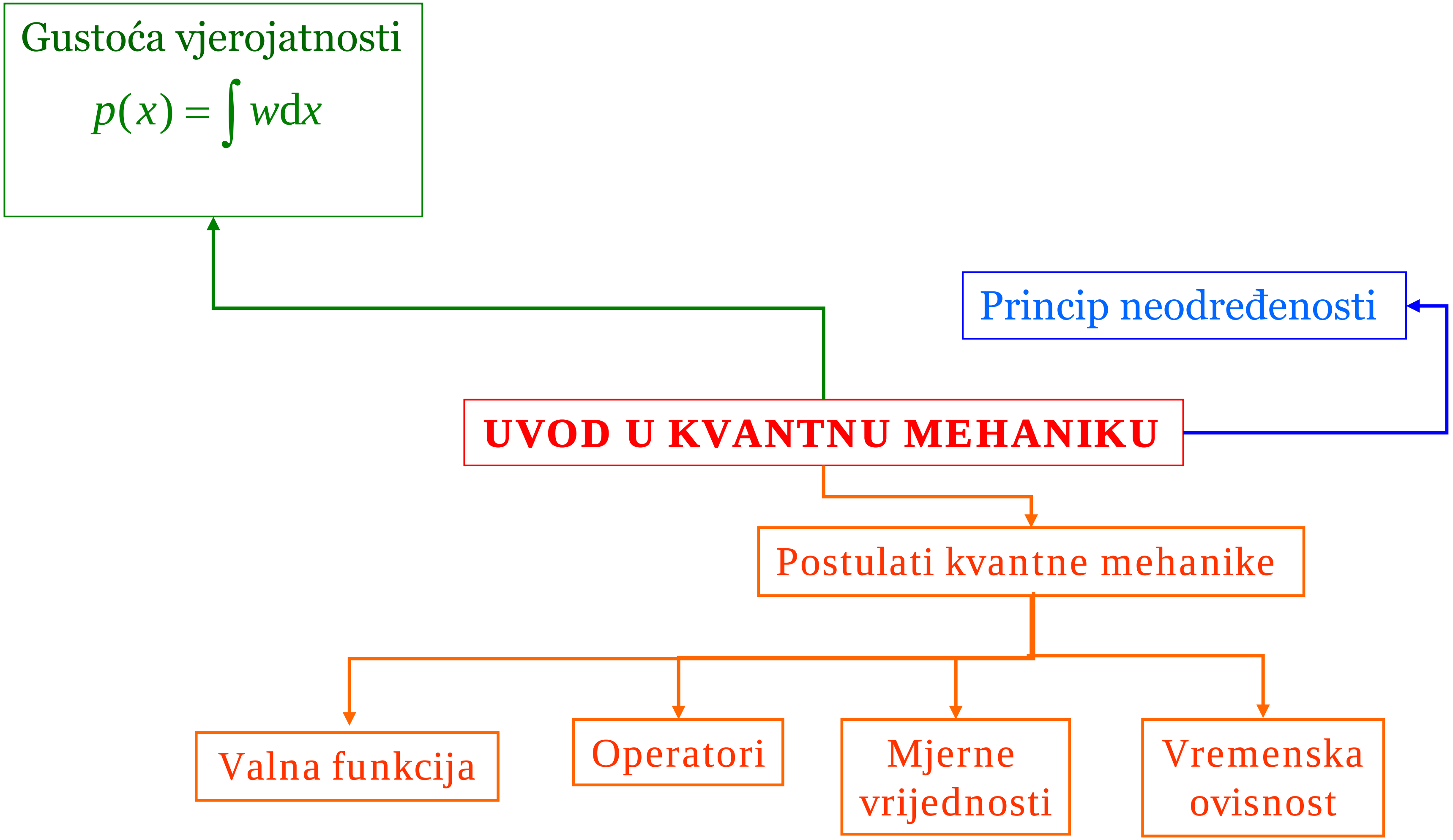
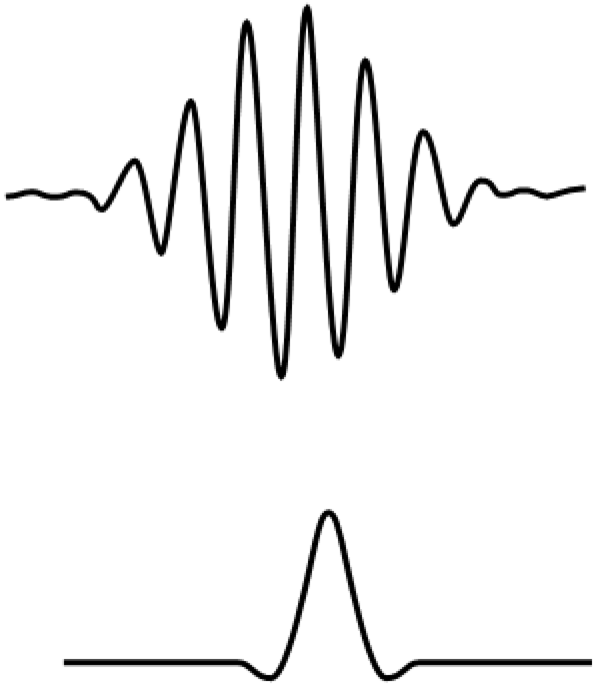
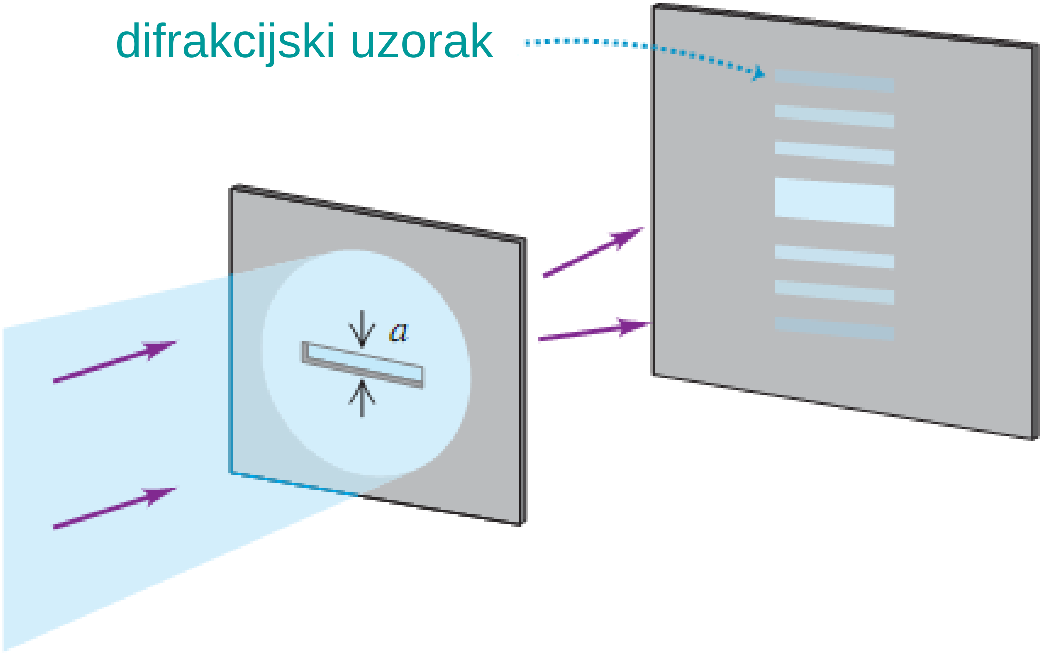

Gustoća vjerojatnosti
$p(x) = \int w \mathrm{d}x$
Princip neodređenosti
UVOD U KVANTNU MEHANIKU
Postulati kvantne mehanike
Valna funkcija
Operatori
Mjerne vrijednosti
Vremenska ovisnost

Princip neodređenosti

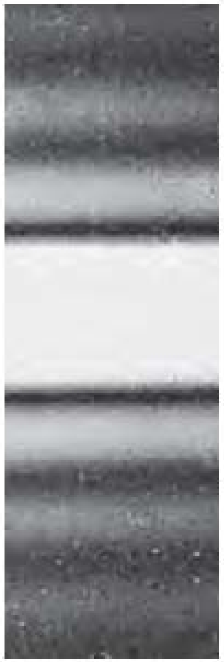


$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

DIFRAKCIJA

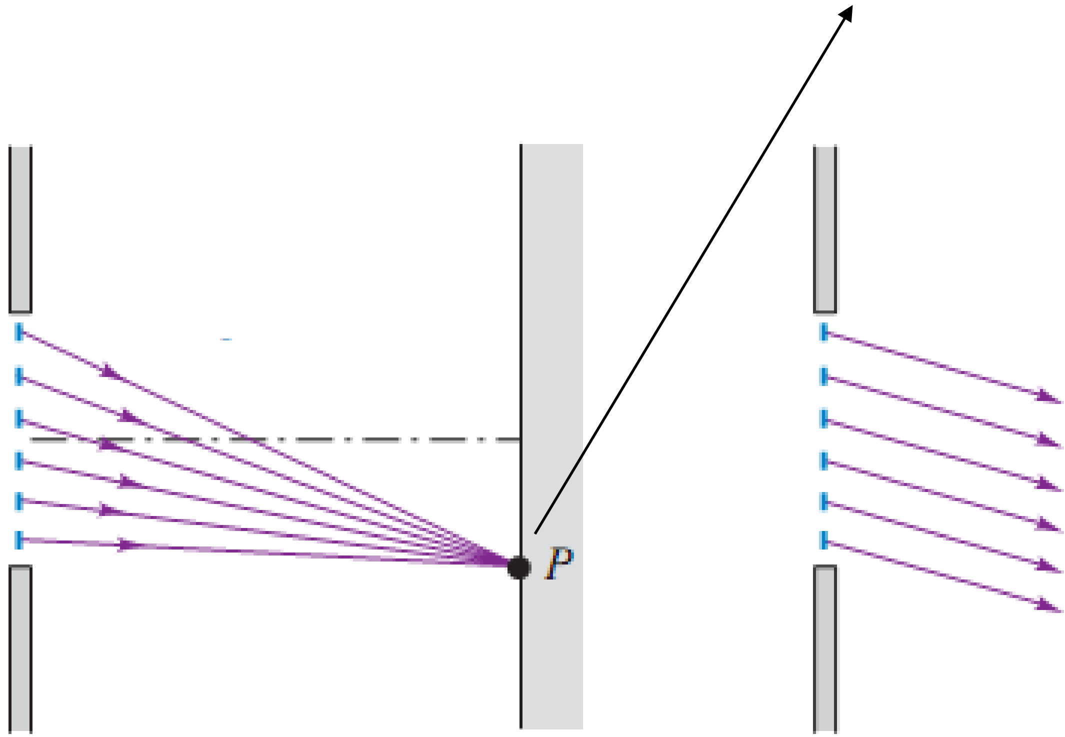


pozitiv



Princip neodređenosti

destruktivna interferencija u točki *P*

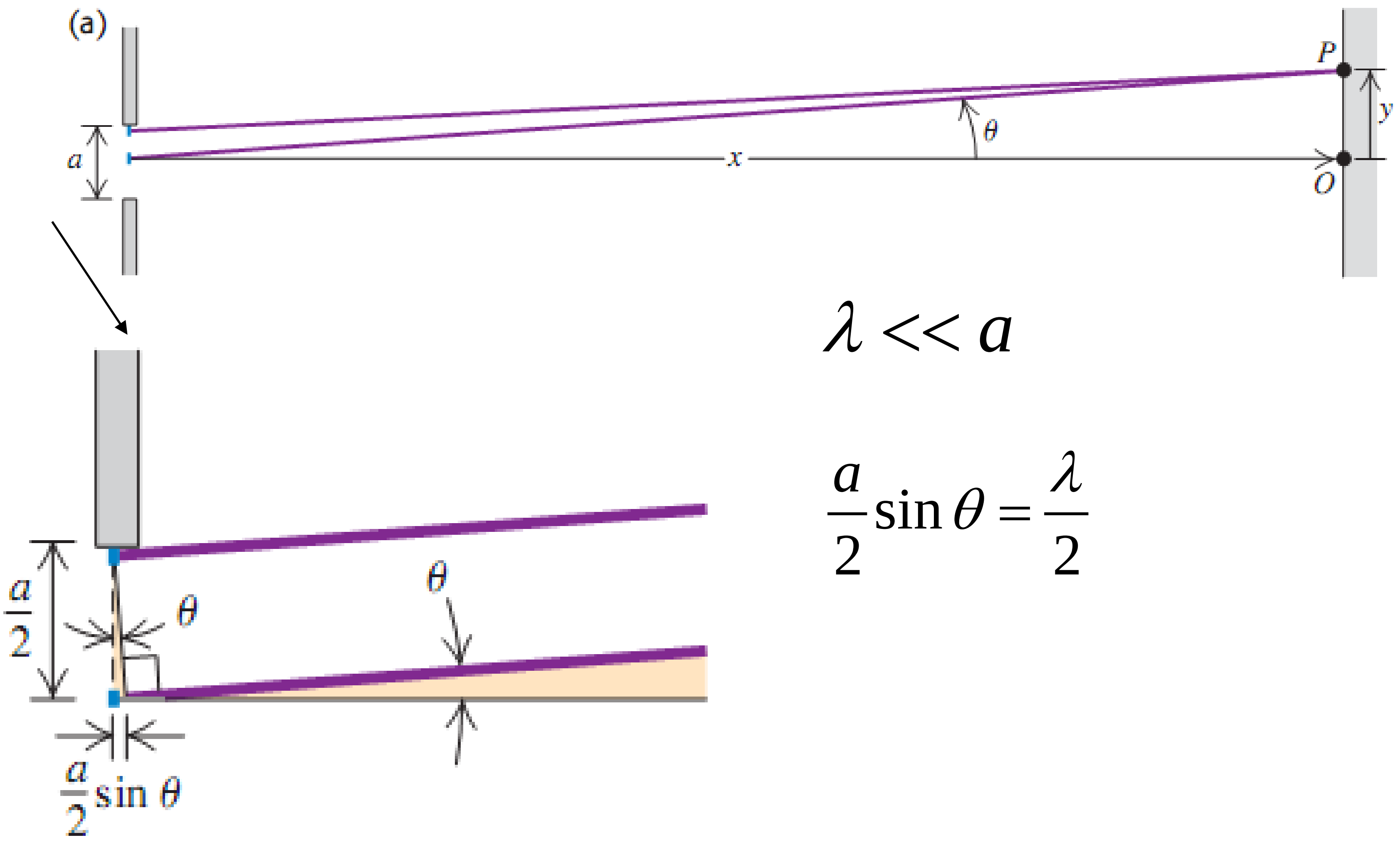


fotofilm

zrake nisu paralelne
(fotofilm blizu pukotine)

zrake približno paralelne
(fotofilm daleko od pukotine)

Princip neodređenosti

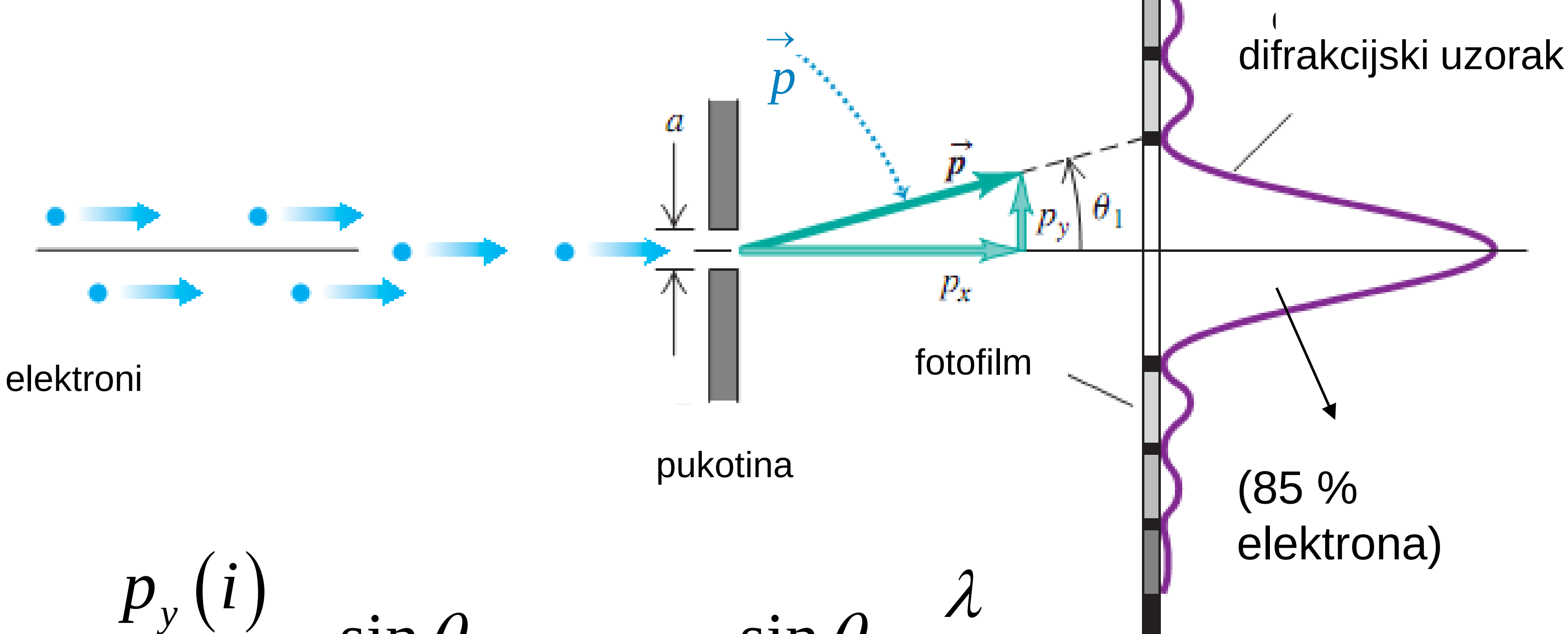


$$\lambda << a$$

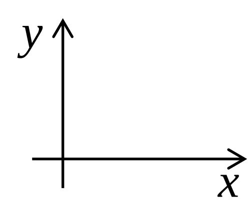
$$\frac{a}{2}\sin\theta = \frac{\lambda}{2}$$

Princip neodređenosti

komponente količine gibanja elektrona, p_x i p_y



$$\frac{p_y(i)}{\left|\vec{p}\right|} = \sin\theta \qquad \sin\theta = \frac{\lambda}{a}$$



$$p_y(i) = \frac{\lambda}{a}\left|\vec{p}\right|$$

$$\langle p_y \rangle = 0$$

Δp_y - najmanja pogreška y komponente količine gibanja

$\Delta p_y \approx p_y(i)$ (odabir-elektroni koji pogađaju ekran u **prvom** minimumu)

$$(|\vec{p}| = \frac{h}{\lambda})$$

$$\Delta p_y \geq \frac{\lambda}{a}|\vec{p}|$$

$$\Rightarrow \Delta p_y = \frac{h}{a|\vec{p}|}|\vec{p}| = h$$

(najmanja pogreška)

a - pogreška u y komponenti položaja elektrona (Δy)

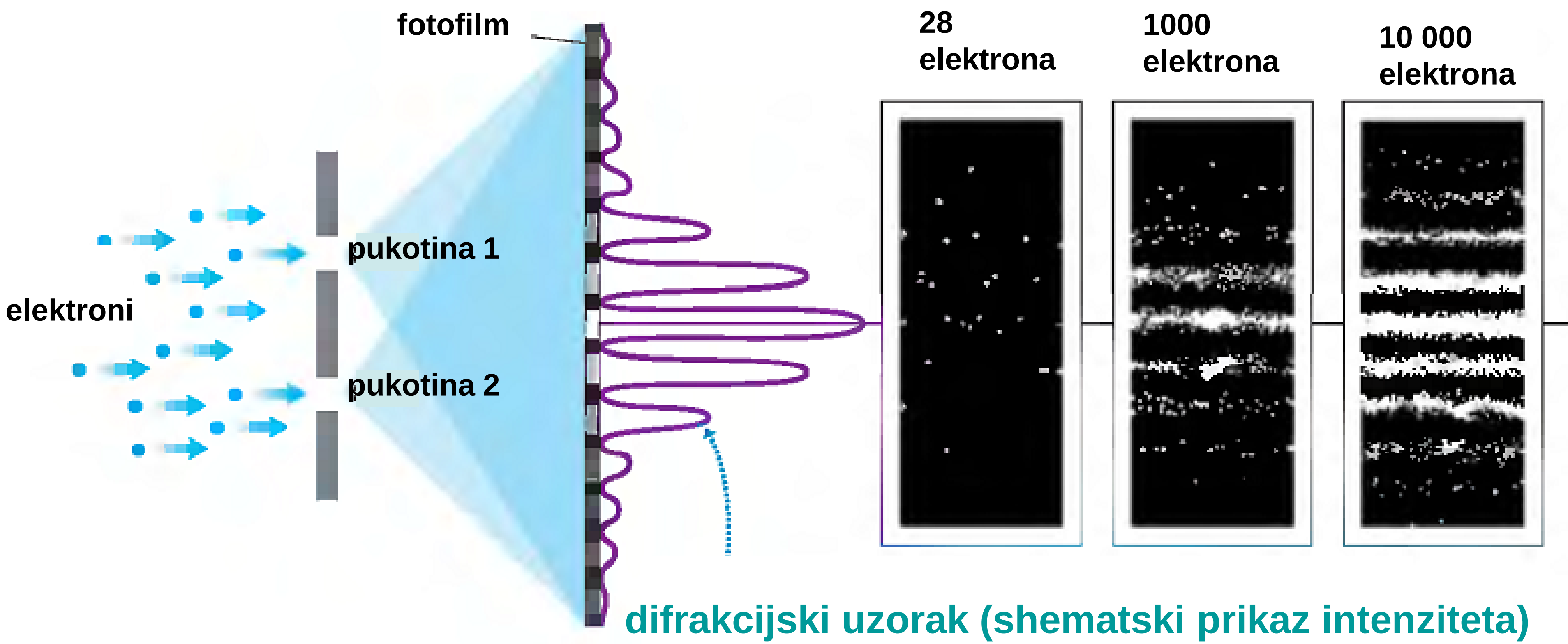
$$\Delta p_y \Delta y = h \quad (\Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2})$$

STVARNO:

$$\Delta y = \sqrt{\frac{(\vec{y}(i) - \langle \vec{y} \rangle)^2 N_i}{N}}$$

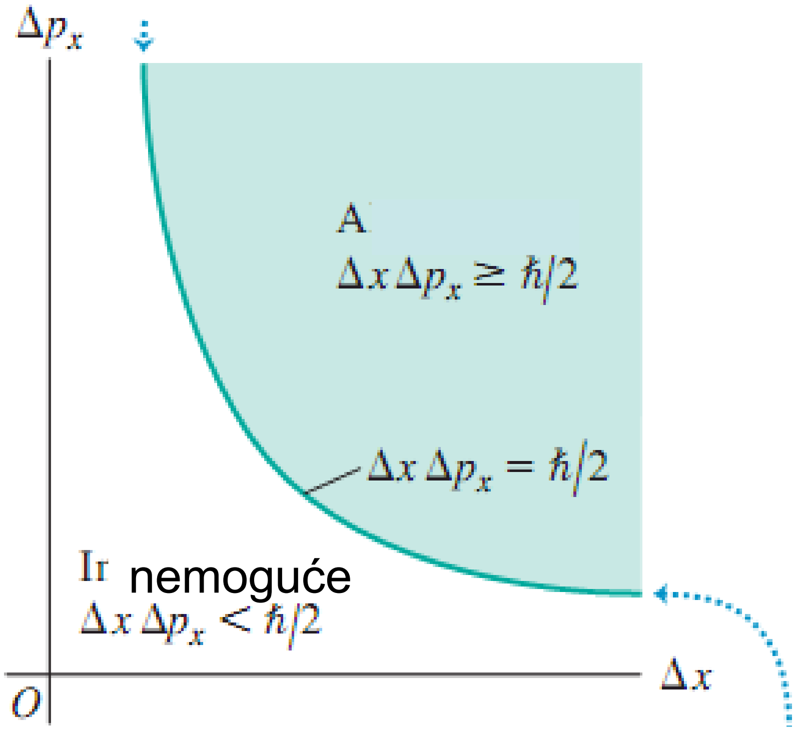
$$\Delta p_y = \sqrt{\frac{(\vec{p}_{y(i)} - \langle \vec{p}_y \rangle)^2 N_i}{N}}$$

Princip neodređenosti

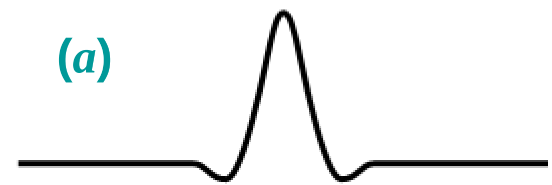


Princip neodređenosti

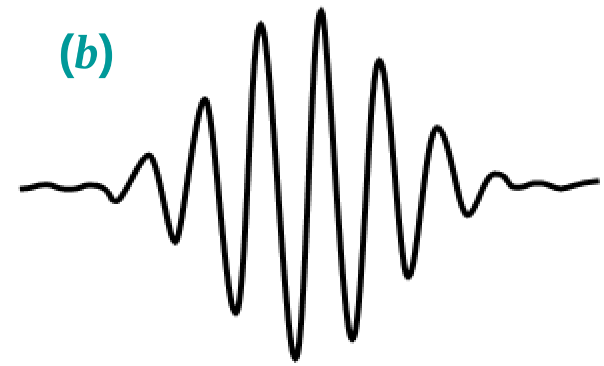
(*a*)
velika neodređenost količine gibanja
(mala neodređenost položaja)



(*a*)



(*b*)

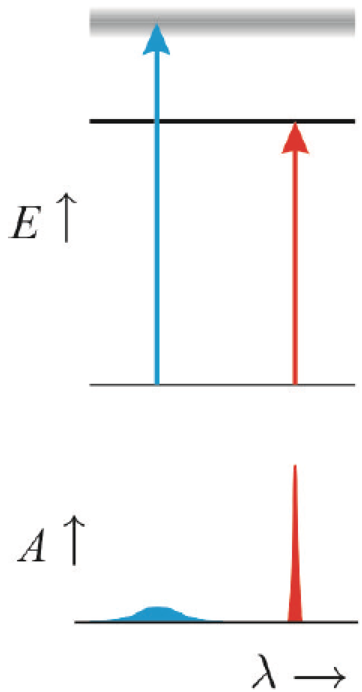


(*b*) velika neodređenost položaja
(mala neodređenost količine gibanja, odnosno valne duljine)

Princip neodređenosti

$$\Delta p_y \cdot \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$



Prirodna širina linija u apsorpcijskom spektru: kratko i dugo živuća stanja.

Princip neodređenosti

POSLJEDICE:

Deterministički opis mikroskopskih sustava (poznati položaj i količina gibanja čestice u svakom trenutku) valja napustiti.

Bohrov model

$$v(n=1) = 2{,}8\times 10^{6}\,\mathrm{m\ s^{-1}}$$

$$\Delta R = R(n=1) = 0{,}529\times 10^{-10}\ \mathrm{m}$$

$$\Delta p = m\Delta v = \frac{\hbar}{2\Delta R} \qquad (\Delta p \Delta R = \frac{\hbar}{2})$$

$$\Delta p = 9{,}9710^{-25}\ \mathrm{kg\ m\ s^{-1}}$$

$$\Delta v = 1{,}1\times 10^{6}\,\mathrm{m\ s^{-1}}$$

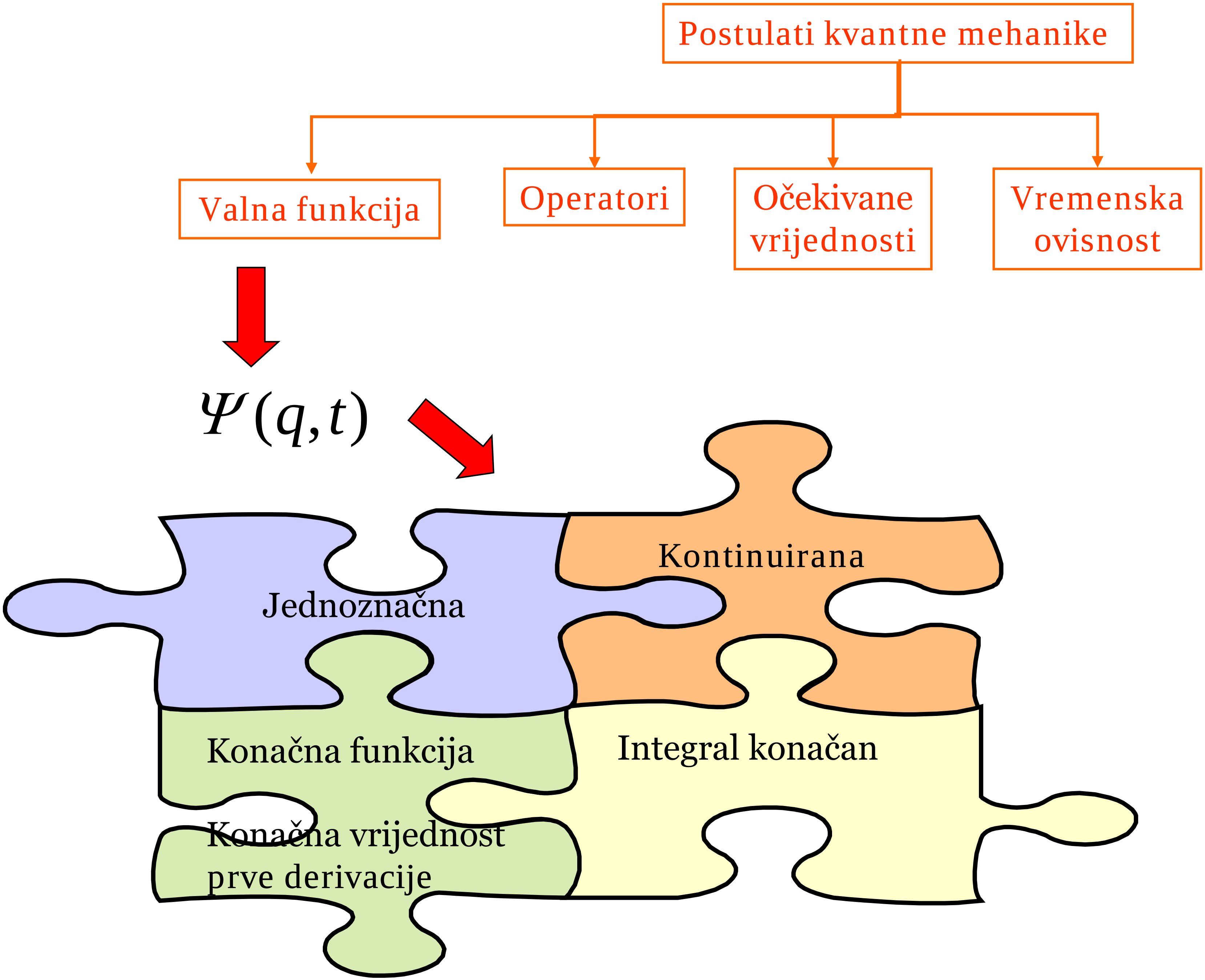
!

Kvantnomehanički opis mikroskopskih sustava temelji se na postulatima kvantne mehanike koji omogućavaju izračun očekivanih vrijednosti fizikalnih veličina (brzine, energije, količine gibanja čestica)

Valna funkcija i Schrödingerova jednadžba

$$\int \Psi^{*}\Psi \; d\tau = 1$$

$$\hat{H}\Psi\left(q,t\right) = i\hbar \frac{\partial \Psi\left(q,t\right)}{\partial t}$$

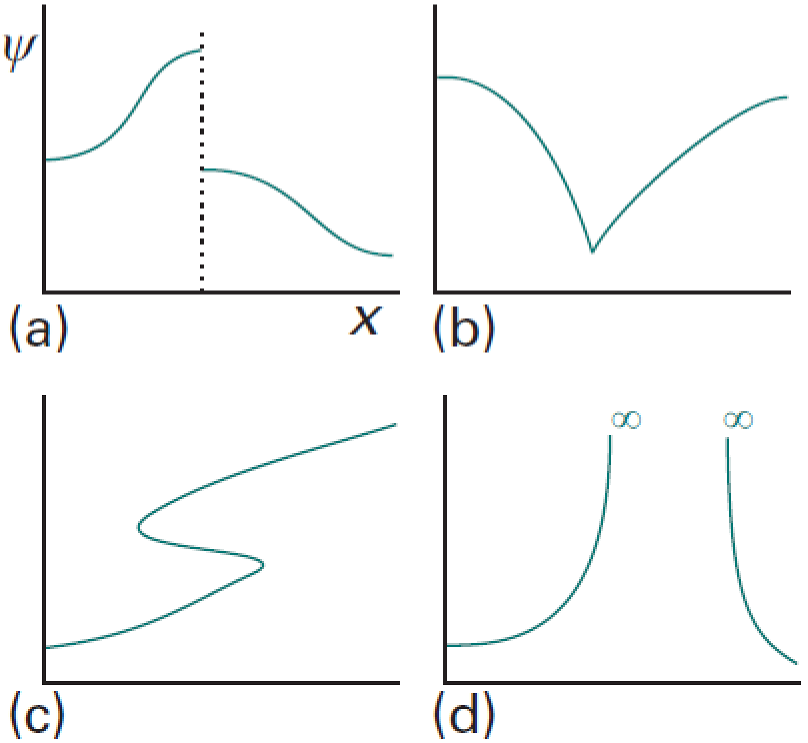

Postulati kvantne mehanike
Valna funkcija
Operatori
Očekivane vrijednosti
Vremenska ovisnost
$\Psi(q,t)$
Kontinuirana
Jednoznačna
Konačna funkcija
Integral konačan
Konačna vrijednost prve derivacije

Valna funkcija

Nije kontinuirana (i prva derivacija) (a i *b*)

Nije jednoznačna (*c*)

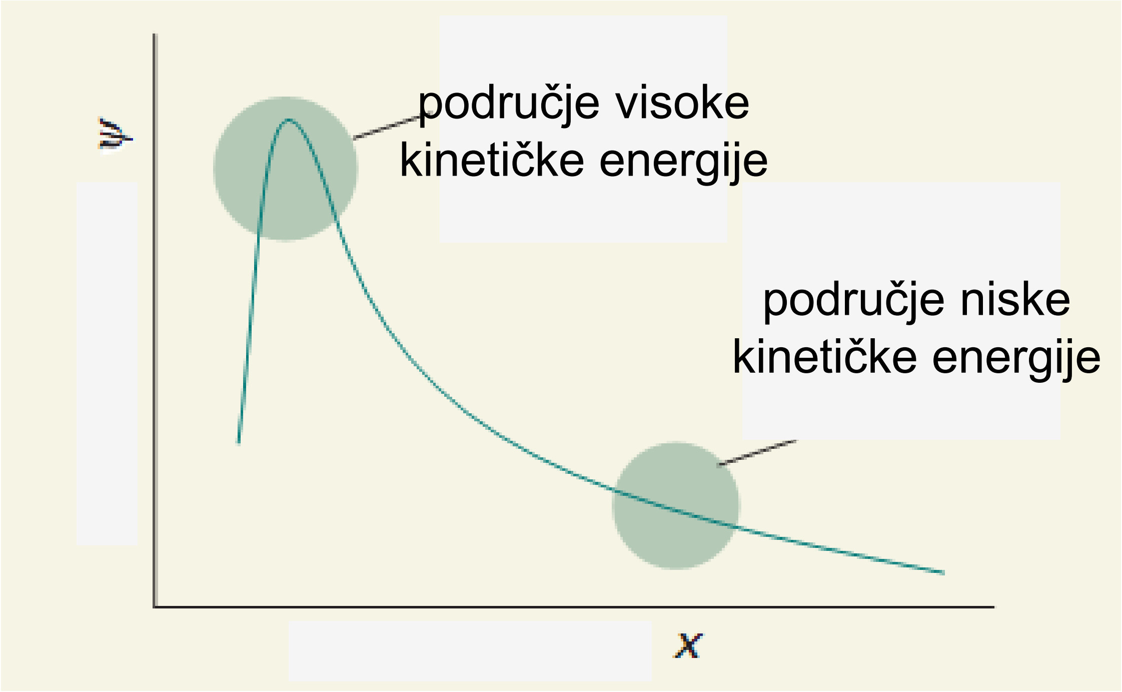
Nije konačna (*d*)



Valna funkcija

Bornova interpretacija valne funkcije

Funkcija *Ψ* nema fizikalno značenje

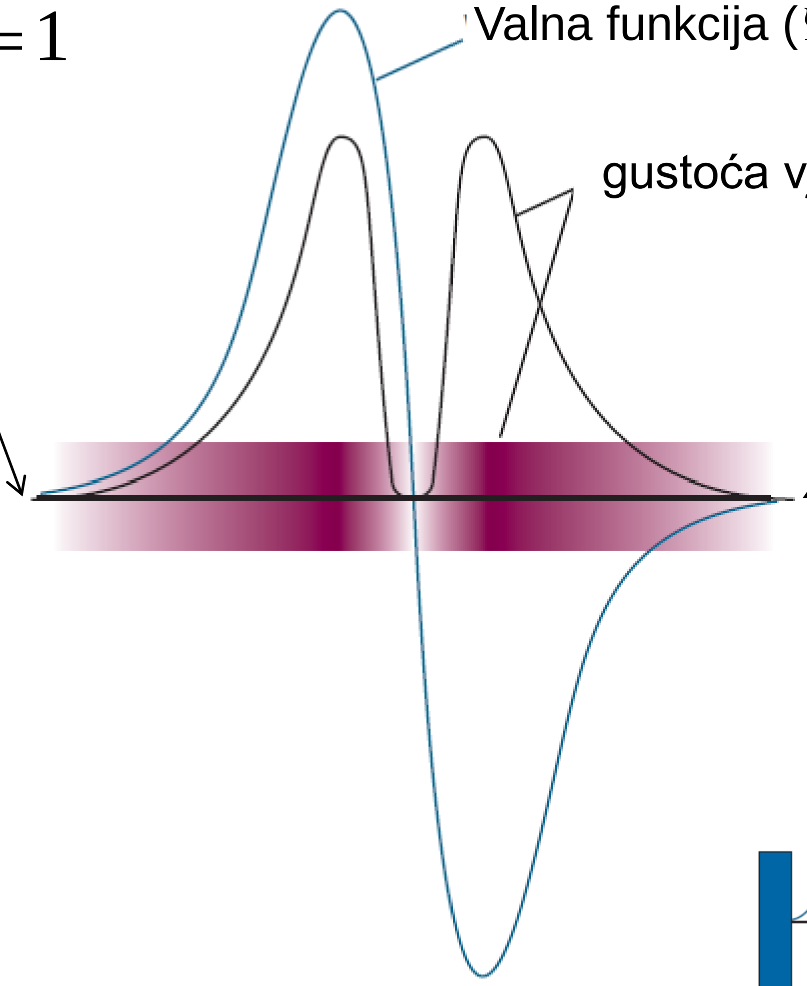


NORMIRANOST VALNE FUNKCIJE

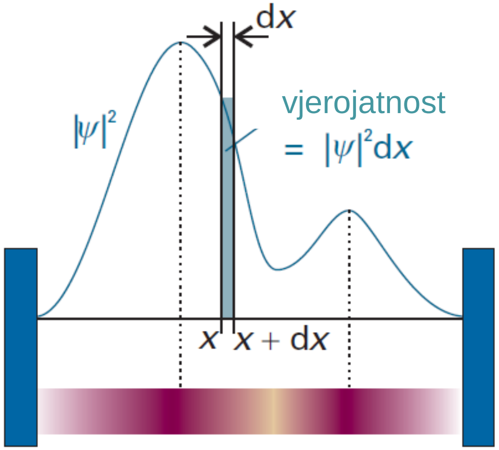
Valna funkcija

$$\int \Psi^{*} \Psi \ \ d\tau = 1$$

Rubni uvjeti

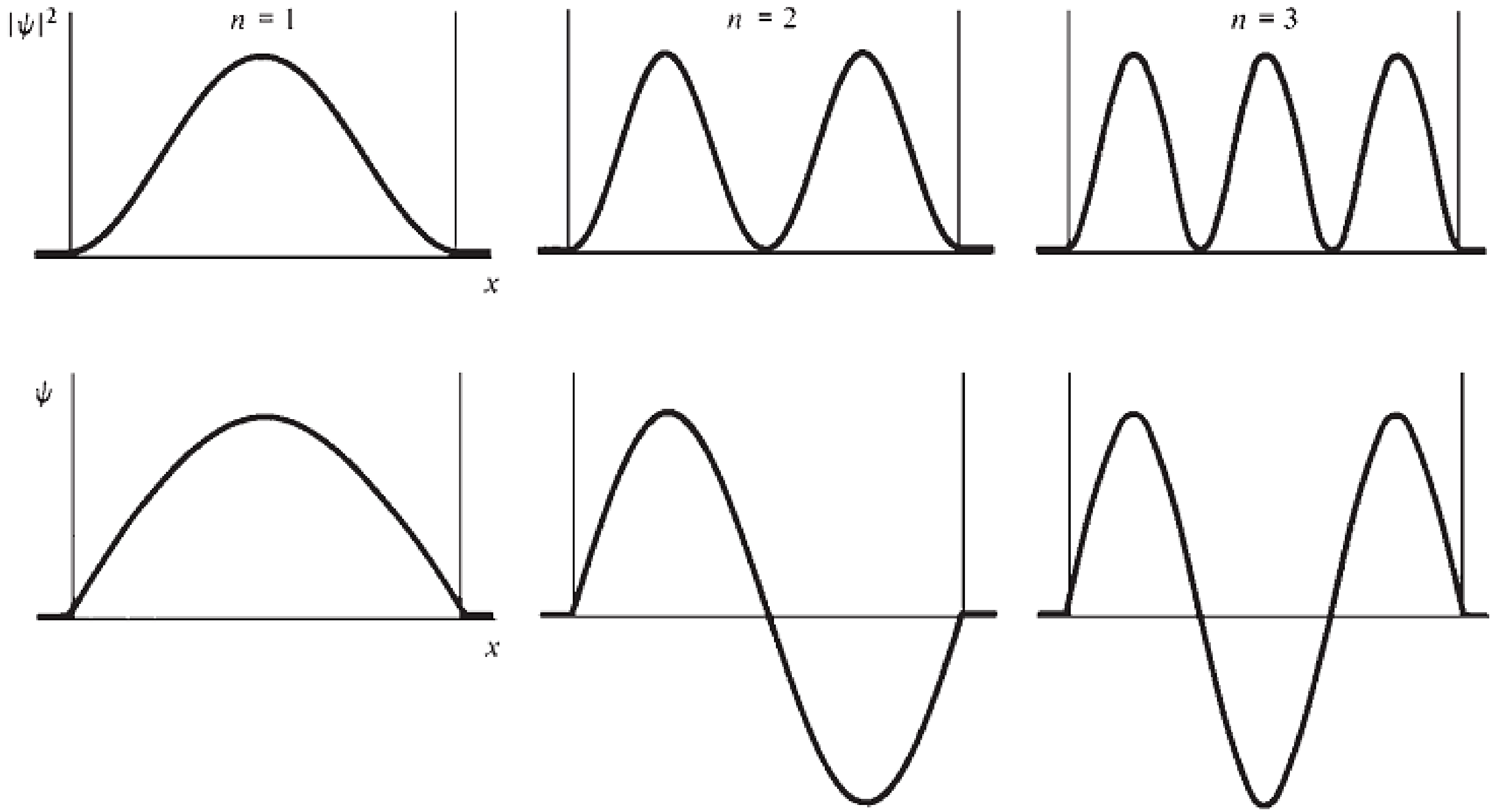


Rubni uvjeti



PRIMJERI FUNKCIJA

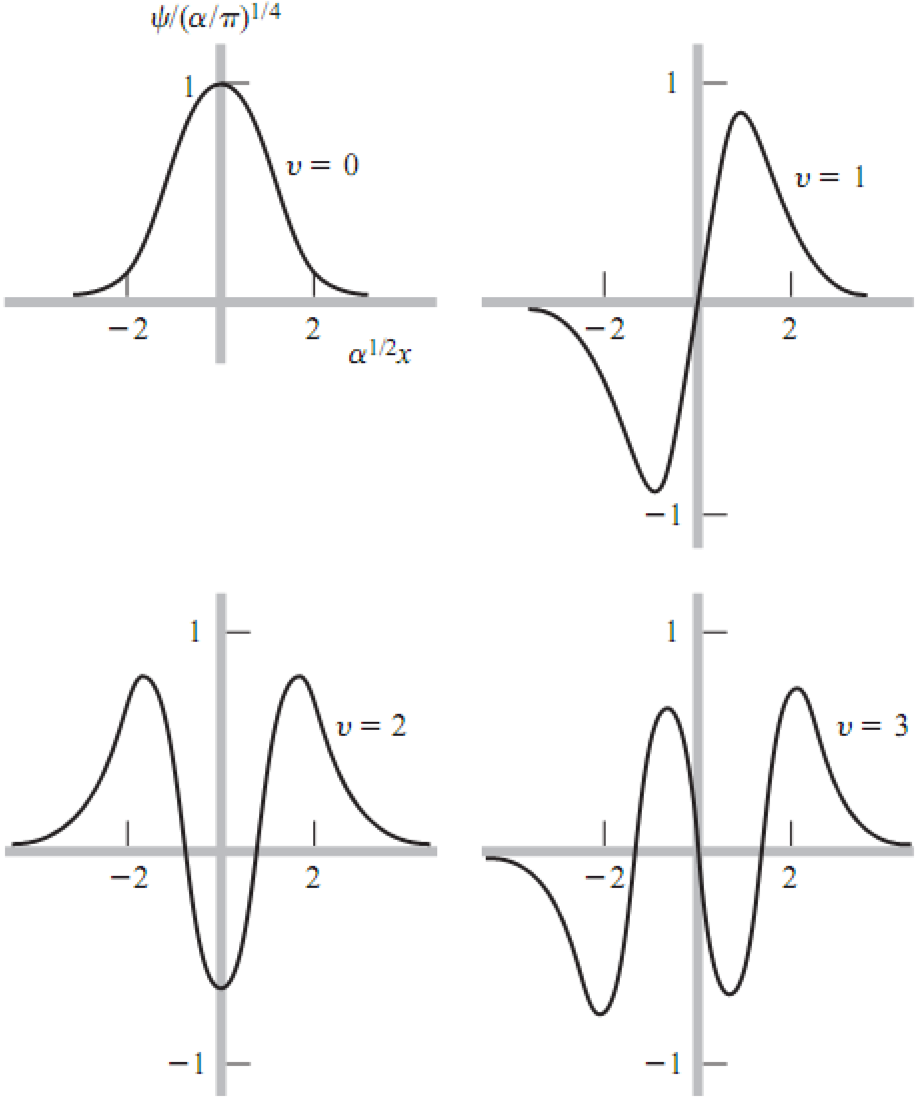
1. Kretanje čestice u jednoj dimenziji: sin *x*



Valna funkcija

PRIMJERI FUNKCIJA

2. Vibracija čestice: $x^n \exp(-ax^2)$



Operatori

Postulati kvantne mehanike

Valna funkcija

Operatori

Mjerne vrijednosti

Vremenska ovisnost

$$\hat{\Omega}$$

Matematička uputa kako djelovati na valnu funkciju
da bi se izračunala neka vrijednost fizikalne veličine

- linearni
- međusobno usklađeni

Linearni operatori

Operatori

Djelovanje operatora prikazujemo: $$\hat{\Omega}\Psi_1 = \Psi_2$$

Za linearne operatore vrijedi:

$$\hat{\Omega}\left(c\Psi_1\right) = c\left(\hat{\Omega}\Psi_1\right)$$

$$\hat{\Omega}\left(\Psi_1 + \Psi_2\right) = \hat{\Omega}\Psi_1 + \hat{\Omega}\Psi_2$$

$$\left(\hat{\Omega}_1 + \hat{\Omega}_2\right)\Psi = \hat{\Omega}_1\Psi + \hat{\Omega}_2\Psi$$

$$\left(\hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2\right)\hat{\Omega}_3\Psi = \hat{\Omega}_1\left(\hat{\Omega}_2\hat{\Omega}_3\right)\Psi = \hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2\hat{\Omega}_3\Psi$$

Zakon komutacije

$$\left[\hat{F},\hat{G}\right] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$$

$$\left[\hat{F},\hat{G}\right] = 0 \qquad \hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}$$

$$\left[\hat{F},\hat{G}\right] \neq 0$$

Operatori

Tablica 2.1 Osnovni kvantnomehanički operatori u koordinatnoj reprezentaciji.

Veličina: Naziv	Veličina: Simbol	Kvantnomehanički operator
koordinata	x	$\hat{x} = x \cdot$
količina gibanja, impuls	p_x	$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$

Tablica 2.2 Neki izvedeni kvantnomehanički operatori.

Veličina: Naziv	Veličina: Simbol	Kvantnomehanički operator
potencijalna energija (1-D)	V	$\hat{V}(x) = V(x)\cdot$
kinetička energija (3-D)	T	$\hat{T} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left\{\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right\}$
ukupna energija za česticu u 3-D prostoru*	E	$\boxed{\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)}$
komponente kutne količine gibanja, impulsnog momenta	L_x	$\hat{L}_x = -\mathrm{i}\hbar\left(r_y \dfrac{\partial}{\partial z} - r_z \dfrac{\partial}{\partial y}\right)$
	L_y	$\hat{L}_y = -\mathrm{i}\hbar\left(r_z \dfrac{\partial}{\partial x} - r_x \dfrac{\partial}{\partial z}\right)$
	L_z	$\hat{L}_z = -\mathrm{i}\hbar\left(r_x \dfrac{\partial}{\partial y} - r_y \dfrac{\partial}{\partial x}\right)$

Operator ukupne energije:
Hamiltonov operator ili hamiltonijan

Postulati kvantne mehanike

Valna funkcija | Operatori | Mjerne vrijednosti | Vremenska ovisnost

sustav opisan funkcijom Ψ

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{\Omega} \Psi \, d\tau}{\int \Psi^* \Psi \, d\tau}$$

$\langle \Omega \rangle$ **- očekivana kvantnomehanička vrijednost veličine** Ω

$$\langle \Omega \rangle = \int \Psi^* \hat{\Omega} \Psi \, d\tau$$

$\hat{\Omega}$ **- operator veličine** Ω

$$\hat{\Omega} \varphi_i = \omega_i \varphi_i$$

n-struko DEGENERIRANO STANJE

- n funkcija pripada istoj svojstvenoj vrijednosti

Postulati kvantne mehanike

- Valna funkcija
- Operatori
- Mjerne vrijednosti
- Vremenska ovisnost

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

$$\Psi(q,t) = \psi(q)\varphi(t)$$

$$\frac{\mathrm{d}\varphi(t)}{\mathrm{d}t} = -i\frac{E}{\hbar}\varphi(t)$$

$$\hat{H}\psi(q) = E\psi(q)$$

Vremenski nezavisna
Schrödingerova jednadžba

Teoremi kvantne mehanike

Ortogonalne funkcije:
valne funkcije koje pripadaju
 različitim svojstvenim
vrijednostima operatora
jedne dinamičke veličine.

$$\int \Psi_1^* \Psi_2 \; d\tau = \int \Psi_2^* \Psi_1 \; d\tau = 0$$

Operatori koji **komutiraju**:
moguće je naći valne funkcije
koje su istovremeno
svojstvene funkcije
oba operatora (npr. *p* i *E*)

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$$

Schrödingerova jednadžba

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

1. Napisati klasičan hamiltonijan
2. Pretvoriti klasični hamiltonijan u kvantnomehanički operator
3. Postaviti Schrödingerovu jednadžbu
4. Riješiti Schrödingerovu jednadžbu

i. Rješenja Schrödingerove jednadžbe: beskonačan broj funkcija

ii. Nisu sve funkcije dobre valne funkcije (uvjeti!)

iii. Sve rješenja nemaju fizikalno značenje.

iv. Rješenja moraju zadovoljavati rubne (granične) uvjete.

Pitanja za ponavljanje (uvod u kvantnu mehaniku)

1. Kako glasi načelo neodređenosti?

3. Što je valna funkcija?
4. Kakva svojstva mora imati funkcija stanja?
5. Bornova interpretacija valne funkcije.
6. Što su rubni uvjeti?
7. Zašto valna funkcija mora biti normirana?
8. Što su rješenja Schrödingerove jednandžbe?
9. Što su svojstvene funkcije u Schrödingerovoj jednadžbi?
10. Što su svojstvene vrijednosti u Schrödingerovoj jednandžbi?
11. Što je Hamiltonijan?