija ne može biti normalizirana.

2.3 Iako *ukupna* fazna konstanta valne funkcije nema fizikalno značenje (izgubi se kad računamo mjerljivu veličinu), *relativna* faza koeficijenta u razvoju

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n u_n(x)\,\mathrm{e}^{-iE_n t/\hbar}$$

ima. Na primjer, neka je valna funkcija linearna kombinacija dva stacionarna stanja

$$\Psi(x,0) = A\left\{\, u_1(x) + \mathrm{e}^{i\phi}\, u_2(x)\right\}$$

gdje su u_1 i u_2 *realne* funkcije, a ϕ je realna konstanta. Nađite $\Psi(x, t)$, $|\Psi(x, t)|^2$, $\langle x\rangle$ i usporedite sa slučajem $\phi = 0$.

2.4 Valna funkcija, koja je opće rješenje Schrödingerove jednadžbe s vremenski neovisnom potencijalnom energijom, mora biti normalizabilna. Ako su rješenja $u(x)$ ortonormirana, koju relaciju moraju zadovoljavati koeficijenti c_n? Pokažite da vrijedi

$$\langle H\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |c_n|^2$$

Vidimo da je $\langle H\rangle$ konstantna u vremenu, što je jedna od posljedica *zakona očuvanja energije*.

2.5 Pretpostavimo da dodate konstantu V_0 potencijalnoj energiji. U klasičnoj mehanici neće se ništa promijeniti, ali što je s kvantnom mehanikom? Pokažite da valna funkcija dobiva novi, vremenski zavisan faktor oblika: $\exp(-iV_0t/\hbar)$. Kakav efekt takva promjena valne funkcija ima na prosječne vrijednosti dinamičkih varijabli, odnosno, na operatore pridružene fizikalnim veličinama?

2.6 (a) Pokažite da je u stacionarnom stanju $\sigma_H = 0$.
(b) Pokažite da vrijedi

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

Gornji izraz poznat je pod nazivom *Ehrenfestov teorem*; pokazuje nam da Newtonov zakon vrijedi u kvantnoj mehanici ako računamo s prosječnim vrijednostima impulsa i sile.

2.1

(a) Promotrimo valnu funkciju koja opisuje stacionarno stanje energije E

$$\psi(x,t) = u(x)\, e^{-iEt/\hbar}$$

Uvrstimo $E = E_0 + i\Gamma$

$$\psi(x,t) = u(x)\, e^{-iE_0 t/\hbar} \cdot e^{\Gamma t/\hbar}$$

$$|\psi|^2 = |u|^2 e^{2\Gamma t/\hbar}$$

Pretpostavljamo da ψ mora biti normalizabilna

$$\int |\psi|^2 dx = 1$$

$$\Rightarrow e^{2\Gamma t/\hbar} \int |u(x)|^2 dx = 1 \quad \forall t$$

Integral u posljednjoj jednadžbi je konstantan. Ako želimo da cijela lijeva strana bude konstantna kao što je desna, tada mora biti

$$\Gamma = 0$$

odnosno $e^{2\Gamma t/\hbar} = 1$. Dobijamo

$$E = E_0 \quad (\text{realno})$$

(b) Napišimo Schrödingerovu jednadžbu i konjugiranu Schrödingerovu jednadžbu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u}{dx^2} + V(x)\,u(x) = E\,u(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u^*}{dx^2} + V(x)\,u^*(x) = E\,u^*(x)$$

$\oplus$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(u+u^*) + V(x)(u+u^*) = E(u+u^*)$$

Uvodimo: $v = u + u^* = 2\,\mathrm{Re}\,u$ koja je također rješenje stacionarne Schrödingerove jednadžbe.

Na sličan način, pokazali bi i da je

$$i(u-u^*) = -2\,\mathrm{Im}\,u$$

realno rješenje dobijeno pomoću u.

(c) Neka je $V(x)$ parna funkcija za potencijalnu energiju.

$$V(x) = V(-x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u}{dx^2} + V(x)u = E u \quad (*)$$

$$x \to -x \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2 u(-x)}{dx^2} + V(-x)u(-x) = E\,u(-x) \quad (**)$$

Vidimo da je $u(-x)$ također rješenje Schrödingerove jednadžbe.

Zbrojimo jednadžbe za $u(x)$ i $u(-x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\big(u(x)+u(-x)\big) + V(x)\big(u(x)+u(-x)\big) = E\big(u(x)+u(-x)\big)$$

Funkcija $u(x)+u(-x)$ je parno rješenje jer

$$u(x)+u(-x) \xrightarrow{x\to -x} u(-x)+u(x)$$

Pretpostavimo sada da oduzmemo $(*)$ i $(**)$. Imamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\big(u(x)-u(-x)\big) + V(x)\big(u(x)-u(-x)\big) = E\big(u(x)-u(-x)\big)$$

Funkcija $u(x)-u(-x)$ je neparno rješenje jer

$$u(x)-u(-x) \xrightarrow{x\to -x} u(-x)-u(x) = -\big(u(x)-u(-x)\big)$$

$\boxed{2.2}$

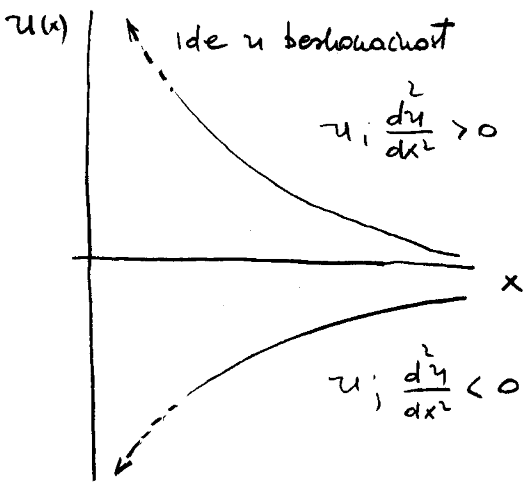
$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)u$$

Pretpostavimo: $E < V_{min} \Rightarrow \frac{d^2u}{dx^2}$, u imaju uvijek jednak predznak

$u > 0$; $\frac{d^2u}{dx^2} > 0$ konkavna prema gore

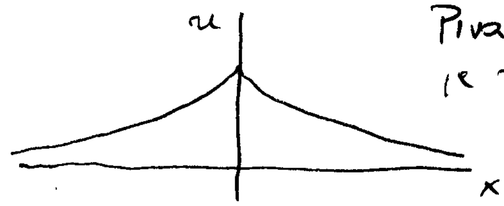
$u < 0$; $\frac{d^2u}{dx^2} < 0$ konkavna prema dolje

U beskonačnosti moramo, zbog normalizabilnosti funkcije, imati ove dvije situacije



Kontradikcija: funkcija ide u beskonačnost, ne može se normalizirati.

Moguća situacija:



Prva derivacija je prekinuta!

Klasična fizika: $E = K + V$ gdje je K kinetička, a V potencijalna energija. Iz definicije je $K \geq 0$ stoga

$$E > E - K = V$$

$$\Rightarrow E \geq V, \quad \forall x .$$

Odavdje, $E \geq V_{min}$ i u klasičnoj fizici. Ipak, uvjet $E > V$, $\forall x$ u kvantnoj fizici ne mora vrijediti (na primjer, tunel-efekt)

$\boxed{2.3}$

$$\psi(x,0) = A\left\{ u_1(x) + u_2(x)\, e^{i\varphi} \right\}$$

Funkcija $\psi(x,t)$ glasi

$$\psi(x,t) = A\left\{ u_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + u_2 e^{-i(E_2 t/\hbar - \varphi)} \right\}$$

Gustoća vjerojatnosti

$$|\psi|^2 = |A|^2 \left\{ u_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + u_2 e^{-i(E_2 t/\hbar - \varphi)} \right\}\left\{ u_1 e^{iE_1 t/\hbar} + u_2 e^{i(E_2 t/\hbar - \varphi)} \right\}$$

za u_1, u_2 realne. Imamo

$$|\psi|^2 = |A|^2 \left\{ u_1^2 + u_2^2 + u_1 u_2 \Big(\underbrace{e^{-i((E_1-E_2)t/\hbar + \varphi)} + e^{i((E_1-E_2)t/\hbar + \varphi)}}_{2\cos\left(\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar} + \varphi\right)} \Big) \right\}$$

$$|\psi|^2 = |A|^2 \left\{ u_1^2 + u_2^2 + 2 u_1 u_2 \cos\left(\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar} + \varphi \right) \right\}$$

Prosječna vrijednost $\langle x \rangle$

$$\langle x \rangle = \int x |\psi|^2 dx$$

$$= |A|^2 \left\{ \int x u_1^2 dx + \int x u_2^2 dx + 2\cos\left(\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar} + \varphi \right) \cdot \int x u_1 u_2 dx \right\}$$

Vidimo da se $\langle x \rangle_\varphi$ promijenila u odnosu na vrijednost $\langle x \rangle_{\varphi=0}$, što znači da relativna faza utječe na opservable. Pomak u fazi funkcije kosinus znači pomak u vremenu mjerenja opservable

$$t \to t - t_0$$

gdje je t_0

$$t_0 = -\frac{\hbar\varphi}{E_1 - E_2}$$

$\boxed{2.4}$

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

Valna funkcija $\psi(x,t)$ mora biti normalizabilna

$$\int \psi^* \psi \, dx = 1$$

Ako su $\{u_n\}$ ortonormirane imamo

$$\int \psi^* \psi \, dx = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} \int u_m^* u_n \, dV$$

$$= 1$$

Zbog

$$\int u_m^* u_n \, dx = \delta_{mn}$$

gornja jednakost postaje

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_m^* c_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$$

$$= 1$$

Relacija koji zadovoljavaju c_n je

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

$$\langle H \rangle = \int \psi^* H \psi \, dx = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} \int u_m^* H u_n \, dx$$

$$\int u_m^* \underline{H u_n} \, dx = \int u_m^* E_n u_n \, dx$$

$$= E_n \int u_m^* u_n \, dx = E_n \delta_{mn}$$

Dobijemo

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |c_n|^2$$

$\boxed{2.5}$

Početna Schrödingerova jednadžba

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x,t)\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Promijenimo $V\to V+V_0$, V_0 realna konstanta. Dobijemo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\left(V(x,t)+V_0\right)\phi=i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} \qquad (*)$$

Rješenje za ϕ tražimo u obliku

$$\phi=\psi\cdot f(t)$$

Uvrstimo u $(*)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}f\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+f\cdot V(x,t)\psi+fV_0\psi=i\hbar f\frac{\partial\psi}{\partial t}+i\hbar\psi\frac{df}{dt}$$

Napišimo jednadžbu u obliku

$$f\cdot\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x,t)\psi-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\}$$
$$+\psi\left\{fV_0-i\hbar\frac{df}{dt}\right\}=0$$

Prvi član je jednak nuli zbog početne Schrödingerove jednadžbe. Zato drugi član mora biti nula, odnosno

$$\frac{df}{dt}=-i\frac{V_0}{\hbar}f$$

Rješenje za f je

$$f=Ce^{-i\frac{V_0}{\hbar}t}$$

, a valna funkcija ϕ

$$\phi=\psi(x,t)e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}$$

Pomak u potencijalnoj energiji neće promijeniti prosječne vrijednosti opservabli. Uzmimo opservablu $Q=Q(x,p)$

$$\langle Q \rangle = \int \Phi^* Q(x,p) \Phi \, dx = \int \psi^* e^{\frac{iV_0 t}{\hbar}} Q(x,p) \psi e^{-\frac{iV_0 t}{\hbar}} dx$$

$$= \int \psi^* Q(x,p) \psi \, dx$$

$\boxed{2.6}$

(a) Izračunajmo najprije $\langle H \rangle$ u stacionarnom stanju

$$\psi_E = u_E \, e^{-iEt/\hbar}$$

$$\langle H \rangle = \int \psi_E^* H \psi_E \, dx = \int u_E^* (H u_E) dx = \int u_E^* E u_E \, dx$$

$$= E \int u_E^* u_E \, dx$$

Za normirane $\{u_E\}$ je

$$\int u_E^* u_E \, dx = 1$$

Stoga,

$$\langle H \rangle = E$$

Slično,

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi_E^* H^2 \psi_E = \int u_E^* H \underbrace{(H u_E)}_{E u_E} dx = E \int u_E^* \underbrace{(H u_E)}_{E u_E} dx$$

$$= E^2 \int u_E^* u_E$$

$$= E^2$$

Imamo,

$$\sigma_H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2} = \underline{0}$$

U stacionarnom stanju je energija oštro definirana.

(b)

$$\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -i\hbar\frac{d}{dt}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx = -i\hbar\int\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dx$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t\,\partial x}$$

Schrödingerova jednadžba

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + V\psi^* = -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \int\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}}_{\sim} + \underline{\underline{V\psi^*}}\Big)dx - \int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}}_{\sim} + \underline{\underline{V\psi}}\Big)dx$$

$$= \;\Rightarrow\; \frac{\partial\psi}{\partial x}V\psi^* - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\psi) = -\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi$$

$$\sim \;\Rightarrow\; \psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

Integral od $\sim$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)dx - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)dx =$$

$$= \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\partial\psi}{\partial x}\cdot\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad \text{ako je}$$

$$\psi \xrightarrow{x\to\pm\infty} 0 \quad i \quad \frac{\partial\psi}{\partial x}\xrightarrow{x\to\pm\infty} 0$$

Ostaje,

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\int\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi\,dx = -\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$