0.1 Predgovor

Kvantna mehanika nije nastala ni brzo ni lako, ili kako P. J. E. Peebles u uvodu u svoj udžbenik kaže, 'the theory was not derived from measurements, nor discovered by a single theoretical stroke, but instead grew by a complicated interplay of experimental hints, theoretical insights, and good luck, intermingled with many wrong turns'[1]. Stvaranje ove teorije trajalo je skoro pedeset godina a njen začetak u eksperimentu vezuje se za otkrića zakona zračenja crnog tela (Stefan, 1879.), fotoefekta (Hertz, 1887.) i atomskih spektara (Balmer, 1885). Razvoj odgovarajućih teorijskih ideja bio je relativno spor a glavne korake u objašnjenju novootkrivenih fenomena napravili su Planck (1901.), Einstein (1905.) i Bohr (1913.). Konačno, de Broglie-va ideja o talasno-čestičnom dualizmu (1924.) pomogla je da se formalizam kristališe: 1925. otkrivena je matrična mehanika (Heisenberg), 1926. Schrödinger-ova jednačina a 1928. njen relativistički analog, Diracova jednačina. Kao i u vreme stvaranja Newton-ove mehanike deo potrebne matematike je istraživan i precizno formulisan praktično istovremeno: knjiga Courant-a i Hilbert-a objavljena je 1924. a Frank-a i von Mises-a 1925.[2]

Razlog ovakvog istorijskog razvoja je sigurno delom u tome što je kvantnomehanička slika prirode 'kontraintuitivna' (naravno, sa stanovišta klasične fizike odnosno klasične intuicije) jer su njeni važni elementi diskretnost fizičkih veličina i nemogućnost njihovog istovremenog merenja. U stvari matematički okvir u kome kvantna mehanika opisuje fizičku realnost potpuno je različit od klasičnog, od matematičke analize Newton-a i Leibniz-a. Jedan njegov element je da se fizički sistem opisuje funkcijama stanja koje imaju strukturu kompleksnog vektorskog prostora i, što je posebno važno, nisu direktno merljive. Sa druge strane, rezultati merenja fizičkih opservabli su inherentno statistički. Obe osobine se drastično razlikuju od klasične mehanike u kojoj je poznavanje stanja sistema (čestice) isto što i poznavanje vrednosti njenog položaja i impulsa ili nekih drugih opservabli kao što su energija ili moment impulsa. Ideja da su stanja sistema vektori u apstraktnom linearnom prostoru stanja je suština kvantovanja, i njen prirodan deo je novi opis prostornih simetrija sistema. Koncepti kvantovanja i reprezentovanja simetrije spadaju u najvažnije ideje moderne fizike i predstavljaju osnovu našeg današnjeg razumevanja osnovnih interakcija u prirodi.

Da bismo pokazali kako se kvantnomehanički opis ipak prirodno razvio iz klasične fizike odlučili smo se da kvantnu mehaniku uvedemo na 'kvaziistorijski' i induktivan način. Tome nije razlog samo to što velike ideje i važna izvodjenja i eksperimenti treba da se vide, razumeju i usvoje, nego i to što je studentima osim znanja matematičkog formalizma potrebno da znaju zašto

[1] P. J. E. Peebles, *Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1992.

[2] R. Courant, D. Hilbert, *Methoden der Mathematischen Physik I*, Springer, 1924., P. Frank, R. von Mises, *Die Differential Und Integralgleichungen Der Mechanik Und Physik*, Druck und Verlag, 1925.

je on neophodan. U stvari možda pre svega, da se na njega naviknu.

U prvoj glavi dat je istorijski uvod u predmet: pregled važnih eksperimenata kao i evolucija teorijskog razmišljanja koje je dovelo do precizne ideje kvantovanja. U drugoj glavi, koja služi da se izgradi intuicija i upoznaju osnovni kvantni fenomeni, dati su najjednostavniji sistemi u jednoj i dve dimenzije. Izmedju opisa jednodimenzionih i višedimenzionih sistema koji je dat u četvrtoj glavi napravljen je intermeco: treća glava u kojoj se malo detaljnije govori o matematičkom formalizmu. Približne metode kvantne mehanike opisane su u petoj glavi. Naravno podela teksta ima i svoju metodološku stranu. S obzirom na našu istraživačku orijentaciju na kvantnu teoriju polja i nekomutativnu geometriju, u tekstu ima delova koji odstupaju od obima i nivoa predvidjenog kursom: ta poglavlja označena su zvezdicama i mogu da se preskoče. Na kraju svake glave dati su zadaci.

Ovaj udžbenik je nastao na osnovu kursa kvantne mehanike koji smo u toku više godina držali studentima nastavnog smera i astrofizike na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu. Zamisao je bila da napravimo tekst koji je u nekom smislu komplementaran udžbeniku profesora Fedora Herbuta *Kvantna mehanika za istraživače*, pre svega po induktivnom pristupu i redukovanom korišćenju matematike. Fedorova knjiga je divan, inspirativan kurs koji je kod nas, kao i kod mnogih drugih beogradskih studenata, probudio ljubav i interes za ovaj predmet i modernu fiziku uopšte.

Sadržaj

Glava 1

Uvertira: istorijski uvod

Nauka koje je obeležila 20. vek bez sumnje je fizika, a najvažnija otkrića fizike u prvoj polovini 20. veka su kvantna mehanika i teorija relativnosti. Dolazak obe teorije najavljen je krajem 19. veka eksperimentima koji se nisu mogli objasniti konceptima i matematičkim aparatom klasične fizike i o kojima će biti reči u ovoj uvodnoj glavi. Eksperiment je postavio granice odnosno domen važenja klasične mehanike; ove granice karakterišu dve skale: brzina svetlosti $c = 2.998 \cdot 10^8\, ms^{-1}$ i Planck-ova konstanta $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} Js$. Rekli smo već da je slika sveta koju daju kvantna mehanika i teorija relativnosti kontraintuitivna i to se često izražava formulisanjem paradoksa kao što su paradoks blizanca ili paradoks Schrödinger-ove mačke. Naravno ni u prirodi ni u njenom korektnom opisu paradoksa nema: u ovom slučaju, naša intuicija o kretanju tela bazirana na svakodnevnom iskustvu ne može se proizvoljno ekstrapolisati na sve vrednosti energija, brzina i rastojanja. I kvantna mehanika i specijalna teorija relativnosti čvrsto stoje na mnoštvu eksperimentalnih rezultata. U stvari u slučaju kvantne mehanike ispravno je čak reći da je ona mikroskopska samo na nivou fundamentalnog opisa kretanja pojedinačnih čestica [1], a zapravo predstavlja jedini način da se opišu mnogi fenomeni u makrosvetu na primer u fizici čvrstog stanja.

1.1 Jednačine klasične mehanike

Najjednostavniji klasični sistem je tačkasta čestica ('materijalna tačka') i sistem interagujućih čestica. Ako imamo sistem materijalnih tačaka prebrojanih indeksom i njegovo stanje zadato je položajima čestica $\vec{r}_i$ i brzinama $\vec{v}_i = \dot{\vec{r}}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt}$. Promena stanja sistema čestica tj. njegovo kretanje opisuje se drugim Newton-ovim zakonom

$$m_i \vec{a}_i = \sum_j \vec{F}_{ij}, \tag{1.1}$$

[1] Ovaj iskaz nije sasvim precizan jer postoje brojni tzv. makroskopski kvantni eksperimenti koji se izvode sa sistemima sa malim brojem čestica.

gde je m_i masa i-te čestice, $\vec{a}_i = \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2}$ je njeno ubrzanje a sa $\vec{F}_{ij}$ označena je sila kojom čestica j deluje na česticu i. U klasičnoj mehanici sile interakcije zavise samo od medjusobnog rastojanja,

$$\vec{F}_{ij} = \vec{F}_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \tag{1.2}$$

i važi treći Newton-ov zakon, $\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji}$.

U Lagrange-evoj mehanici se, umesto vektorom položaja $\vec{r}$ i brzinom $\vec{v}$ kretanje opisuje generalisanim koordinatama q_i i brzinama $\dot{q}_i$. U jednostavnom slučaju kada su sile potencijalne, ekvivalentan zapis Newton-ovog zakona kretanja su Lagrange-eve jednačine

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathrm{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathrm{L}}{\partial q_i} = 0 \tag{1.3}$$

gde je lagranžijan $\mathrm{L} = T - V$ razlika ukupne kinetičke i potencijalne energije sistema. Lagrange-eve jednačine su varijacione jednačine koje se dobijaju iz zahteva da je dejstvo sistema

$$S = \int dt\, \mathrm{L} \tag{1.4}$$

minimalno na klasičnim trajektorijama.

Sa jednačina (1.1) ili (1.3) koje su drugog reda po vremenu možemo preći na jednačine prvog reda ako uvedemo generalisane impulse

$$p_i = \frac{\partial \mathrm{L}}{\partial \dot{q}_i} \tag{1.5}$$

i hamiltonijan $H = \sum p_i \dot{q}_i - \mathrm{L}$. Za konzervativne sisteme hamiltonijan je ukupna energija sistema, $H = T + V$. Jednačine kretanja tada glase

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{1.6}$$

odnosno, za proizvoljnu fizičku veličinu $A = A(q_i, p_i, t)$ imamo

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}. \tag{1.7}$$

$\{A, B\}$ je Poisson-ova zagrada funkcija $A(q_i, p_i, t)$ i $B(q_i, p_i, t)$ i definiše se

$$\{A, B\} = \sum_i \big(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i}\big). \tag{1.8}$$

Parovi (q_i, p_i) nazivaju se kanonske promenljive i za njih važi

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}. \tag{1.9}$$

Uzmimo kao primer Lagrange-eve jednačine kretanja čestice u polju centralne sile. Centralna sila je konzervativna i njen potencijal zavisi samo od rastojanja r od centra, $V = V(r)$, pa je problem najprirodnije rešavati u sfernim koordinatama $(r,\, \theta,\, \varphi)$: $\;x = r\sin\theta\cos\varphi,\;\; y = r\sin\theta\sin\varphi,\;\; z = r\cos\theta$. Lagranžijan zapisan u sfernim koordinatama je

$$\mathrm{L} = \frac{m}{2}(\dot r^2 + r^2\dot\theta^2 + r^2\sin^2\theta\dot\varphi^2) - V(r), \tag{1.10}$$

a generalisani impulsi su $p_r = m\dot r$, $p_\theta = mr^2\dot\theta$ i $p_\varphi = mr^2\sin^2\theta\dot\varphi$. Lagrange-eve jednačine prema tome glase

$$\frac{d}{dt}(m\dot r) = mr\dot\theta^2 + mr\sin^2\theta\dot\varphi - \frac{dV}{dr} \tag{1.11}$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot\theta) = mr^2\sin\theta\cos\theta\dot\varphi \tag{1.12}$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2\sin^2\theta\dot\varphi) = 0. \tag{1.13}$$

Odmah se vidi da je ugaona koordinata φ ciklična tj. ne figuriše eksplicitno u lagranžijanu koji zavisi sano od generalisane brzine $\dot\varphi$: to znači da je impuls p_φ konstanta kretanja, jednačina (1.13). Ovu konstantu izborom koordinatnog sistema možemo da fiksiramo da bude nula,

$$mr^2\sin^2\theta\dot\varphi = 0, \tag{1.14}$$

odnosno dobijamo da je $\dot\varphi = 0$ pa se kretanje odvija u ravni $\varphi =$const. Tada se i drugi ugaoni impuls p_θ održava i imamo

$$p_\theta = mr^2\frac{d\theta}{dt} = L. \tag{1.15}$$

U stvari zbog sferne simetrije vektor momenta impulsa $\vec L$ je konstantan što odgovara održanju generalisanih impulsa p_φ i p_θ: normala na ravan $\varphi =$const daje pravac vektora $\vec L$ a p_θ njegovu apsolutnu vrednost L. Tako da pri rešavanju kretanja u centralnom potencijalu ostaje zapravo samo jedna, radijalna jednačina (1.11) i problem se efektivno svodi na jednodimenzioni. Zbog održanja energije E i preostala jednačina može da se reši u kvadraturama. Dobijamo

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V(r)) - \frac{L^2}{m^2r^2}}, \tag{1.16}$$

a njeno rešenje daje implicitnu zavisnost položaja od vremena, funkciju $t(r)$:

$$t = \int\frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2})}}\,. \tag{1.17}$$

Treba zapaziti da je rešenje (1.17) identično rešenju za kretanje jednodimenzione čestice u efektivnom potencijalu $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}$. Zato se član $\frac{|\vec{L}|^2}{2mr^2}$ koji potiče od momenta impulsa zove se centrifugalna energija ili centrifugalna barijera; ovaj član za $\vec{L} \neq 0$ 'odbija' česticu od centra čak i kada je sila privlačna. Slika: centrifugalna energija Iz (1.15) i (1.16) možemo da odredimo trajektoriju kao rešenje jednačine

$$\frac{d\theta}{dr} = \frac{\frac{L}{mr^2}}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V(r)) - \frac{L^2}{m^2r^2}}}. \tag{1.18}$$

Integrali (1.17) i (1.18) mogu da se izraze preko elementarnih funkcija u najvažnijem slučaju Newton-ovog gravitacionog potencijala

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r}. \tag{1.19}$$

Uvodjenjem odgovarajuće smene, integral (1.18) se svodi na arkus kosinus pai dobijamo

$$\theta = \arccos\left(\frac{a}{r} - \frac{1}{e}\right), \quad \text{tj.} \quad \frac{ae}{r} = 1 + e\cos\theta, \tag{1.20}$$

gde su a i e konstante integracije,

$$ae = \frac{L^2}{m\alpha}, \qquad e = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{m\alpha^2}}. \tag{1.21}$$

Ove trajektorije, rešenja Kepler-ovog problema, su konusni preseci, i daju putanje tela pri kretanju u gravitacionom polju Sunca. Kretanje je finitno, tj. tela ostaju vezana u Sunčevoj orbiti ako je njihova energija $E < 0$ i tada su orbite kružne odnosno eliptične. Ako je $E \geq 0$ putanje su parabole odnosno hiperbole i kretanje je infinitno.

Napomenimo još, mada je dosta očigledno, da jednačine (1.11-1.13) nisu linearne po nepoznatim funkcijama r, θ i φ jer sadrže sinus, kvadrat itd. ovih funkcija. Linearnost je osobina koju će jednačine kvantne mehanike imati.

1.2 Boltzamann-ova raspodela

Jednačine klasične mehanike opisuju kretanje čestice i sistema čestica. Ove jednačine su determinističke, što znači da je za potpuno znanje o kretanju sistema u budućnosti potrebno da znamo početne uslove. tj. početni položaj i brzinu u nekom trenutku vremena, i da umemo da rešimo jednačine (tačno ili približno, na primer numerički). Medjutim ako imamo više čestica u interakciji njihovo kretanje je spregnuto i po pravilu jednačine se ne mogu egzaktno rešiti: već problem tri tela nije u opštem slučaju rešiv. Sem toga, ako je broj čestica veoma veliki, kao npr. u gasovima ili čvrstim telima koja se ispituju u laboratoriji, reda veličine 10^{20} ili 10^{23}, osim nemogućnosti da se jednačine reše nije moguće odrediti ni početne uslove za svaku od čestica. Zato se u opisu makroskopskih objekata koriste metode statističke fizike, koje omogućavaju da se najvažniji aspekti ponašanja makrosistema opišu i pored toga što ne znamo detalje kretanja pojedinih čestica-konstituenata.

Da se podsetimo nekih elemenata statističkog opisa. Pretpostavimo da imamo sistem koji se sastoji od N istih čestica ili podsistema koji medjusobno slabo interaguju, i da merimo neku opservablu npr. energiju. Ukoliko se pri merenjima dobija da N_i od N čestica ima energiju E_i, onda kažemo da je verovatnoća da se u pojedinačnom merenju dobije ta vrednost energije data sa

$$\rho_i = \rho(E_i) = \lim_{N\to\infty} \frac{N_i}{N}. \tag{1.22}$$

Ovo je empirijski ili eksperimentalni smisao pojma verovatnoće. Na sličan način funkcija raspodele $\rho(E_i)$ može se definisati i apstraktno, kao funkcija pomoću koje izražavamo verovatnoće ishoda merenja ili kako se u teoriji verovatnoće kaže, slučajnih dogadjaja. U najopštijem slučaju u materijalnim sistemima funkcija raspodele zavisi od položaja i impulsa svih čestica.

Verovatnoće u (1.22) definisane su pod pretpostavkom da je skup rezultata merenja $\{E_i\}$ diskretan. Taj skup može naravno biti i kontinualan i tada govorimo o verovatnoći da se izmeri vrednost E koja leži u intervalu $(E, E+dE)$. Ona se definiše preko gustine verovatnoće $\rho(E)$:

$$dP(E) = \rho(E)dE. \tag{1.23}$$

Raspodela verovatnoće ρ_i ili ρ je najvažnija veličina u statističkom opisu. Ukupna verovatnoća (da se bilo šta desi odnodno izmeri) se najčešće normira na jedinicu,

$$\sum_i \rho_i = 1, \qquad \int \rho(E)dE = 1, \tag{1.24}$$

ali se ponekad i ne normira; tada leva strana prethodnog izraza definiše tzv. particionu funkciju:

$$Z = \sum_k \rho_k, \ \text{ili} \quad Z = \int \rho(E)dE. \tag{1.25}$$

Ako imamo raspodelu verovatnoće možemo da izračunamo srednje vrednosti fizičkih veličina, npr. u našem slučaju energije

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_i E_i\rho_i}{\sum_i \rho_i}, \tag{1.26}$$

ali i proizvoljnih funkcija ove opservable, npr. njenih polinoma,

$$\langle E^n\rangle = \frac{\sum_i (E_i)^n\rho_i}{\sum_i \rho_i}. \tag{1.27}$$

Neodredjenost odnosno odstupanje od srednje vrednosti pri merenju neke fizičke veličine kvantifikuje se disperzijom Δ koja je definisana kao

$$\Delta^2(E) = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2. \tag{1.28}$$

Kao što smo rekli, zavisno od fizičkog sistema kojeg posmatramo i njegovog opisa, gustina verovatnoće nije uveki funkcija energije nego može da zavisi od drugih pogodnih fizičkih opservabli npr. položaja ili impulsa. U slučaju bacanja kocke na primer slučajna promenljiva je broj (od 1 do 6) koji se pri bacanju dobije. Ali u fizici jedna od najvažnijih veličina je upravo energija, a posebno kada opisujemo stanje termodinamičke ravnoteže.

Pretpostavimo da je naš sistem čestica u stanju termodinamičke ravnoteže na temperaturi T. Pošto je ovo stanje stacionarno, u njemu funkcija raspodele ρ može da zavisi samo od integrala kretanja: energije, impulsa i momenta impulsa: ali ako sistem miruje impuls i moment impulsa su nula pa gustina verovatnoće zavisi samo od energije, $\rho = \rho(E)$. Odredićemo ovu zavisnost za sistem koji se sastoji od slabo interagujućih (ili neinteragujućih) čestica. Ako sistem podelimo na dva podsistema sa energijama E_1 i E_2, ukupna energija je

$$E = E_1 + E_2; \tag{1.29}$$

s druge strane pošto podsistemi ne interaguju, verovatnoća da prvi deo ima energiju E_1 a drugi E_2 je proizvod verovatnoća

$$\rho(E) = \rho(E_1 + E_2) = \rho(E_1)\rho(E_2), \tag{1.30}$$

jer su dogadjaji nezavisni. Jednakost (1.30) je u stvari jednačina za $\rho(E)$ a njeno rešenje je eksponencijalna funkcija,

$$\rho(E) = e^{-\beta E} \tag{1.31}$$

koja se naziva Boltzmann-ova raspodela. Konstanta β se može uzeti kao definicija temperature, $\beta = \frac{1}{kT}$ a $k = 1.381 \cdot 10^{-23} JK^{-1}$ je Boltzmann-ova konstanta. U statističkoj fizici ansambl opisan Boltzmann-ovom raspodelom zove se kanonski ansambl.

1.3 Elektromagnetno polje

Pored materijalnih tačaka i krutih tela druga vrsta osnovnih klasičnih sistema su polja. Fizičko polje zadato je vrednošću neke fizičke veličine u svim tačkama prostora (ili u delu prostora) i u svim trenucima vremena, a karakteristični primeri polja su recimo polje temperature, polje brzine tečnosti npr. vode u reci, gravitaciono polje, električno i magnetno polje. Pošto je polje zadato funkcijom koja zavisi od prostornih koordinata i vremena, jednačine koje opisuju njegovu dinamiku su parcijalne diferencijalne jednačine.

Jedno od osnovnih fizičkih polja je elektromagnetno polje, i ono je jedino fundamentalno fizičko polje koje je od značaja u domenu rastojanja i energija relevantnim za kvantnu mehaniku. Elektromagnetno polje je zadato vrednostima električnog polja $\vec{E}(\vec{r},t)$ i magnetnog polja $\vec{B}(\vec{r},t)$, a njegove jednačine kretanja odnosno dinamičke jednačine su Maxwell-ove jednačine [2]:

$$\operatorname{div}\vec{E} = 4\pi\rho \tag{1.32}$$

$$\operatorname{div}\vec{B} = 0 \tag{1.33}$$

$$\operatorname{rot}\vec{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} = 0 \tag{1.34}$$

$$\operatorname{rot}\vec{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}, \tag{1.35}$$

gde je $\rho(\vec{r},t)$ gustina naelektrisanja a $\vec{j}(\vec{r},t)$ gustina električne struje. Jednačine (1.32) i (1.35) zovu se izvorne jednačine jer opisuju kako promena elektromagnetnog polja zavisi od njegovih izvora, naelektrisanja i struje. Druge dve jednačine (1.33) i (1.34) su bezizvorne jednačine i mogu se rešiti uvodjenjem novih promenljivih, skalarnog i vektorskog potencijala $\Phi(\vec{r},t)$ i $\vec{A}(\vec{r},t)$:

$$\vec{E} = -\operatorname{grad}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \operatorname{rot}\vec{A}. \tag{1.36}$$

Pošto je veza izmedju jačina polja $\vec{E}$, $\vec{B}$ i potencijala Φ, $\vec{A}$ data preko izvoda, potencijali nise jednoznačno odredjeni jačinama polja. Iste vrednosti polja kao Φ, $\vec{A}$ daju potencijali Φ', $\vec{A}'$ definisani sa

$$\Phi' = \Phi + \frac{\partial\chi}{\partial t}, \qquad \vec{A}' = \vec{A} - c\operatorname{grad}\chi \tag{1.37}$$

i to za proizvoljnu funkciju $\chi(\vec{r},t)$. Ovakve transformacije potencijala nazivaju se gradijentne transformacije i pošto ne menjaju fizički opservabilno električno i magnetno polje, one predstavljaju simetriju teorije.

Odredićemo rešenja Maxwell-ovih jednačina u vakuumu tj. kada je $\rho = 0$ i $\vec{j} = 0$. Rotor jednačine (1.34) daje

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\vec{E} + \frac{1}{c}\operatorname{rot}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} = \operatorname{grad}\operatorname{div}\vec{E} - \Delta\vec{E} + \frac{1}{c}\operatorname{rot}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} = 0,$$

dok je parcijalni izvod od (1.35) po vremenu

$$\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} - \frac{1}{c}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = 0.$$

[2] Kao što je to dosta uobičajeno u kvantnoj mehanici i atomskoj fizici, Maxwell-ove jednačine pišemo u Gauss-ovom sistemu jedinica.

Iz poslednje dve jednačine dobijamo da električno polje u vakuumu zadovoljava talasnu jednačinu

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} - \Delta\vec{E} = 0. \tag{1.38}$$

Talasna jednačina ima u principu mnogo rešenja. Kad se npr. rešava u jednoj prostornoj dimenziji za skalarno polje F ona glasi

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = 0. \tag{1.39}$$

Njeno opšte rešenje je

$$F(x,t) = f(t - \frac{x}{c}) + g(t + \frac{x}{c}), \tag{1.40}$$

i predstavlja linearnu kombinaciju dve proizvoljne funkcije (profila ili talasna paketa) f i g. Talas f se kreće duž x-ose u pozitivnom smeru brzinom c, a g u negativnom smeru x-ose istom brzinom: u ovo možemo da se uverimo posmatrajući talasni front, tj. proizvoljnu tačku f_0 nu profilu funkcije f, recimo jedan maksimum. Vrednost $f(t - \frac{x}{c}) = f_0 = \text{const}$ imaju sve tačke u prostoru za koje važi $t - \frac{x}{c} = \text{const}$, tj. $x = ct + b$ što znači da se f_0 kreće duž x-ose brzinom c.

I u slučaju kada ne možemo da odredimo odmah opšte rešenje, za linearne jednačine postoje sistematski metodi kako da se ono nadje. Da bismo rešili jednačinu (1.38) naći ćemo prvo njena partikularna rešenja. Pošto jednačina ima konstantne koeficijente njena rešenja su eksponencijalne funkcije,

$$\vec{E} = \vec{E}_0\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}, \tag{1.41}$$

a uslov (1.38) implicira da frekvenca ω i talasni vektor $\vec{k}$ nisu nezavisni već je

$$\omega^2 = c^2\vec{k}^2. \tag{1.42}$$

Veza izmedju talasnog broja i frekvence naziva se disperziona relacija, a rešenje (1.41) zove se ravan monohromatski talas. Talas je monohromatski jer ima odredjenu frekvencu ω a ravan jer je njegov talasni front ravan u trodimenzionom prostoru, $\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t = b$. Ova ravan je ortogonalna na pravac prostiranja talasa koji je dat talasnim vektorom $\vec{k}$. Talasna dužina talasa je

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}, \tag{1.43}$$

a $\vec{E}_0$ je njegova amplituda. Ali osim (1.38) imamo ostale tri Maxwell-ove jednačine koje dodatno odredjuju rešenje. Iz njih dobijamo

$$\vec{k}\cdot\vec{E}_0 = 0, \tag{1.44}$$

$$\vec{B} = -\frac{\vec{k}}{k}\times\vec{E} = \vec{B}_0\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}. \tag{1.45}$$

Talasni vektor je ortogonalan na električno i magnetno polje odnosno elektromagnetni talasi su transverzalni.

Treba možda napomenuti da je zapis ravnog talasa (1.41) mada uobičajen, na izvestan način formalan jer funkcija $e^{i\alpha} = \cos\alpha + i\sin\alpha$ ima kompleksne vrednosti a znamo da su polja $\vec{E}$ i $\vec{B}$ realna: u stvari, implicitno se podrazumeva da je rešenje za polje $\vec{E}$ ili realni ili imaginarni deo od (1.41). U kvantnoj mehanici biće drugačije: talasne funkcije su zaista kompleksne funkcije realnih promenljivih pa zbog toga i nisu direktno opservabilne (merljive).

Pošto su Maxwell-ove jednačine linearne, njihovo opšte rešenje je zbir partikularnih rešenja, odnosno ravnih talasa. Koeficijenti u ovom zbiru proizvoljni su, a u svakom konkretnom slučaju zadati su vrednostima polja na granici ili u beskonačnosti, tzv. graničnim uslovima. Opšte rešenje za električno polje je

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \int d^3k\ \vec{E}_0(\vec{k})\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \tag{1.46}$$

gde je $\omega = c|\vec{k}|$ a $\vec{E}_0(\vec{k})$ j amplituda pojedinačnog ravnog talasa. Kao što ćemo videti, linearnost Maxwell-ovih jednačina tj. osobina da je zbir dva ili više rešenja opet rešenje je fenomenološki veoma važna i omogućava npr. da se opišu pojave interferencije i difrakcije svetlosti. Zapravo obrnuto: činjenica da ove pojave postoje u prirodi ukazuje da su jednačine koje opisuju svetlost odnosno elektromagnetno polje linearne.

Važna karakteristika elektromagnetnog polja je njegova energija. Može se pokazati da je gustina energije elektromagnetnog polja data sa

$$\mathcal{E} = \frac{1}{8\pi}(\vec{E}^2 + \vec{B}^2), \tag{1.47}$$

odnosno da je njegova energija

$$E = \frac{1}{8\pi}\int d^3r\, (\vec{E}^2 + \vec{B}^2). \tag{1.48}$$

U slučaju ravnog talasa lako se dobija

$$\mathcal{E} = \frac{1}{4\pi}\vec{E}_0^2, \tag{1.49}$$

tj. gustina energije je proporcionalna kvadratu amplitude slično kao kod harmonijskog oscilatora, a ne zavisi od frekvence, talasnog broja ili brzine talasa.

1.4 Zračenje crnog tela

Posle ovog kratkog pregleda nekih važnih pojmova klasične fizike preći ćemo u narednim poglavljima na opis eksperimenata sa kraja 19. veka koji su doveli do novih ideja i promenili klasični opis prirode.[3] Pokušaji da se postojeći fizički koncepti usklade sa rezultatima eksperimenata iskristalisali su dve važne ideje: prva je ideja kvantovanja, odnosno ideja da njutnovska neprekidnost fizičkih pojava i procesa nije univerzalna te da postoje veličine čije merene vrednosti mogu biti samo diskretne. Druga ideja je da se pojmovi čestice (materijalne tačke) i polja (talasa) ne mogu uvek tačno razgraničiti tako da je na jako malim rastojanjima stanje tačkaste čestice zapravo korektnije opisati 'talasnom funkcijom' koja ima atribute fizičkog polja.

Počećemo od eksperimenata o osobinama zračenja crnog tela. Svako telo koje je na temperaturi većoj od apsolutne nule zrači energiju i to preko elektromagnetnih talasa. Količina emitovane energije zavisi od površine tela i raste sa temperaturom. 1879. Stefan je empirijski odredio ovu zavisnost: ukupna izračena energija u jedinici vremena po jedinici površine je

$$\mathcal{U}(T) = e\,\sigma T^4 \tag{1.50}$$

i dobija se kada se kao zbir doprinosa elektromagnetnih talasa svih frekvenci odnosno svih talasnih dužina,

$$\mathcal{U}(T) = \int_0^\infty u(\omega)d\omega = \int_0^\infty u(\lambda)d\lambda. \tag{1.51}$$

Veličina e je konstanta izmedju 0 i 1 i naziva se emisivnost; ona zavisi od osobina površine tela, a $\sigma = 5.670 \cdot 10^{-8} Jm^{-2}K^{-4}s^{-1}$ je Stefan-Boltzmann-ova konstanta. Telo čija je emisivnost jednaka jedinici zovemo apsolutno crno telo. Termodinamičko izvodjenje zakona zračenja crnog tela dao je Boltzmann 1884., a 1899. Lummer i Pringsheim su eksperimentalno odredili spektralnu raspodelu zračenja tj. funkciju $u(\lambda)$.

Slika: Spektralna raspodela za crno telo.

Problem kako da se formula (1.50) i spektralna raspodela $u(\lambda)$ izvedu teorijski tj. iz mikroskopskog modela bio je za klasičnu fiziku nerešiv. 1900. godine Rayleigh je predložio klasični model u kome je dobio da je $u(\lambda) \sim \frac{1}{\lambda^4}$; ovo izvodjenje je upotpunio 1905. Jeans i ono je poznato kao Rayleigh-Jeans-ov model. Pošto je model jasan i prilično jednostavan objasnićemo ga u nekoliko koraka. Model je sledeći: crno telo je kockasta kutija metalnih zidova u kojoj se nalazi elektromagnetno zračenje u toplotnoj ravnoteži na temperaturi T. Pošto su zidovi od metala, elektromagnetni talasi unutar kutije su stojeći talasi: to sledi iz uslova da komponente električnog polja tangentne na zidove moraju biti nula. Ovaj uslov, primenjen na stranice kocke $x = 0$, $y = 0$ i $z = 0$ izdvaja samo talase oblika

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \sin k_x x \, \sin k_y y \, \sin k_z z, \tag{1.52}$$

[3] Veoma lep opis istorijskog razvoja moderne fizike dat je u knjizi R. Eisberg, *Fundamentals of Modern Physics*, John Wiley & Sons,1990.

a kad se primeni na preostale tri stranice kocke $x = a$, $y = a$ i $z = a$ daje uslove $\sin k_x a = 0$, $\sin k_y a = 0$ i $\sin k_z a = 0$ tj. u dozvoljeni su samo talasi sa talasnim brojem

$$k_x = \frac{\pi}{a}\, n_x, \quad k_y = \frac{\pi}{a}\, n_y, \quad k_z = \frac{\pi}{a}\, n_x \tag{1.53}$$

gde su n_x, n_y i n_z su celi brojevi, odnosno talasi sa frekvencom

$$\omega^2 = \frac{c^2\pi^2}{a^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \tag{1.54}$$

U 'k-prostoru' tj. u koordinatnom sistemu čije su ose k_x, k_y i k_z, frekvence stojećih talasa su tačke odredjene trojkama celih brojeva (n_x, n_y, n_z) koje leže na kvadratnoj rešetki; 'gustina' tačaka je $\left(\frac{a}{\pi}\right)^3$. Medjutim, za svaku od tih frekvenci energija talasa može biti proizvoljna jer, kao što smo videli, energija zavisi samo od amplitude talasa, E_0^2.

U elektrodinamici se pokazuje da je elektromagnetno polje u vakuumu razloženo po ravnim talasima, ekvivalentno sistemu neinteragujućih oscilatora različitih frekvenci. Zato je u stanju termodinamičke ravnoteže funkcija raspodele po energiji Boltzmann-ova. Srednja vrednost energije za talase frekvence ω dobija se usrednjavanjem

$$\langle E_\omega \rangle = \frac{\int_0^\infty E e^{-\beta E} dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E} dE} = -\frac{d}{d\beta} \log \int_0^\infty e^{-\beta E} dE = \frac{1}{\beta} = kT \tag{1.55}$$

i kao što vidimo ista je za sve vrednosti frekvenci. Energije koja se izrači u opsegu frekvenci $(\omega, \omega + d\omega)$ data je sa

$$du = u(\omega) d\omega = \frac{\langle E_\omega \rangle}{V}\, N(\omega) d\omega, \tag{1.56}$$

gde je $N(\omega)d\omega$ broj talasa frekvence ω a V zapremina crnog tela. Pošto je zbog graničnog uslova (1.53) broj talasa proporcionalan broju celobrojnih tačaka u k-prostoru, u opsegu frekvenci izmedju ω i $\omega + d\omega$ ima onoliko talasa koliko ih ima u sfernom sloju poluprečnika ω i debljine $d\omega$ tj. u njegovoj osmini jer je ω pozitivan broj pa nam treba samo deo sfere u prvom oktantu. Dakle

Slika: RJ model

$$N(\omega) d\omega = \frac{1}{8}\, 4\pi\omega^2 d\omega\, (\frac{a}{\pi c})^3\, 2 = (\frac{a}{\pi c})^3 \pi\omega^2 d\omega. \tag{1.57}$$

U poslednjoj formuli smo geometrijski rezultat pomnožili sa 2 jer elektromagnetni talas zadate frekvence i talasnog broja ima dve polarizacije tj. dva stepena slobode. Koristeći da je zapremina $V = a^3$, za spektralnu raspodelu dobijamo

$$du = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}\, kT, \tag{1.58}$$

ako predjemo na talasnu dužinu $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ imamo

$$du = u(\lambda) d\lambda = 8\pi kT \frac{d\lambda}{\lambda^4}. \tag{1.59}$$

Dobijena spektralna raspodela ne samo da se očigledno ne slaže sa eksperimentalnom krivom, nego bi za ukupnu izračenu energiju dala beskonačnu vrednost (koja uz to linearno zavisi od temperature):

$$\mathcal{U}(T) = \int_0^\infty u(\omega) d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega = \infty \cdot kT \; ! \tag{1.60}$$

U svoje vreme ovaj rezultat je nazvan ultraljubičasta katastrofa jer integral energije (1.60) divergira u gornjoj granici $\omega \to \infty$, za velike vrednosti frekvenci.

Modernim jezikom rekli bismo da integral (1.60) treba da se 'regularizuje'. Neka vrsta regularizacije je i bila u osnovi Planck-ove ideje: da modifikuje srednju vrednost $\langle E_\omega \rangle$ tako da ukupna energija bude konačna. Planck-ova hipoteza iz 1901. dobila je naziv postulat o kvantovanju i glasi:

Za fizički entitet koji vrši harmonijsko oscilovanje frekvencom ω jedine dozvoljene vrednosti energije su $n\hbar\omega$, gde je n prirodan broj a $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} Js$ je konstanta.

Kada se uvede ovakva pretpostavka jasno je da se usrednjavanje energije u formuli (1.55) umesto po kontinuiranim vrednostima od 0 do ∞ vrši po nizu jednako udaljenih tačaka. Pošto je vrednost konstante $\hbar$ mala i rastojanja izmedju tačaka $\hbar\omega$ su vrlo mala (sem naravno kad $\omega \to \infty$), tako da je ovakva zamena u nekom smislu opravdana. Za srednju vrednost energije oscilatora frekvence ω onda se dobija

$$\langle E_\omega \rangle = \frac{\sum_0^\infty n\hbar\omega e^{-\beta n\hbar\omega}}{\sum_0^\infty e^{-\beta n\hbar\omega}} = -\frac{d}{d\beta} \log \sum_0^\infty e^{-\beta n\hbar\omega} = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. =, \tag{1.61}$$

pri čemu se u izračunavanju koristi da je suma geometrijskog reda $1 + a + a^2 + \cdots = \frac{1}{1-a}$, za $|a| < 1$. U klasičnom limesu $T \to \infty$ odnosno $\beta \to 0$ približno je $e^{\beta\hbar\omega} = 1 + \beta\hbar\omega$, pa je $\langle E_\omega \rangle = \frac{1}{\beta} = kT$, odnosno dobijamo klasični rezultat (1.55). Koristeći izraz (1.57) za broj oscilatora $N(\omega)$ za spektralnu raspodelu dobija se tzv. Planck-ova raspodela

$$u(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \tag{1.62}$$

Koristeći Planck-ovu raspodelu za ukupnu izračenu energiju dobijamo

$$\mathcal{U}(T) = \int u(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} (\frac{kT}{\hbar})^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{k^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15} T^4. \tag{1.63}$$

Vrednost integrala koji se dobija posle uvodjenja smene $x = \beta\hbar\omega$ je $\frac{\pi^4}{15}$. kao što smo i napisali. Kada se u formulu (1.63) zamene numeričke vrednosti konstanti k, $\hbar$, c i π, za koeficijent proporcionalnosti izmedju $\mathcal{U}$ i T^4 dobija se upravo eksperimentalno odredjena vrednost Stefan-Boltznmann-ove konstante σ.

1.5 Fotoefekt

Fotoefekt je otkrio Hertz 1887. U drugoj polovini 19. veka vršen je veliki broj eksperimenata u kojima se ispitivao prolazak električne struje kroz katodnu cev: katodna cev je staklena cev sa dve elektrode ispunjena razredjenim gasom. Posebno važno otkriće bilo je da se u cevi pri veoma niskim pritiscima odnosno u vakuumu detektuju 'katodni zraci', karakteristični po tome što stvaraju senku na suprotnom zidu cevi i skreću u električnom polju. Thomson je pretpostavio da su katodni zraci u stvari naelektrisane čestice: 1987. precizno je za njih izmerio odnos naelektrisanja i mase $\frac{e}{m}$ i dobio rezultat 1836 puta veći nego kod jonizovanog vodonikovog atoma. Ovo otkriće bilo je u stvari otkriće elektrona.

U Hertz-ovom eksperimentu katoda u katodnoj cevi osvetljavana je ultraljubičastim zracima i merena je struja kroz cev. Pošto efekat postoji i kada je u cevi vakuum, pretpostavljeno je da su nosioci struje elektroni izbijeni iz katode, a to je Lenard 1900. godine potvrdio merenjem odnosa $\frac{e}{m}$. Zavisnost struje koja se meri od napona izmedju elektroda je kao na slici: $\boxed{\text{Slika: Fotoefekt, j(V)}}$ struja praktično ne zavisi od napona osim za njegove negativne vrednosti, i anulira se pri odredjenoj vrednosti $V = -V_m$. To znači da elektroni izbijeni iz katode imaju nenultu kinetičku energiju čija maksimalna vrednost $E_m = eV_m$. Mada je za $V > 0$ struja proporcionalna intenzitetu upadnog zračenja, E_m od intenziteta zračenja uopšte ne zavisi.

I u ovom slučaju relativno lako se vidi da klasična teorija elektromagnetnog zračenja ne može da da objašnjenje eksperimentalnih rezultata. Kao što smo rekli klasično gledano energija koju nosi elektromagnetni talas je proporcionalna kvadratu njegove amplitude odnosno intenzitetu svetlosti: prema tome i karakteristična energija E_m koja se prenosi elektronu trebalo bi da zavisi od intenziteta, a u eksperimentu se to ne dobija. Detaljniji račun pokazuje da bi u klasičnom opisu trebalo da postoji i drugi efekt: pošto energija elektromagnetnog talasa nije lokalizovana, za njen prenos na elektrone potrebno je relativno dugo vreme, za uslove u opisanom eksperimentu oko 1 ili 2 minuta. To medjutim nije opservirano.

Objašnjenje fotoefekta dao je 1905. Einstein razvijajući Planck-ovu hipotezu o energiji elektromagnetnih talasa. On je pretpostavio da se

svetlost brzinom c prenosi u delićima ili svetlosnim kvantima koji su lokalizovani i nose energiju $\hbar\omega$.

Kvantima svetlosti Lewis je 1926. dao ime fotoni. U sudaru sa katodom energija fotona se gotovo trenutno apsorbuje i prenosi na elektrone; ukoliko foton interaguje samo sa jednim elektronom iz zakona održanja energije imamo

$$E_m = \frac{1}{2}mv^2 = \hbar\omega - A, \tag{1.64}$$

gde je A 'izlazni rad' elektrona tj. potencijalna energija kojom je elektron vezan u kristalnu rešetku katode. (1.64) je čuvena Einstein-ova jednačina fotoefekta.

Einstein-ova teorija izmedju ostalog predvidja linearnu zavisnost izmedju E_m i frekvence upadnog zračenja ω: $\boxed{\text{Slika: Fotoefekt 2, } E(\omega)}$ ovu zavisnost je 1916. proverio i potvrdio Millikan, i to je bio jedan od velikih trijumfa kvantne teorije. Takodje, odredjivanjem koeficijenta pravca prave na grafiku, Millikan je izmerio Planck-ovu konstante $\hbar$ koja se sa greškom od 0.5% poklopila sa od ranije poznatom vrednošću.

1.6 Compton-ov efekt

Einstein-ovo objašnjenje fotoefekta po kome se energija elektromagnetnog talasa predaje u procesu sudara elektrona sa kvantom svetlosti mnogi fizičari nisu mogli da prihvate jer je u stvari predstavljalo odustajanje od klasične teorije elektromagnetnog zračenja: kvanti svetlosti ponašaju se kao čestice. Medjutim Einstein-ova ideja je konačno potvrdjena otkrićem i teorijskim objašnjenjem Compton-ovog efekta, u kome se fotonima pripisuje ne samo energija $E = \hbar\omega$ nego i impuls $\vec{p}$ čija je vrednost, u skladu sa specijalnom teorijom relativnosti, $|\vec{p}| = \frac{E}{c} = \hbar k$.

Compton-ov eksperiment iz 1923. sastojao se u merenju otklona snopa X-zraka pri prolasku kroz tanke metalne listove. Dobijena veza izmedju talasne dužine λ upadnog X-zraka i talasne duzine λ' zraka rasejanog pod uglom θ je

$$\lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta). \tag{1.65}$$

Ova veza ne zavisi od vrste metala na kome se X-zraci rasejavaju, što ukazuje da zračenje ne interaguje sa atomima metala; sem toga, konstanta λ_C, tzv. Compton-ova talasna dužina ne zavisi od frekvence odnosno talasne dužine λ X-zraka.

Compton je pretpostavio da je proces koji se dešava u metalu zapravo sudar fotona sa elektronom koji miruje. Ova pretpostavka je opravdana jer, kao što smo videli, tipične energije vezivanja elektrona u metalu su reda veličine energija ultraljubičastog zračenja tj. za nekoliko redova veličine manje od energije X-zraka. Označimo dakle energiju upadnog fotona sa $\hbar\omega$: pošto se fotoni kreću brzinom svetlosti njihova masa mirovanja je nula, a impuls je jednak $\hbar\vec{k}$ gde je $\vec{k}$ talasni broj. Sudar fotona sa elektronom je elastičan odnosno u njemu se održavaju energija i impuls sistema. Elektron ima masu m i pre sudara sa fotonom miruje, kao na slici. Sličica za Compton-ovo rasejanje. Označimo energiju i impuls fotona posle sudara sa $\hbar\omega'$ i $\hbar\vec{k}'$, impuls elektrona posle sudara sa $\vec{p}'$, a uglove rasejanja fotona i elektrona sa θ i φ. Zakoni održanja (zapisani naravno relativistički) glase

$$\hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + \sqrt{p'^2c^2 + m^2c^4},$$

$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}', \qquad \text{tj.} \qquad \begin{aligned} \hbar k &= \hbar k' \cos\theta + p'\cos\varphi \\ 0 &= \hbar k' \sin\theta - p' \sin\varphi. \end{aligned}$$

Rešavanjem ove tri jednačine tj. eliminacijom ugla φ i impulsa p' dobijamo

$$\frac{1}{\omega'} = \frac{1}{\omega} + \frac{\hbar}{mc^2}(1 - \cos\theta), \tag{1.66}$$

što daje formulu (1.65) kad se sa frekvenci predje na talasne dužine. Pri tome je $\lambda_C = \frac{h}{mc} = 0.243 \cdot 10^{-11} m$, u skladu sa eksperimentalno dobijenim vrednostima. U kasnijim eksperimentima (Bothe i Wilson 1923., Bothe i Geiger 1925., Bless 1927.) opservirani su i elektroni posle sudara sa fotonom i merena je njihova energija, a takodje je potvrdjeno da se elektron pojavljuje istovremeno sa rasejanim fotonom tj. da je sudar 'trenutan'.

Fotoefekt i Compton-ov efekt pokazuju da je priroda elektromagnetnog zračenja dualna: u ovim eksperimentima detektuju se kvanti svetlosti koji su prostorno lokalizovani tj. ponašaju se kao čestice odredjene energije i impulsa. Sa druge strane u brojnim ranijim eksperimentima koji datiraju još od Young-ovog interferencionog eksperimenta iz 1803. dobro su i detaljno utvrdjene talasne osobine svetlosti. Kao što ćemo videti, slična dualnost u ponašanju uskoro je otkrivena i kod materijalnih čestica, tj. pronadjeno je da se u nekim situacijama one ponašaju kao talasi.

1.7 INTERFERENCIJA

Jedan od ogleda koji najjasnije pokazuju razliku izmedju čestičnog i talasnog ponašanja je Young-ov interferencioni eksperiment na dva otvora i zato se vrlo često koristi u misaonim i realnim kvantnomehaničkim eksperimentima. Njegov uzbudljiv prikaz može se naći u Feynman-ovom opštem kursu fizike [4]: mi ćemo ga opisati ukratko da bismo prodiskutovali konačne formule.

U eksperimentu monohromatski izvor svetlosti I frekvence ω je postavljen ispred zaklona na kome postoje dva linijska otvora 1 i 2, Slika: interferencija na dva otvora. npr. dva proreza na metalnoj ploči, koji su na medjusobnom rastojanju d.

[4] *The Feynman Lectures on Physics*, R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, Addison Wesley, 1970.

Svetlost prolazi kroz otvore i detektuje se na ekranu koji je na rastojanju $l \gg d$ od zaklona.

Pošto su tačke 1 i 2 na istom talasnom frontu talasa koji dolazi iz izvora, elektromagnetno polje u ovim tačkama ima isti fazu. U skladu sa Huygens-ovim principom (koji u stvari odražava linearnost Maxwell-ovih jednačina) svaki od otvora je izvor 'sekundarnih talasa' iste frekvence i faze. Izračunajmo koliko je električno polje $\vec{E}$ u tački označenoj sa y na slici. Ovo polje je zbir polja $\vec{E}_1$ prvog i $\vec{E}_2$ drugog elektromagnetnog talasa. Talasi koje sabiramo zapravo nisu ravni talasi nego su najpribližnije cilindrični, ali ova činjenica nije toliko bitna jer slabljenje amplitude sa rastojanjem koje ovde postoji daje efekte višeg reda i može se zanemariti. Dakle, imamo

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_0 \sin(kr_1 - \omega t), \qquad \vec{E}_2 = \vec{E}_0 \sin(kr_2 - \omega t), \tag{1.67}$$

gde sa slike vidimo da su rastojanja r_1 i r_2

$$r_1^2 = l^2 + (y - \frac{d}{2})^2, \qquad r_2^2 = l^2 + (y + \frac{d}{2})^2. \tag{1.68}$$

Prema tome, ukupno električno polje je

$$\vec{E} = 2\vec{E}_0 \cos\frac{k(r_2 - r_1)}{2} \sin\frac{kr_1 + kr_2 - 2\omega t}{2} \approx 2\vec{E}_0 \cos\frac{k(r_2 - r_1)}{2} \sin(kr - \omega t), \tag{1.69}$$

a fazna razlika $\Delta = k(r_2 - r_1)$ u uslovima kada je d malo, $l \gg d, y$ sa tačnošću do prvog reda je jednaka

$$r_2 - r_1 = l\Big(\sqrt{1 + (\frac{y}{l} + \frac{d}{2l})^2} - \sqrt{1 + (\frac{y}{l} - \frac{d}{2l})^2}\Big) = \frac{yd}{l}. \tag{1.70}$$

Iz formule za $\vec{E}$ vidi se da se talasi pojačavaju tj. konstruktivno interferferišu kada je $|\cos\frac{\Delta}{2}| = 1$ i tada se na ekranu pojavljuju svetle pruge:

$$\frac{\Delta}{2} = n\pi, \quad \text{ili} \quad y = \frac{\lambda l}{d}\, n. \tag{1.71}$$

U slučaju destruktivne interferencija imamo tamne pruge na rastojanjima

$$y = \frac{\lambda l}{d}\,(n + \frac{1}{2}). \tag{1.72}$$

U centru ekrana, $y = 0$, je svetla pruga.

Jasno je da, kada bi izvor I u eksperimentu sa istom geometrijom emitovao čestice, na ekranu bismo dobili drugačiju sliku: dve svetle pruge na mestima preseka pravih $I1$ i $I2$ i ravni ekrana; naravno, u sredini ekrana je zatamnjenje. To je zato što u ovom slučaju čestice putuju pravolinijski i njihova putanja je dobro lokalizovana, dok se talasi prostiru u celom prostoru i u svim tačkama interferiraju. Pojava interferencije vidi se i u mnogim drugim fizičkim situacijama, na primer kada imamo više otvora i taj slučaj difrakcije na rešetki biće nam važan kasnije.

1.8 Atomski spektri i model atoma

Krajem 19. veka intenzivno su ispitivani i mereni i atomski spektri. Tipična eksperimentalna aparatura kojom se odredjuje emisioni spektar sastoji se od staklene cevi ispunjene jednoatomskim gasom kroz koju se vrši električno pražnjenje, čime se gasu predaje energija. U procesu relaksacije atomi gasa emituju elektromagnetno zračenje: zračenje se razlaže npr. prizmom po frekvencama i odgovarajući spektar se snima.

Najvažniji fenomen koji se uočava je da su spektri atoma linijski a ne kontinualni. Svaki hemijski element ima svoj karakterističan spektar, a linije u spektru grupišu se u serije i zgušnjavaju do tzv. granice serije. Najjednostavniji spektar ima vodonik: pokušavajući da opiše njegovu strukturu Balmer je 1885. našao empirijsku formulu za talasne dužine grupe linija u vidljivom delu vodonikovog spektra koja glasi

$$\lambda = 3646\,\frac{n^2}{n^2-4}, \tag{1.73}$$

ako se talasne dužine mere u angstremima, Å$=10^{-10}m$. n je prirodan broj, $n \geq 3$. Istražujući dalje, Rydberg je 1890. ovu formulu napisao u pogodnijem obliku

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\,(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}), \tag{1.74}$$

gde je $R_H = 1.097 \cdot 10^7 m^{-1}$ Rydberg-ova konstanta za vodonik. Poslednja formula može da se uopšti,

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\,(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}), \tag{1.75}$$

i tada opisuje i druge serije u vodonikovom spektru (Lyman-ovu, Paschen-ovu, Brackett-ovu, Pfund-ovu). Za alkalne elemente spektralne formule imaju sličnu strukturu

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{(m-a)^2} - \frac{1}{(n-b)^2}\right). \tag{1.76}$$

Rydberg-ova formula (1.75) izgleda toliko jednostavno da se nameće ideja kako ona u sebi sadrži neki fundamentalni fizički zakon. Prvi korak u njenom objašnjenju bio je da se razume struktura vodonikovog i drugih atoma.

Od Thomson-ovog otkrića elektrona postalo je jasno da se atomi sastoje od elektrona, i pošto su električno neutralni, od pozitivno naelektrisanog ostatka. Ovo je potvrdjeno u eksperimentima rasejanja X-zraka na atomima (Barkla 1909.) u kojima je utvrdjeno da je broj elektrona u atomu Z približno jednak polovini atomske mase. Prva, Thomson-ova pretpostavka bila je da je pozitivno naelektrisanje manje-više uniformno rasporedjeno u atomu i taj model je ispitivan u eksperimentima rasejanja α-čestica na tankim metalnim listovima (Rutherford 1909.). Analizirajući rezultate eksperimenata

Rutherford je zaključio da se oni ne slažu sa Thomson-ovim modelom, jer model predvidja da je broj čestica rasejanih pod velikim uglovima (većim od $\pi/2$) toliko mali da praktično ne bi bile detektovane u eksperimentu što nije bio slučaj. Rutherford je pretpostavio da je pozitivno naelektrisanje (a time i masa) skoncentrisano u centru, ' jezgru' atoma i izračunao presek rasejanja α-čestica u Coulomb-ovom polju jezgra. Pošto već znamo oblik trajektorije čestice u Newton-ovom centralnom potencijalu $V(r) = \frac{\alpha}{r}$ (1.18), skiciraćemo ovo izvodjenje.

Na metu, tj. centar polja pada snop α-čestica koji se u početnom trenutku odnosno asimptotski, u $t = -\infty$ kreće pravolinijski duž x-ose. Slika za Rutherford-ovu formulu. Čestice u snopu u početku imaju istu brzinu $\vec{v}$, tj. kinetičku i ukupnu energiju $E = \frac{mv^2}{2}$, a različit parametar sudara ρ. ρ je normalno rastojanje izmedju upadne asimptote čestice i centra sudara: u zavisnosti od parametra sudara čestice skreću pod različitim uglovima. Trajektoriju kao ranije opisujemo zavisnošću $\theta(r)$; ugao skretanja χ, ugao izmedju upadne i izlazne asimptote je $\chi = \pi - 2\theta$. Moment impulsa čestice je $|\vec{L}| = mv\rho$. Integraljenjem jednačine za trajektoriju (1.18) xa ugao θ dobijamo

$$\theta = \int_{r_m}^{\infty} \frac{\frac{\rho}{r}\, dr}{\sqrt{1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{2\alpha}{mv^2 r}}} = \arccos \frac{\frac{\alpha}{mv^2\rho}}{\sqrt{1 + (\frac{\alpha}{mv^2\rho})^2}}, \tag{1.77}$$

odnosno

$$\rho = \frac{\alpha}{mv^2} \cot \frac{\chi}{2} . \tag{1.78}$$

Diferencijalni presek $d\sigma$ za rasejanje snopa definiše se kao broj čestica koje se u jedinici vremena raseju u prostorni ugao $d\Omega$ podeljen fluksom upadnog snopa. Kada kao u ovom slučaju imamo aksijalnu simetriju, diferencijalni presek je

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\rho}{\sin\chi} |\frac{d\rho}{d\chi}|, \tag{1.79}$$

pa zamenom formule (1.78) u poslednju jednakost dobijamo

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{4m^2v^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\chi}{2}}. \tag{1.80}$$

Ovo je Rutherford-ova formula za efikasni presek rasejanja u Coulomb-ovom potencijalu. Neposredno posle njenog izvodjenja u eksperimentima Geiger-a i Marsden-a 1911. mereno je i potvrdjeno da je efikasni presek za rasejanje α-čestica na atomima opisan baš ovom formulom. To znači da je atom skoro 'prazan' odnosno da je jezgro veoma malih dimenzija u odnosu na atom: Rutherford je dimenzije jezgra (ispravno) procenio na $10^{-14}m$. Interesantno je da i nereltivistički kvantnomehanički račun, kao što ćemo kasnije videti, daje u vodećem redu potpuno istu zavisnost. To je u neku bila ruku srećna okolnost, za fiziku jer jejednačina (1.80) navela Rutherford-a da predloži planetarni model atoma koji je kasnije modifikovao Bohr, a Bohr-ov model bio je od ključnog značaja za nastajanje kvantne mehanike.

Rutherford-ov planetarni model atoma je jednostavan: u centru atoma nalazi se masivno pozitivno naelektrisano jezgro oko koga kruže elektroni kao planete oko Sunca. Nedostatak modela vidi se odmah: elektroni (za razliku od planeta) pri kružnom kretanju oko jezgra zrače elektromagnetne talase, i u tom procesu sva energija elektrona brzo se izrači i elektron pada na jezgro: Rutherford-ov atom nije stabilan.

1913. Bohr je predložio model koji ove osnovne probleme rešava na postulativan način. Model se bazira se na dve osnovne pretpostavke:

1. Elektroni u atomu kreću se oko jezgra po kružnim putanjama, ali dozvoljene su samo orbite na kojima je moment impulsa kvantovan i ima vrednosti $|\vec{L}| = n\hbar$ gde je n prirodan broj.

2. Na ovim 'stacionarnim' putanjama elektron ne zrači; zrači samo pri prelazu sa jedne na drugu orbitu i to frekvencom $\hbar\omega = E_i - E_f$, gde su E_i i E_f energije elektrona na inicijalnoj i finalnoj orbiti.

Jednostavnim klasičnim računom vidi se da se iz Bohr-ovog modela dobija Rydberg-ova formula za emisioni spektar vodonika. Pri kretanju elektrona po krugu njegovo centripetalno ubrzanje potiče od elektrostatičke privlačne sile jezgra pa imamo

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}, \quad \text{tj.} \quad r = \frac{e^2}{mv^2}. \tag{1.81}$$

To znači da, ako je moment impulsa kvantovan, njegovoj n-toj vrednosti

$$L_n = n\hbar\omega = mr_n v_n, \tag{1.82}$$

odgovaraju brzina i poluprečnik putanje

$$v_n = \frac{e^2}{n\hbar} \quad \text{i} \quad r_n = \frac{\hbar^2}{me^2}\, n^2 = a_B n^2, \tag{1.83}$$

kao i energija

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{e^2}{r_n} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}. \tag{1.84}$$

$a_B = 5.3 \cdot 10^{-11} m$ je Bohr-ov radijus i definiše red veličine dimenzija atoma odnosno skalu atomske fizike. Kada se u poslednjoj formuli zamene vrednosti za masu i naelektrisanje elektrona i izračuna razlika $E_n - E_m$ dobija se (1.75) kao i slaganje sa eksperimentalno izmerenom vrednošću Rydberg-ove konstante R_H.

Bohr-ovi postulati ukazuju da su u prirodi osim energije kvantovane i druge fizičke veličine, i pitanje koje se prirodno nameće je da li postoji neki opšti, teorijski princip koji ih karakteriše. Specijalno na primer, da li postoji neka veza izmedju Planck-ovog i Bohr-ovih postulata kvantovanja. Ovaj princip formulisao je Sommerfeld 1915. i naziva se Sommerfeld-ovo pravilo:

STABILNE KVANTNE ORBITE HAMILTON-OVOG SISTEMA OPISANOG HAMILTONIJANOM $H(q_i, p_i)$ ZADATE SU USLOVOM

$$\oint p_k dq_k = 2\pi\hbar\, n_k, \quad k = 1, \ldots n, \tag{1.85}$$

GDE SU n_k POZITIVNI CELI BROJEVI, A INTEGRAL SE RAČUNA PO JEDNOM PERIODU ORBITE.

Lako se vidi da se Sommerfeld-ovo pravilo kvantovanja može primeniti na jednodimenzioni harmonijski oscilator koji je opisan hamiltonijanom

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{1.86}$$

Opšte rešenje klasičnih Hamilton-ovih jednačina kretanja je u ovom slučaju

$$x = a\cos(\omega t + \phi), \qquad p = -m\omega a \sin(\omega t + \phi). \tag{1.87}$$

Ako uvrstimo ovo rešenje u (1.85) i integralimo po jednom periodu $T = \frac{2\pi}{\omega}$ dobijamo

$$\oint p\, dx = \int_0^T m\omega^2 a^2 \sin^2(\omega t + \phi) = m\omega a^2. \tag{1.88}$$

Sommerfeld-ovo pravilo onda daje

$$m\omega a^2 = 2\hbar n, \tag{1.89}$$

a za energiju oscilatora se dobija

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2 = n\hbar\omega \tag{1.90}$$

odnosno, Planck-ova formula.

S druge strane, već smo videli da se u slučaju kretanja u centralnom potencijalu održava moment impulsa,

$$p_\varphi = 0, \qquad p_\theta = L. \tag{1.91}$$

Prema tome, pravilo kvantovanja primenjeno na promenljive θ i p_θ daje direktno

$$\oint p_\theta\, d\theta = 2\pi L = 2\pi\hbar n, \tag{1.92}$$

tj. $L = n\hbar$. Ako pravilo primenimo na drugi par promenljivih r i p_r, može da se da se dobije kvantovanje energije (1.84), i to ne samo za kružne nego i za eliptične orbite (u tom slučaju je r_n velika poluosa elipse). Interesantno je da se Sommerfeld-ovo pravilo može primeniti i na relativističku generalizaciju Bohr-ovog modela i da korektno daje finu strukturu spektra vodonikovog atoma (Bohr 1915., Sommerfeld 1916.) koju je u eksperimentu otkrio Michelson 1891.

Sommerfeld-ovo pravilo imalo je i konceptualni i teorijski značaj zato što je kvantifikovalo vezu kvantovanje kod finitnog kretanja tj. vezanih stanja, a sem toga ukazalo na značaj kanonskih promenljivih, posebno promenljivih dejstvo-ugao. Medjutim fizički i intuitivno, za bolje razumevanje kvantne prirode čestica i dalji razvoj ideja kvantovanja možda je bio važniji drugi aspekt Bohr-ovog modela: ideja o talasnoj prirodi elektrona. Naime, ako bismo elektronu na n-toj orbiti pripisali talasnu dužinu

$$\lambda_n = \frac{h}{p_n} = \frac{2\pi\hbar}{mv_n}, \tag{1.93}$$

vidimo da važi $n\lambda_n = 2\pi r_n$, odnosno, da se na obimu kruga koji predstavlja trajektoriju elektrona nalazi tačno n talasnih dužina hipotetičkog, elektronu pripisanog talasa. Znači, kvantovanje momenta impulsa možemo interpretirati kao uslov da su moguće samo one orbite na kojima je elektron stojeći talas. Važna osobina stojećih talasa je da ne prenose energiju, što može da se poveže sa činjenicom da na stacionarnim orbitama elektron ne zrači. Iako ova interpretacija deluje možda malo proizvoljno, ipak može se reći da je u Bohr-ovom modelu začeta ideja da su čestice u nekom smislu – talasi.

1.9 Talasno-čestični dualizam

De Broglie je 1924. izneo ideju da ne postoji jasna granica izmedju čestica i talasa: kao što se elektromagnetnim talasima, npr. u Compton-ovom efektu, može pripisati čestična priroda, tako i čestice imaju talasni karakter. Ili, iskazano u formi postulata:

Čestici koja se kreće sa impulsom $\vec{p}$ i energijom E može da se pridruži talas koji ima frekvencu $\omega = \frac{E}{\hbar}$ i talasni broj $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, odnosno talasnu dužinu $\lambda = \frac{h}{p}$. Kretanje čestice pri tome može da se opiše kao propagacija talasa.

U slučaju elektromagnetnih talasa zaista važi $\omega = kc$ odnosno $E = pc$. Za slobodnu nerelativističku česticu imamo medjutim da je $E = \frac{p^2}{2m}$, tako da je disperziona relacija za slobodan 'elektronski talas' po de Broglie-vom postulatu

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}. \tag{1.94}$$

Zapazimo da je de Broglie pretpostavio takodje i da je jednačina kretanja čestica neka vrsta talasne jednačine, koja osim ravnih talasa za rešenja može imati i talasne pakete. Talasni paket predstavlja zbir, odnosno linearnu kombinaciju ravnih talasa koja je lokalizovana i u prostoru tako da liči na česticu, i po impulsu tako da možemo govoriti o njenoj brzini. Talasna jednačina koja opisuje ponašanje čestica zapravo je Schrödinger-ova jednačina.

Prirodno je pretpostaviti da se talasni aspekti ponašanja materijalnih čestica manifestuju samo na rastojanjima koja su reda veličine de Broglieeve talasne dužine. Ako izračunamo ovu talasnu dužinu npr. za elektron kinetičke energije $E_k = 10\,eV$, dobijamo $\lambda = 3.9 \cdot 10^{-10}m$. Ova talasna dužina nije toliko mala, reda je veličine atoma ili medjuatomskih rastojanja u kristalu. Zato su talasne osobine elektona prvi put eksperimentalno potvrdjene upravo difrakcijom elektrona na kristalima, na kristalu nikla u eksperimentu Davisson-a i Germer-a 1927. i na kristalu zlata u eksperimentu Thomson-a 1928. Uskoro posle toga Estermann, Frisch i Stern dokazali su postojanje difrakcije pri rasejanju helijumovih atoma. Do današnjeg vremena izvedeni su brojni difrakcioni i interferencioni eksperimenti, ne samo sa elektronima i neutronima nego i sa velikim organskim molekulima i to u (tehnički zahtevnijoj) varijanti interferencije na dva otvora. U tim eksperimentima nadjena je interferencija čime dokazana talasna priroda čestica.

Talasno-čestični dualizam je jedna od realizacija 'komplementarnosti', pojma koji je kasnije uveo Bohr da bi neke od kvantnih fenomena opisao klasičnim ili skoro-klasičnim jezikom, i u tom smislu nemoguće ga je na neki jednostavan način 'objasniti'. Ovaj dualizam ima precizan opis u kvantnoj teoriji polja, u kojoj označava mogućnost da se kvantno polje prikaže u koordinatnoj ili u impulsnoj reprezentaciji.

1.10 Schrödinger-ova jednačina

Ukoliko je slobodna čestica koja ima masu m, impuls $\vec{p}$ i energiju $E = \frac{p^2}{2m}$ stvarno opisana ravnim talasom

$$\Psi(t, \vec{r}) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}, \tag{1.95}$$

gde su talasni vektor i frekvenca dati sa $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$, onda je najjednostavnija jednačina koja daje ovakvu disperzionu relaciju jednačina

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi, \tag{1.96}$$

jer, kao što smo videli, pri delovanju na ravan talas izvod $i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}$ se svodi na množenje sa E, a grdijent $-i\hbar\nabla$ na množenje sa $\vec{p}$. I u nekom, matimatički preciznijem, smislu Schrödinger-ova jednačina se dobija zamenom vektora impulsa čestice $\vec{p}$ operatorom $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$, i ta 'zamena' zapravo je 'kvantovanje'. U slučaju mehanike tj. sistema sa konačnim brojem stepeni slobode, postupak kvantovanja odnosno reprezentovanja koordinate i impulsa operatorima je u osnovi jednoznačan. Ukoliko čestica nije slobodna nego se kreće u potencijalu $V(\vec{r},t)$, Schrödinger-ova jednačina takodje je ekvialentna izrazu za energiju čestice $E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r},t)$ i glasi

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi. \tag{1.97}$$

Interesantno je napomenuti da su i Schrödinger, a i Born i Jordan za matričnu mehaniku pokušali da jednačinu kretanja formulišu kao varijacioni princip odnosno uslov za ekstremum funkcionala, analogno principu najmanjeg dejstva u klasičnoj mehanici: danas, medjutim znamo da to nije moguće. Kao što nije moguće ni 'izvesti' Schrödinger-ovu jednačinu: ona je osnovna jednačina koja opisuje dinamiku kvantnih sistema i može se reći, kao i za drugi Newton-ov zakon, da sledi direktno iz eksperimenta.

1.11 Zadaci

Glava 2

Jednodimenzioni sistemi

2.1 Harmonijski oscilator

Da bismo na neki način zaokružili istorijski uvod i odmah pokazali kako se iz Schrödinger-ove jednačine dobija Planck-ov postulat kvantovanja, prvi od jednodimenzionih sistema koji ćemo kvantovati je harmonijski oscilator. Oscilator svakako nije najjednostavniji od sistema a nije ni istorijski prvi (u svoja čuvena četiri rada iz 1926., Schrödinger je u prvom rešio jednačinu za vodonikov atom u drugom za harmonijski oscilator), ali je verovatno fizički najvažniji. Alternativni, veoma važan i u stvari jednostavniji, operatorski način odredjivanja stanja i energija harmonijskog oscilatora biće dat na kraju treće glave i tek sa time će kvantnomehanički opis ovog fizičkog sistema biti kompletiran.

Potencijalna energija čestice koja vrši harmonijsko oscilovanje oko ravnotežnog položaja u jednoj dimenziji je

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \tag{2.1}$$

gde je m masa oscilatora a ω njegova sopstvena frekvenca. Zapravo svaki sistem u okolini svakog svog minimuma a potencijalne energije ponaša se (približno) kao oscilator, jer u okolini minimuma potencijal možemo da razvijemo u Taylor-ov red

$$V(x) = V(a) + \frac{1}{2}\, V''(a)(x-a)^2 + \dots \tag{2.2}$$

i zadržimo samo prva dva člana koji daju najveći doprinos. Naravno, iz uslova da je a minimum sledi $V'(a) = 0$ i $V''(a) \geq 0$.

Dakle, hamiltonijan harmonijskog oscilatora dat je sa

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \tag{2.3}$$

i Schrödinger-ova jednačina glasi

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi(x,t), \tag{2.4}$$

gde je $\Psi(x,t)$ talasna funkcija koja opisuje stanje oscilatora i zavisi kao što smo rekli od jedne prostorne koordinate i vremena. Ova jednačina nije jednostavna jer je parcijalna diferencijalna jednačina u kojoj nezavisno promenljiva x figuriše eksplicitno; medjutim kao i uvek jednačina je linearna po Ψ. Zato prvo tražimo njena partikularna rešenja: neka od njih mogu da se nadju razdvajanjem promenljivih t i x, tj. pretpostavljajući da je funkcija Ψ proizvod oblika

$$\Psi(x,t)=T(t)\psi(x). \tag{2.5}$$

Deleći sa $T(t)\psi(x)$, Schrödinger-ovu jednačinu možemo da se prepišemo kao

$$i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2, \tag{2.6}$$

i u njoj sada figurišu obični izvodi po vremenu i koordinati. Pošto leva strana jednačine zavisi samo od promenljive t a desna samo od promenljive x a jednake su, one moraju biti konstanta koju ćemo označiti, zbog dimenzija, sa E. Kasnije ćemo videti da je E zaista vrednost energije dobijenog stanja. Jednačina za funkciju $T(t)$

$$i\hbar\frac{dT}{dt}=ET, \tag{2.7}$$

je jednostavna i njeno rešenje je eksponencijalna funkcija,

$$T(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{2.8}$$

Preostala jednačina za prostorni deo talasne funkcije $\psi(x)$ zove se vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina. Ona je uvek, pa i ovde, komplikovanija,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi. \tag{2.9}$$

Njen oblik možemo nešto pojednostaviti ako sve dimenzione konstante 'spakujemo' u jednu, uvodeći umesto x bezdimenzionu nezavisno promenljivu ξ,

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x. \tag{2.10}$$

Ako izvod po ξ označimo sa $\psi'=\frac{d\psi}{d\xi}$, iz (2.9) dobijamo

$$\psi''+(\frac{2E}{\hbar\omega}-\xi^2)\psi=0. \tag{2.11}$$

Naravno, linearna smena iz x u ξ ne može suštinski da uprosti Schrödinger-ovu jednačinu i (2.11) nema rešenja koja se izražavaju na jednostavan način preko elementarnih funkcija nego su to tzv. specijalne funkcije. Ipak o rešenjima možemo dosta da saznamo ispitujući osobine jednačine i to metodama koje su u velikoj meri intuitivne. Nama trebaju fizička rešenja, a to izmedju ostalog znači da ψ ni u jednoj tački ne divergira. U klasičnoj teoriji polja ovaj zahtev obično znači da su fizičke veličine kao gustina energije ili impuls polja svuda konačne; u kvantnoj mehanici ovakav uslov na talasnu funkciju značiće da gustina verovatnoće nalaženja čestice u svakoj tački ima konačnu vrednost.

Pošto su u jednačini (2.11) sve funkcije neprekidne, treba da proverimo ponašanje rešenja samo u asimptotskim oblastima, $x \to \pm\infty$. U beskonačno udaljenim tačkama tj. za dovoljno veliko ξ važi $\xi \gg \frac{2E}{\hbar\omega}$, tako da u (2.11) prvi član u zagradi možemo da zanemarimo i jednačina postaje

$$\psi'' - \xi^2\psi = 0. \tag{2.12}$$

Lako može da se proveri da su asimptotska rešenja ove jednačine $e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}$. Rešenje sa plusom u eksponentu raste u beskonačnosti pa ćemo da ga odbacimo i egzaktno rešenje tražimo u obliku

$$\psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi); \tag{2.13}$$

u stvari ovom smenom pokušavamo da nametnemo ispravnu asimptotiku talasnoj funkciji. Zamenjujući izraz (2.13) u jednačinu (2.11) dobijamo da nepoznata funkcija f treba da zadovoljava

$$f'' - 2\xi f' + \lambda f = 0, \tag{2.14}$$

gde je

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1. \tag{2.15}$$

Poslednju jednačinu rešavamo tako što f razvijemo u Taylor-ov red

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k, \tag{2.16}$$

a pošto je k nemi indeks sumiranja, iz

$$f'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k\, \xi^{k-1}, \tag{2.17}$$

$$f''(\xi) = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k\, \xi^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2}\, \xi^k \tag{2.18}$$

zamenom u (2.14) dobijamo

$$\sum_{k=0}^{\infty}\Big((k+2)(k+1)a_{k+2}-(2k-\lambda)a_k\Big)\,\xi^k=0. \tag{2.19}$$

Ova jednakost treba da bude zadovoljena za proizvoljne vrednosti promenljive ξ i zato sledi da svi koeficijenti uz ξ^k moraju biti jednaki nuli. Dobijamo rekurentnu relaciju

$$a_{k+2}=\frac{2k-\lambda}{(k+2)(k+1)}\,a_k \tag{2.20}$$

za koeficijente u razvoju a_k. Svi parni koeficijenti mogu se izraziti preko a_0 a svi neparni preko a_1, u skladu sa činjenicom da je (2.14) obična diferencijalna jednačina drugog reda pa njena rešenja zavise od dve konstante integracije.

Asimptotsko ponašanje funkcije $f(\xi)$ sada se prenosi na ponašanje koeficijenata a_k za $k\to\infty$; proverićemo ga ponovo. Za velike, parne na primer, stepene iz rekurentne relacije (2.20) približno dobijamo

$$a_{2k+2}=\frac{4k-\lambda}{(2k+2)(2k+1)}\,a_{2k}\sim\frac{1}{k+1}\,a_{2k}=\dots=\frac{1}{(k+1)!}\,a_0, \tag{2.21}$$

što je ponašanje koeficijenata u razvoju funkcije e^{ξ^2}! Ovaj zaključak u stvari nije iznenadjujući i znači da smo, bez obzira na smenu (2.13) dobili talasnu funkciju sa asimptotikom

$$\psi(\xi)\sim e^{-\frac{\xi^2}{2}}e^{\xi^2}=e^{\frac{\xi^2}{2}}, \tag{2.22}$$

to jest baš na ono rešenje koje smo hteli da odbacimo kao nefizičko. U stvari ipak dobili smo nešto više: postoji mogućnost i fizičkog rešenja i to kada se red (2.16) prekine na nekoj konačnoj vrednosti indeksa n i funkcija $f(\xi)$ postane polinom: naravno, koeficijenti polinoma i dalje zadovoljavaju (2.20). Upravo ovakva rešenja imaju dobro ponašanje u beskonačnosti jer u ponašanju proizvoda polinoma proizvoljnog reda $P_n(\xi)$ sa eksponencijalnom funkcijom dominira eksponent,

$$\lim_{\xi\to\pm\infty}\psi(\xi)=\lim_{\xi\to\pm\infty}e^{-\frac{\xi^2}{2}}P_n(\xi)=0. \tag{2.23}$$

Lako se vidi s druge strane da uslov

$$a_{n+2}=0 \tag{2.24}$$

'odseca' red (2.16) na n-tom članu, jer su zbog (2.20), zajedno sa a_{n+2} i svi viši članovi a_{n+4}, a_{n+6}, ... nula. To jest, svi viši koeficijenti iste parnosti: ako hoćemo da red svedemo na polinom treba dodatno da pretpostavimo ('uvedemo rukom') da su svi koeficijenti suprotne parnosti nula, jer su dva uslova oblika (2.24) za različito n kontradiktorna. Na primer, za parno n uz (2.24) uzimamo i da je $a_1 = 0$ što povlači da su svi neparni koeficijenti $a_{2k+1} = 0$.

Dobili smo, dakle, beskonačno mnogo rešenja Schrödinger-ove jednačine. Za svaki prirodan broj uslov (2.24) i rekurentna relacija (2.20) definišu jedan polinom stepena n, $H_n(\xi)$ koji daje talasnu funkciju

$$\psi_n(\xi) = a_n\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi). \tag{2.25}$$

Polinomi H_n zovu se Hermité-ovi polinomi i kao što smo videli parni su ili neparni. Osim stepena polinoma n uslov (2.24) fiksira i vrednost konstante λ odnosno E:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\,\hbar\omega, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.26}$$

Znači, energija ne može biti proizvoljna nego je kvantovana odnosno ima diskretne vrednosti. Do na sabirak $\frac{1}{2}\hbar\omega$ to su upravo vrednosti koje je Planck postulirao odnosno pretpostavio 1901. Stanje najniže energije dobija se za $n = 0$,

$$E_0 = \frac{1}{2}\,\hbar\omega, \tag{2.27}$$

i zove se osnovno stanje. Njemu odgovara talasna funkcija koja je Gauss-ov paket (jer je polinom nultog stepena, $H_0(\xi)$=const),

$$\psi_0(\xi) = \pi^{-1/4}\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \tag{2.28}$$

Treba da zapazimo da ni u osnovnom stanju energija harmonijskog oscilatora nije (i ne može biti) nula: to je, kako ćemo videti kasnije, u skladu sa Heisenberg-ovim relacijama neodredjenosti. Sledeće stanje po energiji, prvo pobudjeno stanje, je

$$\psi_1(\xi) = (4\pi)^{-1/4}\, 2\xi\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \qquad E_1 = \frac{3}{2}\,\hbar\omega, \tag{2.29}$$

a drugo pobudjeno stanje je

$$\psi_2(\xi) = (64\pi)^{-1/4}\, (4\xi^2 - 1)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \qquad E_2 = \frac{5}{2}\,\hbar\omega. \tag{2.30}$$

Slika: prve tri svojstvene funkcije za HO

Skup dozvoljenih vrednosti energije (i bilo koje druge fizičke veličine) naziva se spektar: u slučaju harmonijskog oscilatora spektar energije je skup ekvidistantnih tačaka (2.26) dat na slici.

Slika: spektar energije HO

Definicija kao i eke od osobina Hermité-ovih polinoma date su u dodatku ovoj glavi.

2.2 Vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina

Na primeru rešavanja Schrödinger-ove jednačine za harmonijski oscilator uveli smo nekoliko tipičnih, opštih postupaka koji se često koriste. Jedan od njih je razdvajanje vremenske promenljive od prostornih i ono uvek može da se primeni kada je sistem konzervativan, tj. kad hamiltonijan ne zavisi eksplicitno od vremena. Za hamiltonijan

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \tag{2.31}$$

Schrödinger-ova jednačina glasi

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(\vec{r})\Psi \tag{2.32}$$

a talasna funkcija zavisi od vremena i prostornih koordinata. Na primer u Decartes-ovim koordinatama $\Psi(\vec{r},t) = \Psi(x,y,z,t)$ a laplasijan je $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Pošto potencijalna energija ne zavisi od vremena postoje partikularna rešenja oblika

$$\Psi(\vec{r},t) = T(t)\psi(\vec{r}). \tag{2.33}$$

Uvodjenjem (2.33) jednačina postaje

$$i\hbar\frac{dT(t)}{dt}\,\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\,\Delta\psi(\vec{r}) + T(t)\,V(\vec{r})\psi(\vec{r}) \tag{2.34}$$

odnosno

$$i\hbar\,\frac{1}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}). \tag{2.35}$$

U poslednjoj formuli promenljive su razdvojene i jednačina može biti tačna samo ako su leva i desna strana jednake (istoj) konstanti. Znači polazna diferencijalna jednačina (2.32) pretvara se u dve od kojih je jedna obična,

$$\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}ET(t), \tag{2.36}$$

a druga ostaje parcijalna po koordinatama ali ne sadrži vreme: to je vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina[1]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{2.37}$$

[1] Ili u narodu poznatija kao stacionarna Schrödinger-ova jednačina, kako kaže Damir Ribić, student iz Šipova.

Kao što smo ranije pomenuli, izrazu $-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}$ odgovara kinetička energija tako da se (2.37) može pisati i kao

$$H\psi = E\psi \tag{2.38}$$

iz čega se vidi da konstanta E ima smisao energije. U algebarskoj terminologiji, (2.38) je svojstveni problem hamiltonijana ali ovo ćemo detaljnije objasniti u sledećoj glavi.

Očigledno, vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina i njena rešenja zavise od oblika potencijala $V(\vec{r})$ kao naravno i od E, tako da ona ne može da se rešava u opštem slučaju. Pretpostavićemo da znamo rešenje i tu funkciju označićemo sa $\psi_E(\vec{r})$. Prva jednačina (2.36) je laka pa imamo

$$T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \tag{2.39}$$

tako da je ukupno

$$\Psi_E(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\vec{r}). \tag{2.40}$$

Ψ_E je partikularno rešenje koje opisuje stanje kvantnog sistema fiksirane energije E. Ovo stanje je stacionarno: njegova celokupna promena sa vremenom ogleda se samo u promeni faznog faktora $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, što kao što ćemo kasnije videti, ne menja nijednu od fizički opservabilnih veličina.

Opšte rešenje Schrödinger-ove jednačine koje je linearna kombinacija partikularnih rešenja,

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(\vec{r}) + \int c_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\vec{r})\, dE \tag{2.41}$$

zavisi naravno od vremena odnosno nije stacionarno, jer su svi fazni faktori različiti. U izrazu (2.41) imamo dve vrste 'sabiranja' rešenja: u prvom sabirku to je po indeksu n, kada su (kao kod harmonijskog oscilatora) dozvoljene samo diskretne vrednosti energije. Medjutim u principu može da se desi da vrednosti u spektru energije budu i kontinualne, i tada je 'linearna kombinacija' talasnih funkcija ψ_E u stvari integral po dE. U opštem rešenju konstante c_n i c_E koje daju težine odnosno relativni udeo pojedinih sabiraka su proizvoljne. One su odredjene početnim uslovom, stanjem sistema u nekom zadatom trenutku npr. u $t = 0$. Činjenica da se iz početnog stanja $f(\vec{r})$

$$f(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}, t=0) = \sum c_n\psi_n(\vec{r}) + \int c_E\psi_E(\vec{r})\, dE \tag{2.42}$$

mogu jednoznačno odrediti koeficijenti u razvoju c_n i c_E je veoma netrivijalan matematički iskaz koji pre svega zahteva da bude preciznije definisan: ova formula odgovara u linearnoj algebri razvoju vektora po zadatom bazisu. Mi naravno nećemo da ulazimo u odgovarajuću matematiku ali ćemo na primerima pokazati kako invertovanje formule (2.42) funkcioniše.

Kao rezime treba možda da kažemo da se vremenski ili dinamički deo Schrödinger-ove jednačine u principu jednostavno rešava. Zato je glavni deo svakog kvantnomehaničkog problema, za razliku od klasične mehanike, kinematički: to je vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina.

2.3 Jednačina kontinuiteta

Schrödinger-ova jednačina je prvog reda po vremenu i linearna. Zbog toga se jedna od njenih posledica može napisati u obliku jednačine kontunuiteta $\frac{\partial\rho}{\partial t}+\operatorname{div}\vec{j}=0$. Naime, kompleksnom konjugacijom (2.32) dobijamo (potencijalna energija je realna, $V=V^*$),

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^*+V\Psi^*, \tag{2.43}$$

pa kad (2.32) pomnožimo sa Ψ^* a (2.43) sa Ψ i oduzimemo,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)-\frac{i\hbar}{2m}\operatorname{div}(\Psi^*\operatorname{grad}\Psi-\Psi\operatorname{grad}\Psi^*)=0. \tag{2.44}$$

U poslednjem izrazu prepoznajemo jednačinu kontinuiteta kod koje su gustina i struja

$$\rho=\Psi^*\Psi,\qquad \vec{j}=-\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*). \tag{2.45}$$

Podsetimo se da je važenje jednačine kontinuiteta uvek vezano za zakon održanja: na primer u mehanici fluida održava se ukupna masa, a u elektrodinamici ukupno naelektrisanje. Konstanta kretanja koja se dobija iz (2.44) je integral

$$\int\rho\,dV, \tag{2.46}$$

i lako se vidi da ne zavisi od vremena jer

$$\frac{d}{dt}\int\rho\,dV=\int\frac{\partial\rho}{\partial t}\,dV=-\int\operatorname{div}\vec{j}\,dV=\oint\vec{j}\cdot d\vec{S}=0. \tag{2.47}$$

U poslednjoj jednakosti se integral $\operatorname{div}\vec{j}$ po prostoru primenom Stokes-ove teoreme svodi na površinski integral po granici koji je nula jer su po pravilu vrednosti polja pa i struja na granici prostora odnosno asimptotski nula.

Jednačina kontinuiteta u kvantnoj mehanici je osnov statističke interpretacije. Gustina

$$\rho(\vec{r},t)=|\Psi(\vec{r},t)|^2 \tag{2.48}$$

interpretira se kao gustina verovatnoće nalaženja čestice,

$$dP=\rho(\vec{r},t)\,dV \tag{2.49}$$

je verovatnoća da se u trenutku t čestica nadje u zapremini dV oko tačke $\vec{r}$. Smisao održanja 'naboja' $\int \rho\, dV$ je da, ako u nekom trenutku npr. $t = 0$ normiramo ukupnu verovatnoću nalaženja čestice (bilo gde u prostoru) na jedinicu,

$$\int |\Psi(\vec{r}, 0)|^2 \, dV = 1, \tag{2.50}$$

onda se zbog jednačine (2.47) normiranje u vremenu održava tj. u svim kasnijim i prethodnim trenucima $\rho(\vec{r}, t)$ ima smisao gustine verovatnoće. Interesantno je da je Schrödinger i pre nego što je statistička interpretacija usvojena, u prvom radu iz 1926. pretpostavio da u vodonikovom atomu, $e|\Psi|^2$ opisuje gustinu naelektrisanja elektrona koji se kreće oko jezgra. Veličina $\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^* \mathrm{grad}\, \Psi - \Psi \mathrm{grad}\, \Psi^*)$ je gustina struje verovatnoće i u teoriji rasejanja na primer opisuje fluks snopa čestica.

Iz Schrödinger-ove jednačine se u stvari vidi i koji smisao ima vektor gustine struje $\vec{j}$. Ako je $\rho = \Psi^*\Psi$ gustina verovatnoće, onda je očekivana ili srednja vrednost recimo x komponente vektora položaja čestice data sa

$$\langle x \rangle = \int x \Psi^* \Psi dV, \tag{2.51}$$

a oěckivana vrednost odgovarajuće komponente brzine v_x

$$\langle v_x \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int x \, \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \, \Psi \, dV + \int x \Psi^* \, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \, dV. \tag{2.52}$$

Primenjujući Schrödinger-ovu jednačinu dobijamo

$$\langle v_x \rangle = \frac{\hbar}{2mi} \int x (\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^2}) \Psi dV - \frac{\hbar}{2mi} \int x \psi (\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}) dV, \tag{2.53}$$

Posle dve parcijalne integracije i odbacivanja površinskih članova dobijamo

$$\langle v_x \rangle = -\frac{i\hbar}{2m} \int (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi *}{\partial x}) \, dV = \int j_x \, dV. \tag{2.54}$$

Normiranje verovatnoće ima jednu jednostavnu posledicu: da bi integral $\int |\Psi|^2 dV$ bio konačan neophodno je da u prostornoj beskonačnosti talasna funkcija teži nuli. Ovo je uslov koji smo u stvari već koristili kod rešavanja Schrödinger-ove jednačine za harmonijski oscilator. Funkcije za koje je integral $\int |\Psi|^2 dV$ konačan zovu se kvadratno integrabilne funkcije i one zapravo čine prostor stanja kvantne čestice: očigledno, ako je integral konačan onda se reskaliranjem funkcije Ψ on može normirati na 1. Uslov konvergencije integrala (2.50) daje i tip opadanja talasne funkcije u beskonačnosti: u jednoj dimenziji $|\Psi|$ mora da opada brže nego $x^{-1/2}$ kad $x \to \pm\infty$, dok u tri dimenzije $|\Psi|$ opada brže od $r^{-3/2}$ kad $r \to \infty$.

2.4 Slobodna čestica

Razmotrimo sada sa malo više detalja najjednostavniji fizički sistem, slobodnu česticu odnosno česticu koja se kreće van polja sile pa joj je ukupna potencijalna energija $V(\vec{r}) = 0$. Schrödinger-ova jednačina je

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi \tag{2.55}$$

Sistem je očigledno konzervativan pa se vremenska i prostorne promenljive mogu razdvojiti, $\Psi(\vec{r},t) = T(t)\psi(\vec{r})$, i imamo kao i ranije $T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$. Konstanta E mora da bude pozitivna što je i logično, jer predstavlja kinetičku energiju čestice. Ovaj iskaz mada skoro očigledan, može i formalno da se pokaže i to ćemo uraditi kasnije.

Ako stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi \tag{2.56}$$

rešavamo u Decartes-ovom koordinatnom sistemu, onda i tri prostorne promenljive mogu da se razdvoje. Uvodjenjem smene

$$\psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z), \tag{2.57}$$

i ponavljanjem postupka razdvajanja dobijamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X}{dx^2} = E_xX \tag{2.58}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y}{dy^2} = E_yY \tag{2.59}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z}{dz^2} = E_zZ, \tag{2.60}$$

gde su E_x, E_y, E_z proizvoljne pozitivne konstante koje zadovoljavaju uslov $E_x + E_y + E_z = E$.

Sve tri jednačine imaju isti oblik

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \tag{2.61}$$

pa ćemo da proanaliziramo ovu jednačinu. (2.61) je homogena obična diferencijalna jednačina sa konstantnim koeficijentima i zato su njena rešenja eksponencijalne funkcije. Pretpostavljajući $\psi(x) = e^{ikx}$ vidimo da k mora da zadovoljava

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \tag{2.62}$$

de Broglie-jevu disperzionu relaciju. Znači imao dva različita i nezavisna stanja $e^{\pm ikx}$ $(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}})$ za istu vrednost energije E: kažemo da je energija dvostruko degenerisana. Ova stanja su naravno ravni talasi,

$$\Psi_1(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}e^{ikx} \tag{2.63}$$

koji se prostire u pozitivnom smeru x-ose i

$$\Psi_2(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}e^{-ikx} \tag{2.64}$$

koji se prostire u negativnom smeru.

U tri dimenzije, množenjem funkcija X, Y i Z dobija se

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}e^{ik_x x}e^{ik_y y}e^{ik_z z} = e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{2.65}$$

Sada je degeneracija energije je beskonačna jer imamo beskonačno mnogo stanja iste energije koji se razlikuju po pravcu talasnog vektora $\vec{k}$. Videćemo da ova stanja karakteriše tačno odredjena vrednost impulsa $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Ali, ona nisu fizička u smislu koji smo malopre definisali, jer ne mogu da se normiraju na jedinicu:

$$\int (e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{r}})^* e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{r}} dV = \int dV = \infty; \tag{2.66}$$

gustina verovatnoće je u svim tačkama ista. Sličan problem imamo u stvari i kod klasičnog ravnog elektromagnetnog talasa, kod koga je gustina energije u svim tačkama konstantna pa bi ukupna energija koju talas prenosi trebalo da bude beskonačna. Stanja u prirodi u stvari uvek su talasni paketi koji su manje ili više lokalizovani u prostoru i koji nemaju potpuno odredjenu frekvencu, a ravni talasi (2.65) su matematička idealizacija koja je veoma korisna za račun ali i za intuitivno razumevanje.

2.5 Evolucija Gauss-ovog paketa

U nastavku ćemo razmatrati slobodnu česticu samo u jednoj dimenziji jer zaključci se dosta direktno prenose i na trodimenzioni slučaj. Rekli smo da su prava fizička rešenja, stanja slobodne čestice, u stvari talasni paketi

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k)\, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t + ikx}\, dk. \tag{2.67}$$

Da je izraz (2.67) rešenje Schrödinger-ove jednačine vidi se iz toga što je dobijen kao zbir partikularnih rešenja pomnoženih koeficijentima $c(k)$ koji su konstantni odnosno ne zavise od x i t, a jednačina je linearna. Rešenje (2.67) je i opšte: to znači da se stanje koje ima proizvoljnu početnu konfiguraciju $\psi(x) = \Psi(x,0)$ može prikazati u obliku (2.67),

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k)\, e^{ikx}\, dk \tag{2.68}$$

pri čemu su $c(k)$ jednoznačno odredjeni. Da je ovaj iskaz tačan znamo iz matematike: razvoj proizvoljne funkcije po ravnim talasima zove se Fourier-ova transformacija, a koeficijenti $c(k)$ mogu se izračunati pomoću inverzne Fourier-ove transformacije date sa

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, e^{-ikx}\, dx. \tag{2.69}$$

Fizička stanja uvek normiramo na jedinicu, u jednoj dimenziji,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \iint_{-\infty}^{+\infty} dk\, dk'\, c^*(k')\, c(k)\, e^{-i(k'-k)x} = 1. \tag{2.70}$$

Talasnim paketom ne zovemo baš proizvoljno $\Psi(x,t)$ već funkcije koje su dobro lokalizovane tj. imaju relativno uzak pik za jednu odredjenu vrednost položaja. Takve funkcije se dobijaju ako je i raspodela po talasnom broju $c(k)$ lokalizovana oko odredjene vrednosti k_0 sa širinom δk, tj. ako $c(k)$ brzo opada u nulu van intervala $(k_0 - \delta k, k_0 + \delta k)$. Označimo sa ϕ fazu talasne funkcije pod integralom u izrazu (2.67), $\phi = kx - \omega t$:

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0-\delta k}^{k_0+\delta k} c(k)\, e^{-i\omega t + ikx}\, dk \tag{2.71}$$

koju možemo da definišemo i za proizvoljnu disperzionu relaciju $\omega = \omega(k)$. Izraz $e^{i\phi}$ osciluje, pri čemu se pozitivne i negativne vrednosti brzo smenjuju pa se pri integraciji u slučaju proizvoljnih x i t dobija mala vrednost. Faza ϕ se najsporije menja oko svog ekstremuma i tu je vrednost integrala najveća. Sledi prema tome da Ψ ima maksimum ako je

$$\frac{d}{dk}(kx - \omega t) = 0, \tag{2.72}$$

odnosno u tačkama

$$x = \frac{d\omega}{dk}\, t = v_g t. \tag{2.73}$$

Veličina $v_g = \frac{d\omega}{dk}|_{k_0}$ naziva se grupna brzina talasnog paketa. Vidimo npr. da kod je elektromagnetnih talasa (koji se kreću brzinom c nezavisnom od frekvence) i grupna brzina jednaka brzini svetlosti,

$$\omega = ck \quad \Rightarrow \quad \frac{d\omega}{dk} = c, \tag{2.74}$$

dok je kod slobodne kvantne čestice

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}. \tag{2.75}$$

Zbog kvadratne disperzione relacije za slobodnu česticu i oblik talasnog paketa se sa vremenom menja, što ćemo sada detaljnije proučiti na primeru Gauss-ovog paketa.

Znači, interesuje nas kako evoluira talasni paket koji u početnom trenutku ima oblik Gauss-ove raspodele

$$\psi(x) = \Psi(x,0) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x}\,. \tag{2.76}$$

Gauss-ova ili normalna raspodela je važna jer su mnoge pojave u fizici i u prirodi uopšte njome opisane. Videćemo uskoro da, zbog relacija neodredjenosti, Gauss-ov paket predstavlja stanja slobodne kvantne čestice koja su najpribližnija njenom klasičnom opisu. Gustina verovatnoće je

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = |A|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} \tag{2.77}$$

i treba da se normira na jedinicu. Iz uslova normalizacije dobijamo da je vrednost konstante A jednaka

$$|A|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}, \tag{2.78}$$

uobičajeno je uzeti da je A realan pozitivan broj.

Gauss-ov paket

Sa slike se vidi da je raspodela (2.77) funkcija zvonastog oblika, simetrična oko svog maksimuma u nuli. Izračunajmo srednju vrednost i disperziju položaja u stanju (2.76). Za srednju vrednost dobijamo

$$\langle x\rangle = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x\, e^{-\frac{x^2}{a^2}} = 0, \tag{2.79}$$

tako da je nula i najverovatnija, i očekivana vrednost koordinate x. Srednja vrednost kvadrata x^2 je, sa druge strane,

$$\langle x^2\rangle = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, e^{-\frac{x^2}{a^2}} = \frac{a^2}{2}. \tag{2.80}$$

Prema tome za disperziju koordinate se dobija

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{a^2}{2}\ : \tag{2.81}$$

konstanta a opisuje neodredjenost merenja koordinate i proporcionalna je širini Gauss-ovog paketa na polovini visine.

S druge strane, za gustinu struje imamo

$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi^*}{dx}\right) = \frac{\hbar k_0}{m}\,|A|^2\, e^{-\frac{x^2}{a^2}}, \tag{2.82}$$

a integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} j(x)dx = \frac{\hbar k_0}{m} = v_0 \tag{2.83}$$

daje nam srednju brzinu v_0 talasnog paketa.

Da bismo odredili kako Gauss-ov paket evoluira treba da nadjemo talasnu funkciju $\Psi(x,t)$. Za ovo je dovoljno je da odredimo koeficijente $c(k)$ u bilo kom npr. u početnom trenutku vremena. $c(k)$ se dobijaju inverznom Fourier-ovom transformacijom funkcije $\psi(x)$, (2.69):

$$c(k) = \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x} e^{-ikx} dx. \tag{2.84}$$

Koristeći Poisson-ov integral (dat u Dodatku ove glave) dobijamo

$$c(k) = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2}. \tag{2.85}$$

Prema tome, u proizvoljnom trenutku t stanje $\Psi(x,t)$ je

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t+ikx}\, dk = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t+ikx} e^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2}\, dk. \tag{2.86}$$

I poslednji integral može da se izračuna jer se opet svodi na Poisson-ov, mada su sada koeficijenti kompleksni brojevi. Kada se izraz sredi dobija se

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\frac{a^2k_0^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{1+\frac{i\hbar t}{ma^2}}}\, e^{-\frac{(x-ia^2k_0)^2}{2a^2}\frac{1}{1+\frac{i\hbar t}{ma^2}}} \tag{2.87}$$

i gustina verovatnoće

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}}}\, e^{-\frac{(x-v_0t)^2}{a^2}\frac{1}{1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}}}. \tag{2.88}$$

Ako sada izračunamo srednje vrednosti $\langle x(t)\rangle$ i $\langle x(t)^2\rangle$ vidimo da se vrh talasnog paketa, u skladu sa (2.83), kreće brzinom v_0: $\langle x(t)\rangle = v_0t$. Uz to, talasni paket se širi i disperzija koordinate raste,

$$(\Delta x(t))^2 = \frac{a^2}{2}\,(1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}). \tag{2.89}$$

Gauss-ov paket je jedno od karakterističnih stanja slobodne čestice pa ćemo se na njemu malo zadržati da razmotrimo detalje kvantnomehaničkog opisa. Kao što smo rekli, stanje čestice opisuje se talasnom funkcijom $\Psi(t,\vec{r})$, dok se rezultati vezani za merenje njenog položaja dobijaju iz raspodele odnosno gustine verovatnoće $\rho(t,\vec{r}) = |\Psi(t,\vec{r})|^2$. To znači da je opis rezultata koje dobijamo u kvantnoj mehanici nužno statistički: rezultat eksperimenta dat je raspodelom verovatnoće pojedinih rezultata merenja, a merenje se vrši na ansamblu istih tj. identično pripremljenih sistema. Za neka stanja može se naravno desiti da se pri merenju uvek dobije isti rezultat tj. da je raspodela verovatnoće za taj odredjeni rezultat 1 a za sve ostale 0, ali po pravilu rezultati pojedinačnih merenja će se razlikovati.

Činjenica da je opis kvantnih sistema statistički ne znači da on nije deterministički. Promena u vremenu odnosno evolucija kvantnog sistema zadata je Schrödinger-ovom jednačinom, i ako znamo početni uslov odnosno talasnu funkciju u početnom trenutku vremena možemo je odrediti i u svim kasnijim i prethodnim trenucima. (Naravno, u principu: često ne umemo tačno da rešimo jednačinu, ali ovo pitanje je tehničko a ne principijelno.) Samim tim, znamo i raspodelu verovatnoće u svakom trenutku koja će se dobiti u eksperimentu.

Jasno je kako se iz gustine verovatnoće $\rho(\vec{r})$ računa srednja (očekivana) vrednost koordinate, $\langle\vec{r}\rangle = \int \vec{r}\rho(\vec{r})\, d^3r$, njenog kvadrata, $\langle\vec{r}^2\rangle = \int r^2\rho(\vec{r})\, d^3r$ ili proizvoljne funkcije od $\vec{r}$:

$$\langle f(\vec{r})\rangle = \int \Psi^* f(\vec{r})\Psi\, d^3r. \tag{2.90}$$

Medjutim, kako se odredjuje srednja vrednost brzine ili impulsa čestice? Jednačina kontinuiteta nas upućuje na veličinu koja daje srednju vrednost brzine i već smo je u stvari koristili,

$$\langle\vec{v}\rangle = \int \vec{j}\, d^3r, \tag{2.91}$$

odnosno

$$\langle\vec{p}\rangle = m\langle\vec{v}\rangle = -\frac{i\hbar}{2}\int(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)d^3r. \tag{2.92}$$

Ako hoćemo poslednju jednačinu da napišemo u obliku sličnom (2.90), možemo drugi sabirak da parcijalno integralimo,

$$\int \Psi\nabla\Psi^*\, d^3r = -\int(\nabla\Psi)\Psi^*\, d^3r + \oint \mathrm{div}\,(\Psi\Psi^*)d\vec{S} \tag{2.93}$$

i odbacimo površinski član koji je nula jer je vrednost talasne funkcije asimptotski nula. Prema tome,

$$\langle\vec{p}\rangle = \int \Psi^*(-i\hbar\nabla)\Psi\, d^3r, \tag{2.94}$$

i vidimo da je oblik analogan sa (2.90),

$$\langle\vec{p}\rangle = \int \Psi^*\hat{\vec{p}}\Psi\, d^3r \tag{2.95}$$

ako impulsu pridružimo operator nabla, $\vec{p} \to \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$, što je isto pravilo koje smo koristili za ravne talase. Uopštavajući, imaćemo

$$\langle p^2\rangle = \int \Psi^*(-i\hbar\nabla)^2\Psi\, d^3r = -\hbar^2\int \Psi^*(\Delta\Psi)\, d^3r \tag{2.96}$$

gde je Δ, kao i ranije, Laplace-ov operator.

U slučaju jedne dimenzije je

$$\langle p\rangle = -i\hbar\int\psi^*\frac{d\psi}{dx}\,dx. \tag{2.97}$$

pa možemo da izracunamo srednju vrednost i neodredjenost impulsa za Gauss-ov paketom (2.76), npr. u početnom trenutku. U skladu sa onim što smo već dobili imamo

$$\langle p\rangle = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2}-ik_0x}(-i\hbar)(-\frac{x}{a^2}+ik_0)e^{-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x}dx = \hbar k_0, \tag{2.98}$$

a srednja vrednost kvadrata impulsa je

$$\langle p^2\rangle = -\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{d^2\psi}{dx^2}\,dx = \hbar^2k_0^2+\frac{\hbar^2}{2a^2}, \tag{2.99}$$

tako da je disperzija impulsa

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{2a^2}. \tag{2.100}$$

Uočimo da je proizvod neodredjenosti impulsa i koordinate kod Gauss-ovog paketa

$$\Delta x\,\Delta p = \frac{\hbar}{2}. \tag{2.101}$$

Videćemo u nastavku da je ovo najmanja vrednost proizvoda $\Delta x\Delta p$ koju Heisenberg-ove relacije neodredjenosti dozvoljavaju. Stanja kod kojih je proizvod neodredjenosti impulsa i koordinate minimizovan nazivaju se koherentna stanja.

2.6 Prolaz kroz potencijalnu barijeru, koeficijenti refleksije i transmisije

Videli smo u prethodna dva poglavlja koliko lakše se rešava Schrödinger-ova jednačina za slobodnu česticu od jednačine za harmonijski oscilator. To je zato što u prvoj nemamo eksplicitnu zavisnost od nezavisno promenljive x, odnosno diferencijalna jednačina ima konstantne koeficijente. Na sličan način možemo dobiti rešenja i kad potencijal $V(x)$ nije svuda već deo po deo, na odredjenim intervalima x-ose, konstantan. Ovakvi potencijali predstavljaju dobru ili bar prvu aproksimaciju za mnoge fizičke probleme i na njima možemo da upoznamo neke od najvažnijih karakteristika kvantnog opisa sistema. Kao prvi razmatraćemo problem rasejanja čestice na potencijalnoj barijeri oblika

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x<0 \\ V_0, & 0<x<a \\ 0, & x>a. \end{cases} \tag{2.102}$$

Potencijalna barijera

Već smo videli šta je tipična postavka problema rasejanja: pretpostavlja se da na metu opisanu potencijalom V pada upadni snop čestica koji izvor emituje u početnom trenutku $t = -\infty$. Izvor se nalazi na velikom rastojanju od mete gde je potencijal približno nula, pa se može uzeti da se upadni snop u početku tj. asimptotski kreće pravolinijski, odnosno da ima dobro definisan impuls: kvantno, talasna funkcija upadnog snopa ψ_u je ravan talas. Pri prolasku kroz potencijal $V(x)$ talasna funkcija (klasično, trajektorija) se menja, ali u trenutku detekcije $t = +\infty$ pretpostavlja se da je rasejani talas opet ravan jer se detektor nalazi takodje na velikom rastojanju od centra rasejanja.

Pošto u jednoj dimenziji imamo samo dva moguća ugla rasejanja, 0 i π, efikasni presek je opisan sa dve vrednosti: koeficijentom transmisije (prolaza) i koeficijentom refleksije (odbijanja). Koeficijent transmisije definiše se kao odnos gustina struja (fluksa) transmitovanog i upadnog snopa, a koeficijent refleksije kao odnos gustina struja reflektovanog i upadnog snopa. Kao i u klasičnoj mehanici kod elastičnog rasejanja se održava energija i zato tražimo rešenje stacionarne Schrödinger-ove jednačine za odredjenu vrednost $E > 0$.

Potencijal (2.102) je deo po deo konstantan pa jednačinu možemo da rešavamo posebno u oblastima $x < 0$, $x \in (0, a)$ i $x > a$ a zatim da ova rešenja glatko spojimo. Uslovi spajanja, ili u žargonu, 'zašivanja' rešenja su sledeći. Bez obzira na oblik potencijala, uvek zahtevamo da je talasna funkcija neprekidna. Ovaj uslov je fizički — gustina verovatnoće u bliskim tačkama ne sme da se razlikuje se mnogo. Drugi uslov je uslov neprekidnosti prvog izvoda talasne funkcije, i direktno sledi iz Schrödinger-ove jednačine: izvešćemo ga u jednodimenzionom slučaju. Razmotrimo ponašanje rešenja stacionarne jednačine, $\psi(x)$, u proizvoljnoj tački x,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{2.103}$$

i integralimo ovu jednačinu u intervalu širine 2ϵ oko x, $(x-\epsilon, x+\epsilon)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon}\psi''(x)dx + \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon}V(x)\psi(x)dx = E\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon}\psi(x)dx. \tag{2.104}$$

U gornjem izrazu vrednost prvog integrala je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\big(\psi'(x+\epsilon) - \psi'(x-\epsilon)\big)\,, \tag{2.105}$$

dok druga dva možemo da ocenimo pomoću teoreme o srednjoj vrednosti,

$$\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon}V(x)\psi(x)dx = 2\epsilon\, V(x_1)\psi(x_1), \qquad x_1 \in (x-\epsilon, x+\epsilon) \tag{2.106}$$

$$E\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon}\psi(x)dx = 2\epsilon\, E\psi(x_2), \qquad x_2 \in (x-\epsilon, x+\epsilon). \tag{2.107}$$

koja kaže da postoje tačke x_1 i x_2 u intervalu $(x-\epsilon, x+\epsilon)$ takve da su jednačine (2.106-2.107) zadovoljene, pod uslovom da su potencijal $V(x)$ i talasna funkcija $\psi(x)$ svuda konačni. Zato se u limesu $\epsilon \to 0$, drugi i treći član se anuliraju i iz (2.104) dobijamo

$$\psi'(x+0) = \psi'(x-0), \tag{2.108}$$

odnosno i prvi izvod talasne funkcije mora biti neprekidan. Videćemo da kod potencijala koji imaju beskonačan skok, na primer za $V(x) = V_0\delta(x)$, prvi izvod talasne funkcije ne zadovoljava uslov neprekidnosti.

Znači, treba da Schrödinger-ovu jednačinu rešimo u svakoj od oblasti I, II i III za istu energiju E i da onda dobijene funkcije glatko spojimo na granicama oblasti. U oblasti I, $x < 0$ imamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - E\psi = 0, \tag{2.109}$$

pa su linearno nezavisna rešenja za $E > 0$ data sa e^{ikx} i e^{-ikx}. Opšte rešenje za datu energiju E je

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{2.110}$$

A i B su proizvoljne konstante. U oblasti $x \in (0, a)$ jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + (V_0 - E)\psi = 0. \tag{2.111}$$

Rešavaćemo fizički zanimljiviji slučaj kad je energija čestice manja od visine barijere, $E < V_0$. Pošto je $E - V_0$ negativno, rešenja nisu trigonometrijske već eksponencijalne funkcije

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \tag{2.112}$$

Konačno, jednačina se u oblasti III, $x > a$ rešava isto kao u I. Ukupna talasna funkcija je oblika

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, & 0 < x < a \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & x > a \end{cases} \tag{2.113}$$

ali treba još da nametnemo uslove neprekidnosti u $x = 0$ i $x = a$ jer u ostalim tačkama $\psi(x)$ je očigledno neprekidna.

U rešenju (2.113), odnosno u

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x) \tag{2.114}$$

nije teško prepoznati šta je upadni, a šta reflektovani i transmitovani talas. Prvo kao što smo rekli, relevantan je oblik u asimptotskim oblastima $x = \pm\infty$. Dalje, znamo da su sabirci proporcionalni sa e^{ikx} ravni talasi koji imaju impuls $\hbar k$ tj. koji se kreću sleva udesno, a sabirci sa e^{-ikx} su talasi sa impulsom suprotnog smera, $-\hbar k$. Prema tome, možemo da identifukujemo upadni, reflektovani i transmitovani talas kao

$$\psi_u = Ae^{ikx}, \qquad \psi_r = Be^{-ikx}, \qquad \psi_t = Fe^{ikx} \tag{2.115}$$

i da nametnemo granični uslov $G = 0$ jer nema talasa koji dolazi iz $x = +\infty$. Prema tome uslovi neprekidnosti u $x = 0$ i $x = a$ glase

$$\begin{aligned} &A + B = C + D, && ik(A - B) = \kappa(C - D) \\ &Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} = Fe^{ika}, && \kappa(Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a}) = ikFe^{ika}. \end{aligned} \tag{2.116}$$

Ako uvedemo $\alpha = \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik}$, imamo

$$\begin{aligned} A + \alpha B &= e^{-\kappa a + ika} F \\ A + \tfrac{1}{\alpha} B &= e^{\kappa a + ika} F, \end{aligned} \tag{2.117}$$

pa iz poslednje dve jednačine dobijamo

$$e^{ika} F = \frac{-2ik\kappa}{(\kappa^2 - k^2)\sinh\kappa a - 2ik\kappa\cosh\kappa a} A, \tag{2.118}$$

$$B = -\frac{(\kappa^2 + k^2)\sinh\kappa a}{(\kappa^2 - k^2)\sinh\kappa a - 2ik\kappa\cosh\kappa a} A. \tag{2.119}$$

Koeficijent transmisije dat je odnosom gustina struja verovatnoće,

$$T = \frac{|j_t|}{|j_u|}, \tag{2.120}$$

a za ravan talas $\psi_u = Ae^{ikx}$ gustina struje je proporcionalna brzini,

$$j_u = -\frac{i\hbar}{2m}|A|^2 \cdot 2ik = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} = |A|^2 v. \tag{2.121}$$

Odavde dobijamo da je

$$T = \frac{k|F|^2}{k|A|^2} = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2\coth^2\kappa a + (\kappa^2 - k^2)^2\sinh^2\kappa a} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2\sinh^2\kappa a},$$

i slično za koeficijent refleksije,

$$R = \frac{k|B|^2}{k|A|^2} = \frac{(\kappa^2 + k^2)^2\sinh^2\kappa a}{4k^2\kappa^2\coth^2\kappa a + (\kappa^2 - k^2)^2\sinh^2\kappa a} = \frac{V_0^2\sinh^2\kappa a}{4E(V_0 - E) + V_0^2\sinh^2\kappa a}.$$

Da prodiskutujemo dobijene rezultate. Rešavanjem Schrödinger-ove jednačine za potencijalnu barijeru (2.102) nismo dobili nikakve posebne uslove za energiju (osim $E > 0$, što ćemo komentarisati kasnije), što znači da je spektar energije kontinualan i sadrži sve tačke iz intervala $(0, \infty)$. U skladu s tim stacionarna rešenja ne opadaju u nulu nego su, asimptotski, ravni talasi. Da bismo našli koeficijent prolaza zadali smo granični uslov $G = 0$ i dobili konstante B i F, a njima su odredjene i C i D, u rešenju (2.113). Poslednja konstanta A naravno ne može se odrediti iz uslova neprekidnosti nego je zadata normalizacijom. Na osnovu ovoga našli smo koeficijente refleksije i transmisije R i T i, kao što se odmah vidi, $R+T = 1$. Upadni talas se delom reflektuje a delom prolazi kroz $V(x)$ dok se ukupna verovatnoća održava. Ali ono što je interesantno i novo je da čestica može da prodje kroz barijeru i u slučaju $E < V_0$, kad klasično nema dovoljno energije! Ovaj tipično kvantni fenomen naziva se 'tunel efekt'.

Naravno, kada je $V_0 \gg E$ koeficijent prolaza je mali,

$$T \approx \frac{4E}{V_0 \sinh^2 \kappa a}. \tag{2.122}$$

T osim odnosa V_0 i E zavisi i od širine barijere a. Naći ćemo još jednu približnu formulu koja važi za $\kappa a \gg 1$, tj. $\sinh \kappa a \approx \cosh \kappa a \approx \frac{1}{2} e^{\kappa a}$. Tada dobijamo

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa a} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\, a}. \tag{2.123}$$

Ovu formulu ćemo kasnije uporediti sa formulom Gamow-a koja se dobija iz WKB aproksimacije.

Pojava da čestica može da protunelira kroz barijeru je veoma važna za objašnjenje mnogih fenomena u fizici, npr. kod α-raspada jezgra.

2.7 Potencijalne jame

Sledeći fizički sistem koji ćemo modelovati deo po deo konstantnim potencijalom je vezujući potencijal odnosno potencijalna jama. Razmatraćemo prvo slučaj kad je potencijalna jama beskonačno duboka, tj. kada je potencijal

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, a) \\ \infty, & x \notin (0, a) \end{cases} . \tag{2.124}$$

Ovakav potencijal opisuje jednodimenzionu kutiju u kojoj je čestica zatvorena, jer joj je potrebno beskonačno energije da iz nje izadje. Schrödinger-ova jednačina je u intervalu $(0, a)$ ista kao jednačina za slobodnu česticu:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \tag{2.125}$$

$\boxed{\text{Beskonacno duboka jama}}$ i ima rešenja

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = \alpha \sin kx + \beta \cos kx, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad (2.126)$$

$A+B=\beta$, $i(A-B)=\alpha$. Medjutim, uslov da su zidovi neprobojni odnosno da je potencijal van intervala $(0,a)$ beskonačan znači da je $\psi(x)=0$ za $x \notin (0,a)$. Iz neprekidnosti talasne funkcije u tačkama 0 i a dobijamo

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0, \qquad (2.127)$$

odnosno $\beta = 0$, $ka = n\pi$.

Rešenja Schrödinger-ove jednačine su stojeći talasi: posle normiranja dobijamo stacionarna stanja

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \qquad (2.128)$$

kojima odgovaraju vrednosti energije

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2. \qquad (2.129)$$

Energija je kvantovana: kao što se vidi, svakom broju n odgovara jedna funkcija ψ_n pa kažemo da su vrednosti energije su nedegenerisane a spektar diskretan.

$\boxed{\text{prva tri rešenja beskonačne jame, spektar}}$

Proanaliziraćemo kratko kako izgledaju rešenja stacionarne Schrödinger-ove jednačine i spektar energije u slučaju dvodimenzione beskonačno duboke jame. Uzećemo potencijal oblika

$$U(x,y) = V(x)V(y) = \begin{cases} 0, & x \in (0,a) \wedge y \in (0,a) \\ \infty, & x \notin (0,a) \vee y \notin (0,a) \end{cases} \qquad (2.130)$$

gde je V dato sa (6.145), tj. kvadratnu potencijalnu jamu. Stacionarna Schrödinger-ova jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\Big) + U\psi = E\psi, \qquad (2.131)$$

i možemo, kao kod slobodne čestice, da je rešimo razdvajanjem promenljivih x i y, pretpostavljajući da je talasna funkcija oblika

$$\psi(x,y) = \phi(x)\chi(y). \qquad (2.132)$$

Tada za ϕ i χ dobijamo jednačine

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} + V(x)\phi = E_1\phi, \qquad (2.133)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dy^2}+V(y)\chi=E_2\chi, \tag{2.134}$$

gde je $E=E_1+E_2$, odnosno dve jednačine za jednodimenzionu jamu. Zato možemo direktno da pišemo rešenja:

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y)=\frac{\pi}{a}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{a}. \tag{2.135}$$

Ovo rešenje ima energiju

$$E_{n_1,n_2}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2). \tag{2.136}$$

Spektar energije je diskretan ali većina tačaka u spektru je degenerisana. To nije slučaj sa osnovnim stanjem,

$$\psi_{1,1}=\frac{\pi}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a},\qquad E_{1,1}=\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}, \tag{2.137}$$

ali je prvo pobudjeno stanje dvostruko degenerisano jer imamo dve funkcije za istu energiju $E_{1,2}=E_{2,1}=\frac{5}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$:

$$\psi_{1,2}=\frac{\pi}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a},\qquad \psi_{2,1}=\frac{\pi}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}. \tag{2.138}$$

Drugo pobudjeno stanje je opet nedegenerisano itd. – na primer, energiju $\frac{50}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$ imaju tri kvantna stanja, $\psi_{1,7}$, $\psi_{7,1}$ i $\psi_{5,5}$.

Jednostavan model beskonačno duboke jame možemo da uporedimo sa nešto realističnijim modelom vezujućeg potencijala, potencijalnom jamom konačne dubine. Potencijalna energija je

$$V(x)=\begin{cases}0, & x\in(0,a)\\ V_0, & x\notin(0,a)\end{cases}. \tag{2.139}$$

Konačna potencijalna jama

Schrödinger-ovu jednačinu rešavamo na već uobičajeni način, zasebno u sve tri oblasti, $x<0$, $0<x<a$, $x>a$, a onda dobijene funkcije glatko spajamo. Ako tražimo rešenja koja su u potencijalnoj jami tj. imaju energiju $E<V_0$, dobijamo funkciju oblika

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{\kappa x}+Be^{-\kappa x}, & x<0, & \kappa=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}\\ C\sin kx+D\cos kx, & x\in(0,a), & k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\\ Ge^{\kappa x}+Fe^{-\kappa x}, & x>a, & \kappa=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}.\end{cases} \tag{2.140}$$

Ali pošto talasna funkcija ne sme eksponencijalno da raste u asimptotskim oblastima $x\to\pm\infty$, mora biti $B=0$, $G=0$.

Uslovi neprekidnosti talasne funkcije i njenog prvog izvoda u tačkama $x = 0$ i $x = a$ daju veze izmedju konstanti,

$$A = D, \tag{2.141}$$

$$\kappa A = kC, \tag{2.142}$$

$$C \sin ka + D \cos ka = Fe^{-\kappa a}, \tag{2.143}$$

$$k(C \cos ka - D \sin ka) = -\kappa F e^{-\kappa a}. \tag{2.144}$$

Ako u poslednje dve jednačine zamenimo prve dve, $D = A$ i $C = \frac{k}{\kappa} A$ dobijamo dva rešenja za F,

$$F = Ae^{\kappa a}(\frac{\kappa}{k} \sin ka + \cos ka) = -Ae^{\kappa a} \frac{k}{\kappa}(\frac{\kappa}{k} \cos ka - \sin ka), \tag{2.145}$$

koja moraju biti jednaka. Uslov konzistentnosti je

$$(\frac{\kappa}{k})^2 \tan ka + 2\,\frac{\kappa}{k} - \tan ka = 0, \tag{2.146}$$

odnosno

$$\tan ka = \frac{2\,\frac{\kappa}{k}}{1 - (\frac{\kappa}{k})^2}, \qquad \tan \frac{ka}{2} = \frac{\kappa}{k}. \tag{2.147}$$

Pre nego što predjemo na rešavanje poslednje jednačine, nekoliko opštih napomena. Sistem (2.142-2.144) je sistem od četiri linearne homogene jednačine, i ima netrivijalno rešenje samo ako mu je determinanta jednaka nuli. To naravno znači da nisu sve jednačine nezavisne, nego ćemo u rešenju tri konstante npr C, D, F, moći da izrazimo preko četvrte, A koja ostaje neodredjena. Uslov da je determinanata nula daje vezu izmedju k, κ i a, odnosno to je jednačina koja odredjuje energiju E tj. daje njeno kvantovanje. Treba da zapazimo da ova jednačina postoji samo kada tražimo vezana stanja tj. rešenja koja su unutar potencijalne jame: ako je $E > V_0$, rešenja u sve tri oblasti bi bila oblika ravnih talasa tj. trigonometrijske funkcije, i nema razloga da namećemo uslov $B = 0$, $G = 0$. Znači, dobija se sistem od četiri jednačine sa šest nepoznatih koji, u principu, može da se reši za proizvoljnu vrednost konstanti E i a, pa u tako da u tom slučaju nemamo kvantovanje energije nego E može biti bilo koji broj iz intervala (V_0, ∞).

Ali vratimo se na odredjivanje dozvoljenih vrednosti energije za $0 < E < V_0$. Imamo da je $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$, tako da jednačina (2.147) zapisana po promenljivoj E glasi

$$\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1} = \tan(c\sqrt{E}), \tag{2.148}$$

gde je $c = \sqrt{\frac{ma^2}{2\hbar^2}}$. Jednačina je transcedentna, i možemo da je rešavamo ili numerički ili grafički: pošto nam ne trebaju tačne vrednosti rešenja negio samo da proverimo njihovu egzistenciju i broj, koristićemo ovaj drugi metod. Metod se sastoji u tome da se na grafiku nacrtaju dve funkcije, jedna koja je jednaka levoj strani jednačine i druga koja jejednaka desnoj, i gledaju njihovi preseci. U našem slučaju, sa leve strane je funkcija koja ima ponašanje slično hiperboli, a definisana je samo u intervalu $(0, V_0)$ i na kraju intervala postaje nula. Na desnoj strani je tangens ali ne od E nego od $\sqrt{E}$, tako da funkcija nije periodična nego se rastojanja izmedju asimptota povećavaju, kao na slici. Medjutim lako možemo da dodjemo do dva zaključka: prvo, da uvek postoji bar jedno rešenje, ono sa najmanjom energijom, jer se hiperbola i tangens moraju preseći (jedno teži u ∞ a drugo u 0 u $E = 0$), i drugo, da je broj preseka konačan jer je interval promene E ograničen. U principu broj rešenja može tačno da se utvrdi i zavisi od odnosa dubine i širine potencijalne jame, V_0 i a.

$\boxed{\text{Konačna pot. jama, rešenja za energiju}}$

Znači, energija unutar potencijalne jame je kvantovana tj. ima diskretne vrednosti, a energetskih nivoa i odgovarajućih stanja ima konačno mnogo. Spektar energije prema tome sastoji se od nekoliko tačaka izmedju 0 i V_0 i kontinualnog intervala $(V_0, +\infty)$. Ovo je osnovna razlika u odnosu na beskonačno duboke potencijale kod kojih vezanih stanja ima beskonačno mnogo.

$\boxed{\text{Spektar, konačna jama}}$

2.8 Osobine kretanja u jednoj dimenziji

Ovo poglavlje sumira i sistematizuje osobine talasnih funkcija koje smo u primerima do sada dobili. U stvari od osobina koje ćemo navesti samo su *v)* i *vi)* specifične za jednodimenzione sisteme dok ostale važe generalno. Treba imati u vidu da proučavanje jednodimenzionih sistema predstavlja više od pedagoškog uvoda u kvantnu mehaniku jer se po pravilu rešivi trodimenzioni problemi razdvajanjem promenljivih svode na jednodimenzione.

i) Već smo videli da kao fizički uslov uvek namećemo neprekidnost talasne funkcije odnosno gustine ρ, bez obzira na to da li je potencijalna energija neprekidna funkcija ili ne. Takodje, iz Schrödinger-ove jednačine smo izveli da je, ako su skokovi potencijala konačni, neprekidan i prvi izvod talasne funkcije. To smo dobili integraleći Schrödinger-ovu jednačinu u malom intervalu $(x-\epsilon, x+\epsilon)$ oko proizvoljne tačke x:

$$-\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon}\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)\,dx+\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon}V(x)\psi(x)\,dx=\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon}E\psi(x)\,dx. \tag{2.149}$$

Ovaj metod daje rezultat i ako potencijal ima beskonačan skok npr. tipa δ-funkcije, $V(x) = -V_0\,\delta(x-a)$. $\delta(x)$ je uopštena funkcija koja svuda ima vrednost 0 osim u tački $x = 0$ gde je beskonačna, i mi ćemo je uvesti kao limes neprekidnih funkcija i detaljnije opisati u sledećoj glavi. Njena osnovna osobina kojom se zapravo može definisati je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) f(x)\, dx = f(a). \tag{2.150}$$

Dakle, kad jednačinu (2.149) integralimo u okolini tačke a dobija se

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(a+0) - \psi'(a-0)) - V_0\psi(a) = 0, \tag{2.151}$$

odnosno i prvi izvod talasne funkcije ima skok čija je vrednost

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\,\psi(a). \tag{2.152}$$

Mada su potencijali dati preko δ-funkcije očigledno, kada se strogo gleda, nefizički, zbog svoje jednostavnosti su veoma zgodni kao modeli za odredjene fizičke interakcije.

ii) Druga matematička činjenica koja sledi iz zahteva kvadratne integrabilnosti talasne funkcije je da ona mora u beskonačnosti da teži nuli. Zaista, pošto je gustina verovatnoće $\rho = |\psi|^2$ svuda pozitivna, da bi integral po prostoru bio konvergentan $|\psi|^2$ mora da teži nuli brže nego x^{-1} u beskonačnosti.

iii) Treća važna osobina koju smo u stvari već koristili je da su vrednosti energije E koju imaju stacionarna stanja uvek veće od minimalne vrednosti potencijalne energije. Ovo se lako vidi jer za rešenja Schrödinger-ove jednačine važi

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* E\psi\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \big(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi\big)\, dx. \tag{2.153}$$

Ako u prvom sabirku parcijalno integralimo funkciju $\psi(x)$, dobijamo

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2\, dx + \int_{-\infty}^{+\infty} V|\psi|^2\, dx \geq 0 + V_{min}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = V_{min}. \tag{2.154}$$

Time smo istovremeno i pokazali da je očekivana vrednost kinetičke energije pozitivna,

$$\langle T|| =\rangle - \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\psi'' dx = \frac{\hbar^2}{2m}\big(-\psi^*\psi'|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 dx\big) \geq 0. \tag{2.155}$$

Prvi član u poslednjoj jednakosti je nula zbog graničnog uslova u $x = \pm\infty$. Kasnije ćemo videti da važi nešto opštiji (i dosta očigledan) iskaz: srednja vrednost svake fizičke opservable nalazi se izmedju najmanje i najveće merljive vrednosti te opservable.

iv) Prodiskutujmo još jednom šta su u kvantnoj mehanici vezana a šta slobodna stanja, uzimajući za potencijalnu energiju funkciju $V(x)$ kao na slici – neka ona na primer ima sa desne strane asimptotu V_0 a sa leve teži u beskonačnost. $\boxed{\text{Vezana stanja}}$ U klasičnoj mehanici oblast kretanja čestice ograničena je tačkama a i b u kojima se $V(x)$ preseca sa pravom $E = \text{const}$, $V(a) = E = V(b)$ jer, zbog održanja energije, u ovim tačkama kinetička energija postaje nula pa se čestica zaustavlja, okreće i vraća. Kvantno naravno ne možemo da odredimo istovremeno i položaj čestice i njenu brzinu; sem toga ako je potencijal neprekidna funkcija, $\psi(a)$ i $\psi(b)$ po pravilu nisu nula pa postoji verovatnoća da čestica udje 'ispod' potencijalne barijere. Ipak kad je, kao na slici, vrednost energije manja od asimptotske vrednosti, $E < V_0$, ovo prodiranje u barijeru je malo i verovatnoća prolaza eksponencijalno opada sa rastojanjem. To možemo da proverimo rešavajući Schrödinger-ovu jednačinu u asimptotskoj oblasti $x \to +\infty$, u kojoj $V(x) \to V_0$. Imamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V_0\psi = E\psi, \tag{2.156}$$

pa je asimptotsko rešenje $\psi \approx e^{-\kappa x}$ gde je $\kappa^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$, i ono teži nuli za $x \to \infty$. Verovatnoća da česticu nadjemo daleko od potencijalne jame je nula pa je stanje vezano a kretanje čestice lokalizovano. Ako je medjutim $E > V_0$, stanje je asimptotski opisano funkcijom $\psi \approx e^{ikx}$ za $k^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ tj. ravnim talasom pa čestica može da ode beskonačno daleko. Vidimo prema tome da je karakter stanja odredjen njegovim asimptotskim ponašanjem.

Slede dve osobine vezanih stanja jednodimenzionih sistema.

v) Svako vezano stanje jednodimenzionog sistema je nedegenerisano. Ovaj iskaz ne važi u više dimenzija a dokazuje se svodjenjem na kontradikciju. Pretpostavimo dakle da postoje dva različita stacionarna stanja ψ_1 i ψ_2 za istu vrednost energije E. Schrödinger-ovu jednačinu možemo da prepišemo kao

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}, \tag{2.157}$$

odnosno

$$\psi_1''(x)\psi_2(x) - \psi_2''(x)\psi_1(x) = 0. \tag{2.158}$$

Ako poslednju relaciju integralimo od $-\infty$ do x, koristeći pri tom da je asimptotska vrednost $\psi_{1,2}$ nula, dobijamo

$$\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = \text{const} = 0, \tag{2.159}$$

jer vrednost konstante se može izračunati u bilo kojoj tački na primer u $\pm\infty$. Iz poslednje jednačine sledi

$$\log\psi_1 = \log\psi_2 + C \tag{2.160}$$

tj. ψ_1 i ψ_2 su proporcionalne, što znači da predstavljaju isto stanje.

vi) Oscilaciona teorema: Talasna funkcija za kojom je opisano n-to pobudjeno stanje energije ima n nula. Ovu teoremu nećemo dokazivati mada smo već videli da važi: kod harmonijskog oscilatora npr. n-to pobudjeno stanje proporcionalno je Hermité-ovom polinomu n-tog reda H_n koji ima n realnih nula.

2.9 ⋆ Kronig-Penney-ijev model: energija provodnih elektrona

Kronig-Penney-ijev model je najjednostavniji model koji opisuje spektar energije slobodnih odnosno provodnih stanja elektrona u metalu, tj. u kristalnoj rešeci. Privlačni potencijal jezgara u čvorovima rešetke modelujemo pomoću δ-funkcije, pretpostavljajući da je rešetka jednodimenziona i periodična sa periodom a,

$$V(x) = -V_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na). \tag{2.161}$$

Kronig-Penney potencijal Efekte krajeva naravno zanemarujemo. Schrödinger-ovu jednačinu ćemo prvo rešiti u svakom od intervala $\big(na, (n+1)a\big)$, a onda spojiti delove u jedno rešenje. Unutar svakog intervala potencijalna energija je nula, a pošto razmatramo elektrone koji nisu vezani energija je $E > 0$. Unutar intervala rešenje je linearna kombinacija ravnih talasa:

$$\psi(x) = \alpha_n e^{ikx} + \beta_n e^{-ikx}, \qquad x \in \big(na, (n+1)a\big), \tag{2.162}$$

gde je $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Radi lakšeg formulisanja graničnih uslova u svakom od intervala možemo da uvedemo novu promenljivu $x_n = x - na$, pri čemu sve nove promenljive pripadaju istom intervalu $x_n \in (0, a)$. Onda imamo

$$\psi(x) = \alpha_n e^{ik(na+x_n)} + \beta_n e^{-ik(na+x_n)} = A_n e^{ikx_n} + B_n e^{-ikx_n}, \quad x_n \in (0, a) \tag{2.163}$$

gde je $A_n = e^{ikna}\alpha_n$ i $B_n = e^{-ikna}\beta_n$.

Tačke diskontinuiteta potencijala su $x = na$, odnosno $x_n = 0$, i u zapisu (2.163) ista tačka zadata je vrednostima $x_n = a$ i $x_{n+1} = 0$. Uslov neprekidnosti talasne funkcije u ovoj tački je

$$A_n e^{ika} + B_n e^{-ika} = A_{n+1} + B_{n+1}, \tag{2.164}$$

a uslov za skok prvog izvoda, (2.152),

$$ik(A_{n+1} - B_{n+1}) - ik(A_n e^{ika} - B_n e^{-ika}) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}(A_{n+1} + B_{n+1}). \tag{2.165}$$

Ovo su rekurentne relacije izmedju koeficijenata A_n i B_n koje treba da rešimo. One se mogu zgodnije prepisati u matričnoj formi

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ika}(1 - i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}) & -i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}e^{-ika} \\ i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}e^{ika} & e^{ika}(1 + i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \mathcal{A} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \tag{2.166}$$

gde je matrica $\mathcal{A}$

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} e^{-ika}(1 - i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}) & -i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}e^{-ika} \\ i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}e^{ika} & e^{ika}(1 + i\frac{mV_0}{\hbar^2 k}) \end{pmatrix}. \tag{2.167}$$

I ovde, kao i u drugim slučajevima, treba da proverimo da rešenje da bi bilo fizičko u asimptotskim oblastima ne raste u beskonačnost. Odgovarajuće vredosti gustine verovatnoće date su preko koeficijenata A_n i B_n za $n \to \pm\infty$. Kako je

$$\begin{pmatrix} A_{-n} \\ B_{-n} \end{pmatrix} = \mathcal{A}^n \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathcal{A}^{-n} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \tag{2.168}$$

matrica $\mathcal{A}$ u stvari ne sme da menja apsolutnu vrednost konstanti A_k i B_k, tj. ni da je povećava ni da je smanjuje. Zato ćemo odrediti njene svojstvene vrednosti i tražiti da budu po modulu jednake jedinici tj. da je $\mathcal{A}$ unitarna. Svojstvena jednačina

$$\det(\mathcal{A} - \lambda I) = 0 \tag{2.169}$$

je, kada se zameni (2.167),

$$\lambda^2 - 2\lambda\,(\cos ka - \frac{mV_0}{\hbar^2 k}\sin ka) + 1 = 0, \tag{2.170}$$

odnosno

$$\lambda^2 - 2b\lambda + 1 = 0 \tag{2.171}$$

za $b = \cos ka - \frac{mV_0}{\hbar^2 k}\sin ka$. Lako se vidi da njena rešenja, $\lambda_{1,2} = b \pm \sqrt{b^2 - 1}$, imaju jediničnu apsolutnu vrednost samo ako je $|b| \leq 1$ odnosno $|b| = \cos\beta$, i onda imamo $\lambda_{1,2} = e^{\pm i\beta}$.

Uslov $|b| \leq 1$ odnosno

Kronig-Penney rešenja

$$-1 \leq \cos ka - \frac{mV_0}{k\hbar^2}\sin ka \leq 1 \tag{2.172}$$

može da se analizira grafički. Na primer, desna nejednakost glasi

$$\cos ka - 1 \leq \frac{mV_0}{a\hbar^2}\,\frac{\sin ka}{ka}. \tag{2.173}$$

Ako uvedemo nezavisno promenljivu $\xi = ka = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}E}$ i funkcije

$$f(\xi) = \cos\xi - 1, \qquad g(\xi) = \frac{mV_0}{a\hbar^2}\frac{\sin\xi}{\xi}, \tag{2.174}$$

rešenja nejednakosti (2.173) su one vrednosti energije za koje je $f(\xi) \leq g(\xi)$. Sa slike se vidi da su oblasti u kojima je nejednakost ispunjena intervali. Slično se dobija i za drugu nejednakost,

$$\frac{mV_0}{a\hbar^2}\frac{\sin\xi}{\xi} \leq \cos\xi + 1. \tag{2.175}$$

Presek dva skupa dozvoljenih vrednosti E daje spektar energije provodnih elektrona. Kao što vidimo, ovaj spektar se sastoji od intervala tj. ima zonsku strukturu.

2.10 WKB APROKSIMACIJA

WKB aproksimacija daje jednu od veza kvantne sa klasičnom mehanikom tj. njen semiklasičan limes, a ime je dobila po Wentzel-u, Kramers-u i Brillouin-u. Klasični limes kvantne mehanike definisan je uslovom da je Planck-ova konstanta 'mala', $\hbar \to 0$ – pošto $\hbar$ ima dimenzije dejstva, to znači da kvant dejstva treba da bude mali u odnosu na karakteristične vrednosti za zadati problem. Semiklasična aproksimacija je aproksimacija do linearnog člana u razvoju po $\hbar$. Medjutim, već na osnovu onoga što smo do sada naučili je jasno da se kvantni opis dosta razlikuje od klasičnog pa limes $\hbar \to 0$ nije tako jednostavno izvesti kao npr. nerelativistički limes $\frac{v}{c} \to 0$ u specijalnoj teoriji relativnosti: u sledećoj glavi videćemo da je matematički okvir opisa klasične i kvantne mehanike potpuno različit pa je ova vezua netrivijalna.

Medjutim fizički je jasno da kvantna mehanika treba da predje u klasičnu kada je de Broglie-eva talasna dužina čestice mnogo manja od karakterističnih dimenzija potencijala, odnosno kada su energije čestice dovoljno velike. Iz oscilacione teoreme videli smo da za vezana stanja broj nula talasne funkcije raste sa energijom tj. da se odgovarajuća talasna dužina smanjuje. Da bismo razdvojili brze (prostorne) oscilacije talasne funkcije od sporijih promena njene amplitude talasnu funkciju pišemo u obliku

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}, \tag{2.176}$$

uz pretpostavku da se faza $\phi(x)$ menja mnogo brže nego amplituda.[2] $\phi(x)$ i $A(x)$ su realne funkcije, i (2.176) bi bila samo polarna dekompozicija kompleksnog broja da nema pretpostavke o karakteru promene funkcija ϕ i A.

[2]WKB aproksimacija se nekada zove i aproksimacija visokih frekvenci: i formalno, za $\hbar \to 0$ frekvenca $\omega = \frac{E}{\hbar}$ je velika.

Ako sa δx označimo karakteristični interval promene faze, imamo

$$\frac{1}{\delta x} \sim |\frac{(e^{i\phi})'}{e^{i\phi}}| = |\phi'|. \tag{2.177}$$

Slično, ako je Δx karakteristična dužina promene amplitude,

$$\frac{1}{\Delta x} \sim |\frac{A'}{A}|, \tag{2.178}$$

ali možemo približno da pišemo i

$$\frac{1}{(\Delta x)^2} \sim |\frac{A''}{A}|, \tag{2.179}$$

što je egzaktno kada je A eksponencijalna ili trigonometrijska funkcija. Uslov brze promene faze je, razume se,

$$\delta x \ll \Delta x. \tag{2.180}$$

Kada talasnu funkciju u obliku (2.176) zamenimo u Schrödinger-ovu jednačinu dobijamo

$$A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A\phi'^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)A = 0, \tag{2.181}$$

pa u stvari imamo dve jednačine jer su A i ϕ realne funkcije. Razdvajanjem realnog i imaginarnog dela dobija se sistem

$$\frac{A''}{A} - \phi'^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V), \tag{2.182}$$

$$\frac{2A'}{A} + \frac{\phi''}{\phi'} = 0. \tag{2.183}$$

Zbog aproksimacije (2.180) je $\frac{A''}{A} \ll (\phi')^2$ pa u (2.182) možemo da zanemarimo prvi član i rešimo je po $\phi(x)$. Za $E > V$ dobijamo

$$\phi(x) = \pm\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E - V(x))}\,dx = \pm\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p\,dx, \tag{2.184}$$

gde je sa $p = \sqrt{2m(E - V(x))}$ označen klasični impuls čestice. Druga jednačina daje amplitudu $A(x)$. Do na aditivnu konstantu imamo

$$\log A = -\frac{1}{2}\log\phi', \tag{2.185}$$

Odnosno

$$A(x) = (E - V(x))^{-1/4}. \tag{2.186}$$

Ako u (2.184) izaberemo znak plus, rešenje za stacionarnu talasnu funkciju je

$$\psi(x) = \frac{1}{(E-V)^{1/4}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-V)}\,dx}\,, \tag{2.187}$$

i može se napisati u formi razvoja po Planck-ovoj konstanti

$$\psi(x) = e^{i\phi+\log A} = e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 - i\hbar S_1)} \tag{2.188}$$

za $S_0 = \int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-V)}\,dx$. Ukupno vremenski zavisno rešenje je

$$\Psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}(-Et+S_0-i\hbar S_1)}\,. \tag{2.189}$$

Jednačine (2.182-2.183) mogu se dobiti i na nešto drugačiji način (mada je fizički aproksimacija ista), i to ako se rešenje za talasnu funkciju pretpostavi u obliku

$$\Psi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}S(x)} \tag{2.190}$$

i S razvije u red po $\hbar$ (preciznije, po $i\hbar$)

$$S = -Et + S_0 - i\hbar S_1 - \hbar^2 S_2 + \dots\,. \tag{2.191}$$

Ovim postupkom može da se izračuna i druga popravka S_2, kao i da se pokaže da je rešenje (2.184) za ϕ tačno i kada je $E < V$. S je veličina koja ima ne samo dimenzije nego i smisao dejstva. Ako talasnu funkciju (2.190) zamenimo u Schrödinger-ovu jednačinu, dobijamo

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\Delta S + V. \tag{2.192}$$

Za $\hbar = 0$ ovo je upravo Hamilton-Jacobi-jeva jednačina klasične mehanike za dejstvo, i ima rešenje $S = S_0 - Et$.

$\boxed{\text{Tunel efekat}}$ Jedan od rezultata WKB aproksimacije je približan izraz za koeficijent prolaza čestice kroz barijeru proizvoljnog oblika. Može da se pokaže, uz pažljivu analizu uslova glatkog spajanja rešenja (2.187) u tačkama x_1 i x_2 u kojima čestica 'ulazi' pod barijeru, $V(x_1) = V(x_2) = E$, da je odnos gustina struja u ovim tačkama tj. koeficijent prolaza dat sa

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}|p|dx}. \tag{2.193}$$

Ovo je formula Gamow-a za tunel efekat.

2.11 Dodatak

2.11.1 Hermité-ovi polinomi

Osim kao rešenja Hermité-ove jednačine

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0, \tag{2.194}$$

Hermité-ovi polinomi mogu da se definišu i kao

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2}) \tag{2.195}$$

ili pomoću funkcije generatrise

$$e^{2\xi t - t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{t^n}{n!}. \tag{2.196}$$

Pošto je n-tog reda, polinom H_n ima n nula koje su sve proste i realne. Važe relacije ortogonalnosti

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_n(\xi) d\xi = \delta_{mn} 2^n \sqrt{\pi} n!, \tag{2.197}$$

odnosno, talasne funkcije koje odgovaraju vrednostima n, m su ortonormirane

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n \sqrt{\pi} n!}} \, e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \tag{2.198}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(\xi) \psi_n(\xi) d\xi = \delta_{mn}. \tag{2.199}$$

Prvih nekoliko polinoma su

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi. \end{aligned} \tag{2.200}$$

Hermité-ovi polinomi zadovoljavaju rekurentne veze

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi), \tag{2.201}$$

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2n H_{n-1}(\xi) \tag{2.202}$$

kao i

$$2^{n/2} \, H_n(x+y) = \sum_k^n {n \atop k} H_k(\sqrt{2}\, x) H_{n-k}(\sqrt{2}\, y). \tag{2.203}$$

Interesantna je i relacija

$$\sum_n^{\infty} \frac{t^n}{2^n n!} \, H_n(x) H_n(y) = (1-t^2)^{-1/2} \; e^{\frac{2xyt - (x^2+y^2)t^2}{1-t^2}}. \tag{2.204}$$

2.11.2 Fourier-ova transformacija

Svaku integrabilnu funkciju $\psi(x)$ možemo izraziti u obliku

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k)\, e^{ikx} dk \tag{2.205}$$

koji se zove Fourier-ova transformacija. Koeficijenti $c(k)$ dati su integralom

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, e^{-ikx} dx \tag{2.206}$$

koji je dobro definisan za svako realno k. Često se umesto prethodne definicije za Fourier-ovu transformaciju koristi simetričnija forma, u skladu sa normalizacijom ravnih talasa i Dirac-ovom notacijom koju ćemo kasnije uvesti:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk, \tag{2.207}$$

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \tag{2.208}$$

Očigledno, $c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \tilde{\psi}(k)$. Ako se umesto po talasnom broju k integrali po impulsu, $p = \hbar k$, formule glase

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} dp, \tag{2.209}$$

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx. \tag{2.210}$$

I ova definicija razlikuje se do na konstantu, $\tilde{\psi}(k) = \sqrt{\hbar}\tilde{\psi}(p)$.

Za Fourier-ove koeficijente važi

$$\widetilde{(\psi')}(k) = ik\tilde{\psi}(k), \qquad \widetilde{(\psi'')}(k) = -k^2\tilde{\psi}(k), \tag{2.211}$$

kao i

$$\widetilde{(\psi\chi)}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(l)\, \tilde{\chi}(k-l) dl. \tag{2.212}$$

2.11.3 Poisson-ovi integrali i gama-funkcija

Osnovni Poisson-ov integral je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-px^2 - qx}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}}\, e^{\frac{q^2}{4p}}, \quad \mathrm{Re}\, p > 0 \tag{2.213}$$

Iz njega se diferenciranjem po parametrima mogu dobiti i

$$\int x e^{-px^2 - qx}\, dx = -\frac{\partial}{\partial q} \int e^{-px^2 - qx}\, dx = -\frac{q}{2p} \sqrt{\frac{\pi}{p}}\, e^{\frac{q^2}{4p}}, \tag{2.214}$$

$$\int x^2 e^{-px^2-qx}\,dx = -\frac{\partial}{\partial p}\int e^{-px^2-qx}\,dx = \frac{q^2+2p}{4p^2}\sqrt{\frac{\pi}{p}}\,e^{\frac{q^2}{4p}}, \quad (2.215)$$

Ipak, integrali ovog oblika najlakše se računaju pomoću gama-funkcije. Ona se definiše kao funkcija koja zadovoljava relaciju

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \qquad \Gamma(1) = 1. \quad (2.216)$$

Gama-funkcija je definisana za kompleksne vrednosti argumenta z i ima proste polove u $z = -n$, $n = 0, 1, 2, \ldots$. Nama je važna njena integralna reprezentacija

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{z-1} dt, \qquad \arg t = 0 \quad (2.217)$$

koja važi za Re$z > 0$.

Slika gama funkcije za realni argument

Vrednosti gama-funkcije za celobrojne i polucele argumente date su sa:

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (2.218)$$

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}, \qquad \Gamma(n+\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}\,\frac{(2n-1)!!}{2^n}. \quad (2.219)$$

2.12 Zadaci

Glava 3

Intermeco: matematički formalizam

U prethodnom poglavlju videli smo kako se uvodjenjem talasne funkcije $\psi(t,\vec{r})$ iz Schrödinger-ove jednačine dobija kvantovanje energije fizičkih sistema. Takodje smo videli da je opis koji uključuje princip superpozicije odnosno linearnost nužan da bi se objasnili fenomeni interferencije i difrakcije. Kao i kod elektromagnetnih talasa, veličina koja opisuje 'intenzitet' je $|\psi|^2$: u kvantnoj mehanici ova veličina interpretira se kao gustina verovatnoće nalaženja čestice i normira na jedinicu. Sama talasna funkcija je nužno kompleksna i zbog toga nije direktno opservabilna – uostalom, Schrödinger-ova jednačina eksplicitno sadrži imaginarnu jedinicu i tako da je prirodno da su njena rešenja kompleksne funkcije.

Ovo poglavlje, intermeco, posvetićemo razradi i interpretaciji matematičkog formalizma kvantne mehanike. Na primerima jednodimenzionih sistema već smo delimično razvili intuiciju i upoznali osnovne kvantnomehaničke fenomene; za realistične trodimenzione probleme biće nam potrebno još znanja. Ali formalizam kvantne mehanike je po sebi veoma važan. On je tako kompaktan i konceptualno zaokružen da se neretko u udžbenicima uvodi na samom početku zadavanjem 'postulata', kao što se to može uraditi sa aksiomatskim zasnivanjem termodinamike. Mi smo izabrali drugačiji, induktivni pristup, a razlog je delom u tome što, kada se sa mehanike predje na primer na kvantna polja, aksiomatska formulacija nije dovoljna. Može se reći da sam koncept kvantovanja u stvari nije unapred fiksiran nego da zavisi od fizičkog sistema na koji se primenjuje: naravno, ideja reprezentovanja u vektorskom prostoru i osnovni fizički pojmovi ostaju. Zbog toga ćemo u nastavku češće govoriti o 'principima kvantovanja' nego o 'postulatima kvantne mehanike'.

Prelaz sa Schrödinger-ove talasne mehanike na apstraktnu, algebarsku formulaciju neophodan je da bi se teorijski konzistentno opisali spin i izospin čestice. U tom opisu, videćemo opservabli spina pridružuju se 2×2 ili

3×3 matrice, koje deluju u odgovarajućem prostoru vektora-kolona. Mada je matematika konačnodimenzionog vektorskih prostora – linearna algebra, jednostavnija od analize ili funkcionalne analize, fizička intuicija vezana za nju je ne-klasična i zato je ovaj korak netrivijalan. Istorijski, algebarska formulacija je omogućila razvoj ideje o unutrašnjim stepenima slobode, jedne od bazičnih ideja fizike elementarnih čestica. No ipak na ideju da se fizičke veličine mogu opisati matricama došao je Heisenberg razmatrajući ne spin nego baš koordinatu i impuls.

Matrična mehanika je uvedena i detaljnije razradjena u tri rada iz 1925.: Heisenberg-a, Born-a i Jordan-a i konačno Born-a, Heisenberg-a i Jordan-a, i mi ćemo vrlo kratko opisati neke od koraka u razvoju ove važne teorijske ideje[1]. U prvom od pomenutih radova Heisenberg se, konstatujući da fizička teorija ne treba da se bavi veličinama koje se ne mogu opservirati (kao npr. putanja elektrona u atomu), fokusira na spektre. Još od Bohr-a bilo je poznato da se frekvence linija u spektrima atoma dobijaju kao

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n \tag{3.1}$$

i odgovaraju prelazima elektrona sa m-tog na n-ti nivo energije. Odavde sledi npr. da važi rekombinacioni princip

$$\omega_{mn} + \omega_{nk} = \omega_{mk}, \tag{3.2}$$

kao i

$$\omega_{mn} = -\omega_{nm}. \tag{3.3}$$

Heisenberg pokušava da izračuna intenzitete spektralnih linija, polazeći od klasičnog izraza za snagu elektromagnetnog zračenja koga emituje naelektrisana čestica u harmonijskom kretanju,

$$P = \frac{4e^2}{3c^3}\,|\ddot{\vec{r}}|^2. \tag{3.4}$$

Ako analogan izraz važi i u kvantnom slučaju, treba odrediti šta u njemu predstavlja vektor položaja $\vec{r}$ odnosno koordinata x i Heisenberg-ova pretpostavka je

$$x \mapsto x_{mn}\, e^{-i\omega_{mn}t}. \tag{3.5}$$

Ovde je x_{mn} kompleksna amplituda koja karakteriše prelaz, a eksponencijalni faktor, kao i sama amplituda, je na izvestan način simetričan po oba stanja. Uz to je Heisenberg pretpostavio, u skladu sa (3.3), i

$$x^*_{mn} = x_{nm}. \tag{3.6}$$

[1] G. Emch, *Mathematical and Conceptual Foundations of 20th-Century Physics,* North Holland, 2000, S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics,* Cambridge University Press, 2013.

Šta je u tom slučaju x^2_{mn}, tj. koji izraz odgovara izrazu $|\ddot{x}|^2$ u snazi zračenja? Najjednostavniji i najprirodniji način da se reprezentuje množenje koordinata, po Heisenberg-u, je

$$x^2 \mapsto x^2_{mn}\, e^{-i\omega_{mn}t} = \sum_k x_{mk}\, e^{-i\omega_{mk}t}\, x_{kn}\, e^{-i\omega_{kn}t} \tag{3.7}$$

odnosno

$$x^2_{mn} = \sum_k x_{mk}\, x_{kn}. \tag{3.8}$$

Mada je intuicija za ovu formulu verovatno proistekla iz osobina Fourier-ove transformacije npr. iz (**??**), Heisenberg nije znao nego je ovde ponovo izmislio matrično množenje koje je prepoznao Born.

Born i Jordan su naravno bili i svesni neobičnosti ovog množenja jer su 'matrice' koje se množe beskonačne (indeksi m, n itd idu od 1 do ∞) ali su hteli da analiziraju, razlože matematičke i fizičke pretpostavke i dodju do posledica. Jedna od direktnih posledica je da množenje nije komutativno. Ako se impulsu pridruži njegova amplituda, slično koordinati,

$$p = m\dot{x} \mapsto p_{mn}\, e^{-i\omega_{mn}t} \tag{3.9}$$

dobije se

$$p_{kn} = -im\omega_{kn}x_{kn}. \tag{3.10}$$

Onda imamo

$$(px)_{nn} = \sum_k p_{nk}x_{kn} = -im\sum_k \omega_{nk}|x_{nk}|^2, \tag{3.11}$$

$$(xp)_{nn} = -im\sum_k \omega_{kn}|x_{nk}|^2 = im\sum_k \omega_{nk}|x_{nk}|^2. \tag{3.12}$$

Izraz na desnoj strani su 1925. izračunali, po analogiji sa klasičnim izrazom, W. Kuhn i W. Thomas:

$$2m\sum_k \omega_{nk}|x_{nk}|^2 = \hbar, \tag{3.13}$$

tako da zapravo važi

$$(px)_{nn} - (xp)_{nn} = i\hbar. \tag{3.14}$$

Ovaj izraz su Born i Jordan u svom radu povezali sa Bohr-Sommerfeld-ovim pravilom kvantovanja za promenljive ugao-dejstvo

$$\oint p\, dx = 2\pi\hbar n, \tag{3.15}$$

a Dirac 1926. sa klasičnom Poisson-ovom zagradom izmedju kanonski konjugovanih promenljivih

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij}. \tag{3.16}$$

Sličnost odnosno vezu izmedju matrične mehanike i talasne mehanike koju je predložio Schrödinger godinu dana kasnije, 1926. bile su predmet mnogih radova i žučnih rasprava ali čini se da je najintuitivniji uvid u fiziku imao Dirac koji je insistirao na 'transformacionoj teoriji' koja povezuje jedan i drugi opis kvantne mehanike. Ekvivalentnost oba opisa konačno je dokazana 1931. Stone-von Neumann-ovom teoremom o kojoj će biti reči kasnije.

3.1 Kinematika kvantne mehanike

Prvi 'princip kvantovanja' je da se STANJU FIZIČKOG SISTEMA PRIDRUŽUJE TALASNA FUNKCIJA ILI VEKTOR STANJA KOJI JE ELEMENT LINEARNOG ODNOSNO VEKTORSKOG PROSTORA. Vektorski prostor je jedna od osnovnih matematičkih struktura i uvodi se u elementarnoj geometriji i klasičnoj mehanici da bi se opisao položaj čestice u trodimenzionom euklidskom prostoru. da ponovimo, bez mnogo detalja, ovu definiciju. Skup vektora ψ, χ, $\phi, \dots \in V$ čini vektorski prostor nad poljem skalara F (a, b, $c, \dots \in F$) ako su definisane dve operacije, vektorsko sabiranje i množenje skalarom, u odnosu na koje je V zatvoren i za koje važi prvo, da je V Abel-ova grupa u odnosu na sabiranje odnosno

$$\begin{array}{ll} \text{asocijativnost,} & \phi + (\psi + \chi) = (\phi + \psi) + \chi \\ \text{komutativnost,} & \phi + \psi = \psi + \phi \\ \text{postoji nula, } 0 \in V & 0 + \psi = \psi \\ \text{postoji inverzni vektor, } -\psi \in V & \psi + (-\psi) = 0. \end{array} \tag{3.17}$$

Dalje, množenje vektora skalarom je distributivno i kompatibilno sa množenjem skalara:

$$\begin{aligned} & a(\psi + \phi) = a\psi + a\phi \\ & (a + b)\psi = a\psi + b\psi \\ & a(b\psi) = (ab)\psi \\ & 1\,\psi = \psi. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Važna operacija je skalarni ili unutrašnji proizvod: ona vektorima ψ i ϕ pridružuje broj (ψ, ϕ). Skalarni proizvod ima sledeće osobine:

$$\begin{aligned} & (\phi, a\psi) = a(\phi, \psi) \\ & (\phi, \psi) = (\psi, \phi)^* \\ & (\psi, \psi) \geq 0; \qquad \text{ako je } (\psi, \psi) = 0, \text{ onda je } \ \psi = 0. \end{aligned} \tag{3.19}$$

U prostoru sa skalarnim proizvodom može se definisati dužina odnosno norma vektora kao

$$|\psi| = \sqrt{(\psi, \psi)} \tag{3.20}$$

kao i ugao koji zaklapaju dva vektora,

$$\cos(\measuredangle\psi\phi) = \frac{(\psi,\phi)}{|\psi|\,|\phi|}. \tag{3.21}$$

Za vektore za koje je $(\psi,\phi) = 0$ kažemo da su ortogonalni. Kasnije, kod dokaza relacija neodredjenosti trebaće nam Schwarz-ova[2] nejednakost:

$$\langle\phi|\phi\rangle\langle\chi|\chi\rangle \geq |\langle\phi|\chi\rangle|^2. \tag{3.22}$$

Schwarz-ova nejednakost kaže u stvari da je za proizvoljni ugao $\alpha = \measuredangle\phi\chi$, $|\cos\alpha| \leq 1$.

Jedostavan primer vektorskog prostora je trodimenzioni euklidski prostor: to je prostor nad poljem realnih brojeva a njegovi elementi mogu se zadati brojnim kolonama

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \tag{3.23}$$

Skalarni proizvod u ovom prostoru je

$$(X,Y) = X^T Y = \sum_{i=1}^{3} x_i y_i. \tag{3.24}$$

Jedna od osnovnih karakteristika vektorskog prostora je njegova dimenzija. Dimenzija je najmanji broj linearno nezavisnih vektora e_i pomoću kojih se proizvoljan vektor prostora V može izraziti kao linearna kombinacija,

$$X = \sum_i x_i e_i. \tag{3.25}$$

Skup $\{e_i\}$ zove se bazis a koeficijenti x_i koeficijenti u razvoju po bazisu. Očigledno, dimenzija prostora (3.23) je 3 a za bazisne elemente možemo uzeti tzv. apsolutni bazis

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3.26}$$

Ovaj bazis je ortonormiran: koeficijenti u razvoju su projekcije vektora X na koordinatne ose

$$x_i = (e_i, X). \tag{3.27}$$

Nešto opštiji vektorski prostor je n-dimenzioni prostor nad poljem kompleksnih brojeva. On se može zadati brojnim kolonama čiji su elementi kompleksni brojevi,

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \tag{3.28}$$

[2] Ili pravilnije, nejednakost Cauchy-Bunjakovskog-Schwarz-a.

a skalarni proizvod je definisan sa

$$(X,Y) = X^\dagger Y = \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i. \tag{3.29}$$

U kvantnoj mehanici elementi vektorskog prostora se najčešće u tzv. Dirac-ovoj notaciji označavaju sa $|\psi\rangle$, $|\chi\rangle$, $|\phi\rangle$. Osim 'ket' vektora $|\psi\rangle$ uvodi i njegov dualni, 'bra' $\langle\psi|$, koji se u slučaju brojnih kolona dobija adjungovanjem,

$$\langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger. \tag{3.30}$$

Tada se skalarni proizvod ili zagrada (na engleskom, 'bracket') piše kao

$$(\psi,\phi) = \langle\psi|\phi\rangle. \tag{3.31}$$

I prostor talasnih funkcija koje opisuju stanja jednodimenzione čestice je vektorski prostor: njega čine kompleksne funkcije $\psi(x)$ realne promenljive x, i očigledno skup funkcija je zatvoren u odnosu na sabiranje i množenje kompleksnim brojem. Skalarni proizvod u prostoru funkcija zadaje se pomoću integrala:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\phi(x)dx. \tag{3.32}$$

Interval na kome je zadat skup talasnih funkcija i definisan integral (3.32) može da bude i ograničen i tada obično funkcije zadovoljavaju dopunski granični uslov. Na primer, kada se u trodimenzionom prostoru sa Descartes-ovih predje na sferne koordinate i uvedu funkcije $\psi(\varphi)$ polarnog ugla $\varphi \in (0, 2\pi)$, granični uslov koji se standardno zadaje je $\psi(0) = \psi(2\pi)$. Videli smo da, zbog statističjke interpretacije, talasna funkcija treba da bude normirana,

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \tag{3.33}$$

Osobina da je integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 < \infty \tag{3.34}$$

konačan naziva se kvadratna integrabilnost.

Linearni prostor $\mathcal{H}$ kvadratno-integrabilnih funkcija, tzv Hilbert-ov prostor, je beskonačnodimenzion. Najjednostavniji način da se u to uverimo je da za bazis uzmemo monome x^k. Monomi su linearno nezavisni, nijedan od njih se ne može prikazati kao linearna kombinacija ostalih a ima ih beskonačno mnogo. Pored toga, svaka funkcija se može u ovom bazisu – to je razvoj u Taylor-ov red,

$$\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\psi^{(k)}(0)}{k!}\, x^k; \tag{3.35}$$

koeficijenti u razvoju su $c_k = \frac{\psi^{(k)}(0)}{k!}$. Doduše, monomi nisu kvadratno-integrabilne funkcije i ne mogu se normirati, pa su zato u stvari izvan prostora $\mathcal{H}$. Sem toga nisu ni medjusobno ortogonalni: svejedno, uvodjenje ovog skupa daje nam uvid u dimenziju. Drugi bazis po kome možemo razviti talasne funkcije je bazis ravnih talasa e^{ikx}: ovaj razvoj je razvoj u Fourier-ov integral:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k)\, e^{ikx} dk, \tag{3.36}$$

a koeficijenti $c(k)$ dati su formulom (2.206). Za razliku od monoma, ravnih talasa ima neprebrojivo mnogo: oni su 'prebrojani' promenljivom k koja se menja kontinualno, $k \in (-\infty, +\infty)$. Sem toga, ni ravni talasi se ne mogu normirati. Najbolji bazis koji smo do sada imali je skup svojstvenih funkcija harmonijskog oscilatora $\psi_n(x)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ dat sa (2.198): ove funkcije su i medjusobno ortogonalne i normirane.

Ukoliko se sistem sastoji od N čestica talasna funkcija zavisi od koordinata svih čestica, $\psi(\vec{r}_1, \ldots \vec{r}_N)$. Ona daje verovatnoću da čestice $1, \ldots, N$ budu u infinitezimalnoj zapremini $dV_1 \ldots dV_N$ oko tačke $(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)$ konfiguracionog prostora sistema,

$$dP = \rho\, dV_1 \ldots dV_N = |\psi|^2\, dV_1 \ldots dV_N. \tag{3.37}$$

Ukupna verovatnoća da se bilo koja čestica nadje bilo gde u prostoru je jednaka jedinici, a normalizacija se u vremenu održava.

3.2 Opservable i merenja

Dakle, prvi postulat kvantne mehanike je da stanja sistema $|\psi\rangle$ čine vektorski prostor i taj vektorski prostor definiše kinematiku kvantne mehanike. Pod stanjem naravno podrazumevamo statistički ansambl identično pripremljenih sistema jer su rezultati merenja, videli smo, u principu opisani statističkom raspodelom verovatnoće. Stanja zavise od vremena t kao parametra, i njihova dinamika data je Schrödinger-ovom jednačinom o čemu će biti reči kasnije. Uvedimo pre toga sledeći element fizičkog opisa: opservable odnosno merenja. U klasičnoj mehanici stanje čestice zadato je njenim položajem $\vec{r}$ i impulsom $\vec{p}$ odnosno tačkom $(\vec{r}, \vec{p})$ u faznom prostoru. Sve ostale fizičke veličine: energija, moment impulsa itd. date su preko $\vec{r}$ i $\vec{p}$ odnosno potpuno su odredjene u zadatom stanju: u klasičnoj mehanici pojmovi stanja i opservable svode se na isto. U kvantnoj mehanici imamo potpuno drugačiju situaciju koja proističe iz eksperimentalne činjenice da su fizičke opservable kao npr. moment impulsa ili energija kvantovane: pojam stanja sistema i pojam opservable koja se na njemu meri moraju se razdvojiti.

Drugi princip kvantovanja glasi: FIZIČKE OPSERVABLE A, B,… M OPISUJU SE U KVANTNOJ MEHANICI LINEARNIM OPERATORIMA KOJI DELUJU U PROStoru stanja fizičkog sistema. Mogući rezultati pri merenju opservable A su njene svojstvene vrednosti a_i, a srednja vrednost koja se dobija merenjem u stanju $|\psi\rangle$ je

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle. \tag{3.38}$$

Ovako zadat postulat ima već neke implikacije ali podjimo redom, da opet ukratko definišemo neophodne pojmove.

Linearni operator A je preslikavanje vektorskog prostora u samog sebe

$$A|\psi\rangle = |\phi\rangle, \tag{3.39}$$

$|\psi\rangle, |\phi\rangle \in V$ koje je linearno:

$$A(a|\psi\rangle + b|\chi\rangle) = a\,A|\psi\rangle + b\,A|\chi\rangle. \tag{3.40}$$

Skup svih operatora koji deluju u V je algebra: množenje u algebri operatora je njihovo uzastopno delovanje,

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle), \tag{3.41}$$

dok je sabiranje dato sa

$$(A+B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle. \tag{3.42}$$

Jedinični operator I je identično preslikavanje

$$I|\psi\rangle = |\psi\rangle, \tag{3.43}$$

a ako postoji inverzni A^{-1},

$$AA^{-1} = I, \tag{3.44}$$

kažemo da je operator A invertibilan. Iz osobina vektorskog prostora vidimo da je sabiranje operatora komutativno dok množenje u principu nije. Razlika

$$[A,B] = AB - BA \tag{3.45}$$

zove se komutator operatora A i B. Pošto je skup linearnih operatora algebra, može se definisati stepen operatora:

$$A^0 = I, \qquad A^2 = AA, \qquad A^3 = A^2 A \dots\ , \tag{3.46}$$

a samim tim i proizvoljna funkcija $f(A)$ formalnim razvojem u Taylor-ov red

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!}\, A^k. \tag{3.47}$$

U n-dimenzionom vektorskom prostoru linearni operatori su $n \times n$ matrice

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}. \tag{3.48}$$

Matrica očigledno ima n^2 nezavisnih elemenata i zaista, prostor kvadratnih matrica je linearni prostor dimenzije n^2. Jedan bazis u tom prostoru može se dobiti ako vektore apsolutnog bazisa pomnožimo 'obrnutim redom' odnosno pomnožimo kolonu $|k\rangle$ vrstom $\langle l|$,

$$E_{kl} = |k\rangle\langle l|. \tag{3.49}$$

tada, prema pravilima matričnog množenja dobijamo $n \times n$ matricu koja na svim mestima ima 0 osim na kl-mestu gde je 1. Proizvoljnu matricu A onda možemo da napišemo kao

$$A = \sum_{k,l=1}^{n} a_{kl}\, |k\rangle\langle l|, \tag{3.50}$$

i vidimo da je $|k\rangle\langle l|$ bazis, koji se nekad naziva dijadski bazis. U ovom zapisu se lako izvodi pravilo množenja kvadratnih matrica,

$$AB = \sum_{k,l}\sum_{j,m} a_{kl} b_{jm} |k\rangle\langle l|j\rangle\langle m| = \sum_{k,m}\Big(\sum_{l} a_{kl} b_{lm}\Big)\, |k\rangle\langle m| \tag{3.51}$$

tj.

$$(AB)_{kl} = \sum_{m} a_{km} b_{ml}. \tag{3.52}$$

Pri izvodjenju formule (3.52) koristi se činjenicu da je množenje matrica, bez obzira na njihov format, asocijativno, pa se onda u formuli (3.51) prvo može zameniti vrednost

$$\langle l|j\rangle = \delta_{lj}, \tag{3.53}$$

gde je δ_{lj} tzv. Kronecker-ova delta,

$$\delta_{lj} = \begin{cases} 0, & l \neq j \\ 1, & l = j \end{cases}. \tag{3.54}$$

Posebni u bazisu E_{kl} su dijagonalni elementi $|k\rangle\langle k|$. Oni su projektori koji prozvoljni vektor $|\psi\rangle$ projektuju na pravac $|k\rangle$:

$$E_{kk}|\psi\rangle = |k\rangle\langle k|\psi\rangle. \tag{3.55}$$

Sabiranjem svih matrica E_{kk} koje imaju po jednu jedinicu na dijagonali dobijamo jediničnu matricu I:

$$I = \sum_{k=1}^{n} |k\rangle\langle k| \tag{3.56}$$

i ova relacija se nekada zove relacija kompletnosti jer znači da proizvoljno stanje $|\psi\rangle$ možemo da razložimo po skupu $|k\rangle$,

$$|\psi\rangle = I|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{n} |k\rangle\langle k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{n} c_k|k\rangle \tag{3.57}$$

a $c_k = \langle k|\psi\rangle$ su koeficijenti u razvoju vektora $|\psi\rangle$ odnosno vrednosti projekcija $|\psi\rangle$ na $|k\rangle$.

Jedna od najvažnijih operacija u skupu operatora je adjungovanje. Operator $A^\dagger$ je adjungovani od operatora A ako za sve vektore ψ na kojima je dejstvo A definisano i sve χ važi

$$(\chi, A\psi) = (A^\dagger\chi, \psi). \tag{3.58}$$

U Dirac-ovoj notaciji ovaj izraz pišemo kao

$$\langle\chi|A\psi\rangle = \langle A^\dagger\chi|\psi\rangle = \langle\chi|A|\psi\rangle. \tag{3.59}$$

Iz definicije (3.58) lako se vidi pravilo

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \tag{3.60}$$

U prostoru matrica adjungovanje se svodi na transponovanje i kompleksnu konjugaciju matrice

$$(A^\dagger)_{kl} = a^*_{lk}. \tag{3.61}$$

U odnosu na adjungovanje definišu se važne klase operatora, npr. hermitski operatori kod kojih je

$$A^\dagger = A, \tag{3.62}$$

antihermitski operatori za koje imamo

$$A^\dagger = -A, \tag{3.63}$$

i unitarni operatori

$$U^\dagger = U^{-1}. \tag{3.64}$$

U prostoru matrica hermitski operatori su u stvari hermitske matrice. Naravno, operacija adjungovanja može da se definiše u svakom vektorskom prostoru sa skalarnim proizvodom. Uzmimo na primer prostor $\mathcal{H}$ kvadratno-integrabilnih funkcija jedne promenljive i operator diferenciranja

$$P = \alpha\,\frac{d}{dx}, \tag{3.65}$$

koji je linearan,

$$\alpha \frac{d}{dx}\big(a\psi(x) + b\chi(x)\big) = a\alpha \frac{d\psi}{dx} + b\alpha \frac{d\chi}{dx}. \tag{3.66}$$

Šta je adjungovani, $P^\dagger$? To možemo da odredimo koristeći definiciju (3.58),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x)\big(\alpha\frac{d\psi(x)}{dx}\big) = \int_{-\infty}^{\infty} \big(P^\dagger\chi(x)\big)^*\,\psi(x). \tag{3.67}$$

Da bismo delovanje operatora P 'prebacili' na funkciju χ, levu stranu gornjeg izraza možemo parcijalno da integralimo; dobija se

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x)\alpha\,\frac{d\psi(x)}{dx} = \alpha\chi^*(x)\psi(x)|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \alpha\,\frac{d\chi^*(x)}{dx}\,\psi(x). \tag{3.68}$$

Pošto su funkcije ψ i χ kvadratno integrabilne njihova vrednost u beskonačno udaljenim tačkama je nula pa prvi član u prethodnoj jednakosti otpada, i uporedjivanjem (3.66) i (3.68) možemo da zaključimo da je

$$P^\dagger\chi(x) = -\alpha^*\,\frac{d\chi}{dx}. \tag{3.69}$$

Operator P je hermitski kada je konstanta α imaginaran broj. Standardno se definiše

$$\hat{p} = -i\hbar\,\frac{d}{dx}. \tag{3.70}$$

kao operator koji u prostoru funkcija reprezentuje impuls čestice.

Jedan od važnih pojmova i u linearnoj algebri i u kvantnoj mehanici je pojam svojstvenog stanja ili opštije, svojstveni problem. On je zadat jednačinom

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle, \tag{3.71}$$

čija se rešenja a zovu svojstvene vrednosti a $|\psi\rangle$ svojstveni vektori operatora A. Za kvantnu mehaniku važna osobina svojstvenih vektora je da opisuju stanja sistema koje delovanje operatora A ne menja jer zapravo, stanje kvantnomehaničkog sistema je odredjeno samo pravcem vektora. To se vidi iz zahteva da su stanja normirana, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, tako da ako $|\psi\rangle$ pomnožimo konstantom to može jedino biti samo fazni faktor $e^{i\varphi}$, a on se u merenju ne detektuje. U zavisnosti od toga kakav je operator A njegov svojstveni problem može imati jedno ili više rešenja. U konačnodimenzionom prostoru skup svojstvenih vektora hermitskog ili unitarnog operatora[3] je kompletan i oni su ortogonalni tako da ih možemo uzeti kao bazis, Ako vektore ovog bazisa označimo sa $|k\rangle$, imamo

$$A|k\rangle = a_k|k\rangle, \tag{3.72}$$

[3]Zapravo ovo je osobina normalnih operatora koji su definisani uslovom $[A, A^\dagger] = 0$.

pri čemu neke od svojstvenih vrednosti a_k mogu u principu da budu i jednake. Skup $\{a_k\}$ zove se spektar operatora A. Svojstveni bazis normalnog operatora je ortonormiran, $\langle k|l\rangle = \delta_{kl}$, i razume se, kompletan, a prikazana u ovom bazisu matrica A je dijagonalna,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, \tag{3.73}$$

odnosno

$$A = \sum_k a_k |k\rangle\langle k|. \tag{3.74}$$

U kvantnoj mehanici izbor bazisa koji je svojstveni za opservablu A zove se 'A-reprezentacija'. Naravno, funkcije operatora A imaju isti svojstveni bazis kao A

$$f(A) = \sum_k f(a_k)|k\rangle\langle k|, \tag{3.75}$$

jer se očigledno dijagonalne matrice množe kao brojevi. Važna osobina operatora koji medjusobno komutiraju je da imaju bar jedan zajednički svojstveni bazis.

Vratimo se sada drugom principu kvantovanja. On kaže da su rezultati merenja opservable A njene svojstvene vrednosti. Ukoliko merimo A na sistemu koji je u svojstvenom stanju $|k\rangle$, srednja vrednost opservable A biće

$$\langle A\rangle = \langle k|A|k\rangle = a_k, \tag{3.76}$$

a srednja vrednost od A^2 je

$$\langle A^2\rangle = \langle k|A^2|k\rangle = a_k^2. \tag{3.77}$$

Prema tome, disperzija od A u svojstvenim stanjima je nula,

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = 0 \tag{3.78}$$

odnosno kad merimo na ansamblu, merenje na svakom pojedinačnom sistemu daje isti rezultat, a_k. Ukoliko stanje nije svojstveno nego proizvoljno,

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k|k\rangle, \tag{3.79}$$

očekivana vrednost je

$$\langle A\rangle = \sum_k c_k^* \langle k|\, A \sum_l c_l |l\rangle = \sum_k |c_k|^2 a_k = \sum_k \rho_k a_k. \tag{3.80}$$

Koeficijenti u razvoju daju raspodelu verovatnoće $\rho_k = |c_k|^2$ pri merenju: kažemo da je ρ_k verovatnoća prelaza iz stanja $|\psi\rangle$ u stanje $|k\rangle$ jer se posle merenja svi elementi ansambla na kojima je dobijen rezultat a_k nalaze u stanju $|k\rangle$. Opštije, verovatnoća prelaza iz stanja $|\psi\rangle$ u stanje $|\chi\rangle$ je $|\langle\psi|\chi\rangle|^2$.

Ono što treba posebno naglasiti je da uslov da su rezultati merenja svojstvene vrednosti u stvari ima za posledicu da su FIZIČKE OPSERVABLE REPREZENTOVANE HERMITSKIM OPERATORIMA. Lako se vidi da su svojstvene vrednosti hermitskog operatora realni brojevi, a realan broj je i jedino što se u laboratoriji može očitati kao rezultat.[4] Onda sledi da su i očekivane vrednosti opservabli realne. Za antihermitske operatore važi da su im svojstvene a time i očekivane vrednosti imaginarne. Svojstvene vrednosti unitarnih operatora su kompleksni brojevi modula jedan, $e^{i\varphi}$.

Ponašanje operatora u prostoru u beskonačno-dimenzionom prostoru u principu je dosta kompleksnije nego kad imamo konačno-dimenzioni prostor, mada se neke osnovne osobine važne za kvantnu mehaniku zadržavaju. O Hilbert-ovom prostoru govorićemo kasnije bez velike preciznosti, u posebnom poglavlju sa zvezdicom. Jedna od važnih razlika je da, dok u n-dimenzionom prostoru spektar operatora može da ima najviše n tačaka, u beskonačno-dimenzionom spektar u principu ima beskonačno tačaka i to može biti i diskretno i kontinualno 'beskonačno'. Svojstvene funkcije hermitskog operatora i dalje su ortogonalne mada, kada je spektar kontinualan, ne mogu da se normiraju. Važe uopštenja relacija (3.56) i (3.74) koja ćemo u narednom poglavlju eksplicitnije napisati i diskutovati.

Najkarakterističniji primer operatora definisanih u prostoru funkcija su koordinata i impuls. Već smo videli da se impuls čestice opisuje operatorom diferenciranja koji na stanje $\psi(x)$ deluje kao

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\,\frac{d\psi(x)}{dx}. \tag{3.81}$$

Slično, operator položaja $\hat{x}$ zadat je množenjem nezavisno-promenljivom x,

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x). \tag{3.82}$$

Operatore odnosno opservable u kvantnoj mehanici najčešće označavamo kapicom iznad simbola da bismo ih razlikovali od brojeva ili funkcija. Definicije (3.81) i (3.82) usklađene su naravno sa izrazima za očekivane vrednosti koordinate i impulsa koje smo koristili u prethodnoj glavi i koje smo uveli poluintuitivno, na osnovu koncepata gustine verovatnoće i fluksa:

$$\langle\hat{x}\rangle = \int \psi^* x\psi\, dx, \tag{3.83}$$

$$\langle\hat{p}\rangle = \int \psi^*\big(-i\hbar\,\frac{d\psi}{dx}\big)dx. \tag{3.84}$$

[4] Zapravo, rezultati merenja su uvek racionalni brojevi jer zbog greške rezultat ima konačan broj decimala.

Važna je vrednost komutatora koordinate i impulsa. Iz definicije dobijamo

$$[\hat{x},\hat{p}]\,\psi(x)=-i\hbar\,x\,\frac{d\psi}{dx}+i\hbar\,\frac{d(x\psi)}{dx}=i\hbar\,\psi(x), \tag{3.85}$$

odnosno

$$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar, \tag{3.86}$$

pošto jednakost (3.85) važi za proizvoljno $\psi(x)$. Relacija (3.86) zove se Heisenberg-ova komutaciona relacija i predstavlja, videćemo kasnije, osnovu za kanonsko kvantovanje klasičnih fizičkih sistema.

3.3 Relacije neodredjenosti

Dokazaćemo sada teoremu koja kao specijalan slučaj sadrži Heisenberg-ove relacije neodredjenosti. Ona glasi: AKO SU A I B OPSERVABLE TJ. HERMITSKI OPERATORI, PROIZVOD NEODREDJENOSTI $\Delta A\Delta B$ U FIZIČKIM STANJIMA $|\psi\rangle$ ZADOVOLJAVA NEJEDNAKOST

$$\Delta A\,\Delta B\geq\frac{1}{2}\,|\langle[A,B]\rangle|. \tag{3.87}$$

Relacije neodredjenosti dokazuju se korišćenjem Schwarz-ove nejednakosti. Označimo

$$A'=A-\langle A\rangle=A-\langle\psi|A|\psi\rangle, \tag{3.88}$$

$$|\phi\rangle=A'|\psi\rangle, \tag{3.89}$$

i slično

$$B'=B-\langle B\rangle=B-\langle\psi|A|\psi\rangle,\qquad |\chi\rangle=B'|\psi\rangle. \tag{3.90}$$

Iz relacije

$$\langle\phi|\phi\rangle=\langle\psi|A^2-2A\langle A\rangle+\langle A\rangle^2|\psi\rangle=\langle\psi|A^2-\langle A\rangle^2|\psi\rangle=(\Delta A)^2 \tag{3.91}$$

i njoj analogne za $\langle\chi|\chi\rangle$ dobijamo vezu izmedju levih strana nejednakosti (3.22) i (3.87),

$$\langle\phi|\phi\rangle\,\langle\chi|\chi\rangle=(\Delta A)^2(\Delta B)^2. \tag{3.92}$$

S druge strane, pošto se od A razlikuje do na realnu konstantu, A' je hermitski operator pa imamo

$$\langle\phi|\chi\rangle=\langle\psi|A'B'|\psi\rangle=\langle\psi|\,\frac{1}{2}\{A',B'\}+\frac{1}{2}[A',B']\,|\psi\rangle, \tag{3.93}$$

gde je smo sa $\{A,B\}$ označili antikomutator operatora A i B,

$$\{A,B\}=AB+BA. \tag{3.94}$$

Koristeći da je $[A', B'] = [A, B]$, poslednju relaciju možemo da napišemo i kao

$$\langle\phi|\chi\rangle = \frac{1}{2}\langle\{A', B'\}\rangle + \frac{1}{2}\langle[A, B]\rangle. \tag{3.95}$$

Već smo rekli da su očekivane vrednosti hermitskog operatora realni, a antihermitskog imaginarni brojevi. Sa druge strane, iz osobine adjungovanja (3.60) lako se proverava da je antikomutator odnosno simetrizovani zbir dva hermitska operatora hermitski, dok je komutator antihermitski operator. Zato je (3.95) u stvari razlaganje kompleksnog broja $\langle\phi|\chi\rangle$ na njegov realni i imaginarni deo, pa imamo

$$|\langle\phi|\chi\rangle|^2 = \frac{1}{4}\,|\langle\{A', B'\}\rangle|^2 + \frac{1}{4}\,|\langle[A, B]\rangle|^2 \geq \frac{1}{4}\,|\langle[A, B]\rangle|^2, \tag{3.96}$$

što dokazuje relacije neodredjenosti.

U specijalnom slučaju kada su A i B koordinata i impuls čiji je komutator konstantan, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, dobijamo da je proizvod neodredjenosti $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}$ ograničen odozdo,

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{3.97}$$

i ovo je Heisenberg-ova relacija neodredjenosti: opservable $\hat{x}$ i $\hat{p}$ nazivaju se 'komplementarne'. Heisenberg-ova relacija znači da je nemoguće meriti istovremeno i položaj i impuls čestice sa proizvoljno malom greškom. Ova nemogućnost nije tehničke prirode, ne sledi iz nesavršenosti instrumenata već je principijelna, inherentni deo našeg odnosno kvantnomehaničkog opisa prirode. Stanja za koja je vrednost proizvoda $\Delta x\Delta p$ minimalna i jednaka $\frac{\hbar}{2}$ nazivaju se koherentna stanja: već smo videli da su to talasne funkcije koje imaju oblik Gauss-ovog paketa. Zbog svoje osobine da imaju 'maksimalno dobro' definisan položaj i brzinu koherentna stanja najpribližnije opisuju klasičnu slobodnu česticu. Sa druge strane, ako se ograničimo samo na jednu od komplementarnih veličina npr. na položaj, jasno je da je u principu moguće realizovati niz merenja u kojima se greška stalno smanjuje odnosno teži nuli. Pri tome se naravno neodredjenost impulsa povećava.

Relacije neodredjenosti daju nam potreban uslov da dve opservable mogu da se izmere istovremeno: to je uslov da opservable komutiraju,

$$[A, B] = 0. \tag{3.98}$$

Iz linearne algebre znamo da se tada one mogu istovremeno dijagonalizovati.

3.4 ⋆ Kanonsko kvantovanje

Pošto smo definisali matematički okvir tj. kinematiku kvantne mehanike, treba da vidimo kako se zadatom klasičnom sistemu pridružuje kvantni, odnosno, kako se klasični sistem 'kvantuje'?

Standardna procedura zove se kanonsko kvantovanje i bazira se na tzv. principu korespodencije koji je u stvari treći postulat kvantne mehanike. Princip korespodencije kaže da, AKO JE KLASIČNI SISTEM OPISAN GENERALISANIM KOORDINATAMA x_i I KANONSKI KONJUGOVANIM IMPULSIMA p_j, ODNOSNO VELIČINAMA ČIJA JE POISSON-OVA ZAGRADA

$$\{x_i, p_j\}_{PZ} = \delta_{ij}, \tag{3.99}$$

ONDA SE U KVANTNOJ MEHANICI OVE OPSERVABLE REPREZENTUJU OPERATORIMA $\hat{x}_i$ I $\hat{p}_j$ KOJI ZADOVOLJAVAJU HEISENBERG-OVE KOMUTACIONE RELACIJE

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{3.100}$$

Ponekad se kolokvijalno kaže da je kvantovanje procedura u kojoj se klasičnim opservablama pripisuju operatori tako da Poisson-ova zagrada 'prelazi' u komutator po sledećem pravilu

$$\{f, g\}_{PZ} \mapsto -\frac{i}{\hbar}\,[\hat{f}, \hat{g}]. \tag{3.101}$$

Ovaj iskaz zapravo nije sasvim tačan jer ne važi za proizvoljne f i g: može se pokazati da ne postoji preslikavanje

$$x \mapsto \hat{x}, \qquad p \mapsto \hat{p} \tag{3.102}$$

za koje važi

$$\widehat{\{f, g\}}_{PZ} = -\frac{i}{\hbar}\,[\hat{f}, \hat{g}] \tag{3.103}$$

za proizvoljne funkcije kanonskih promenljivih.[5] Pokazaćemo medjutim da jednakost (3.103) važi približno tj. u vodećem redu po Planck-ovoj konstanti $\hbar$. Preslikavanje na neki način 'obrnuto' od kvantizacije (3.102) je klasični limes $\hbar \to 0$.[6] Za proizvoljne funkcije $\hat{f}$ i $\hat{g}$ imamo

$$[\hat{f}, \hat{g}] \mapsto i\hbar\,\{f, g\}_{PZ}, \tag{3.104}$$

i vidi se da klasični limes definiše ne samo nulti red u kome sve veličine komutiraju, kao u klasičnoj mehanici, nego i prvi red u razvoju po $\hbar$.

Smisao gornjeg iskaza razume se preciznije ako se računaju komutatori. Na primer, iz relacije

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{3.105}$$

lako se pokazuje da je

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = i\hbar\, n x^{n-1}, \tag{3.106}$$

[5] Nalaženje ovog preslikavanja u literaturi se naziva Dirac-ov problem, a detaljnija formulacija teoreme koja kaže da Dirac-ov problem nema rešenje može se naći npr. u Emch-ovoj knjizi koju smo citirali na početku ove glave.

[6] Preciznije, klasični limes kinematike. U dinamičkom smislu klasični limes dat je Ehrenfest-ovom teoremom koju navodimo u jednom od sledećih poglavlja.

a onda za proizvoljnu funkciju $\hat{f}(\hat{x})$ važi

$$[\hat{f}(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar \frac{d\hat{f}}{d\hat{x}}. \tag{3.107}$$

Slično, za funkciju $\hat{g}(\hat{p})$ koja zavisi samo od impulsa imamo

$$[\hat{x}, \hat{g}(\hat{p})] = i\hbar \frac{d\hat{g}}{d\hat{p}}. \tag{3.108}$$

Medjutim ako funkcije $\hat{f}$ i $\hat{g}$ zavise od obe kanonske promenljive, onda razvoj u Taylor-ov red više nije dobro definisan i komutator $[\hat{f}, \hat{g}]$ ne može egzaktno da se izračuna. Može ipak da se odredi vodeći doprinos tj. član linearan po $\hbar$,

$$[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{g}}{\partial \hat{p}} - \frac{\partial \hat{g}}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{p}}\right) + O(\hbar^2), \tag{3.109}$$

i rezultat je proporcionalan Poisson-ovoj zagradi.

Računajući (3.109) vidimo da nejednoznačnost kvantovanja leži u operatorskom uredjenju. U klasičnoj mehanici opservable komutiraju pa njihov proizvod možemo da pišemo u bilo kom redosledu: u kvantnoj mehanici u principu $\hat{f}\hat{g} \neq \hat{g}\hat{f}$ tako da moramo da izaberemo neki redosled kojim se operatori množe. Da budemo eksplicitniji: pretpostavimo npr. da u klasičnom hamiltonijanu imamo sabirak $x^2 p$. Pitanje je, koji ćemo operator u kvantnoj mehanici pridružiti ovom članu: $\hat{x}^2\hat{p}$, $\hat{p}\hat{x}^2$, $\hat{x}\hat{p}\hat{x}$ ili nešto komplikovanije? Svi ovi izrazi su različiti a imaju isti klasični limes. Jedan od kriterijuma je jasan (ali nedovoljan): ako kvantujemo fizičku opservablu, odgovarajući operator treba da bude hermitski, tako da bismo u prethodnom primeru mogli da uzmemo npr. $\hat{x}\hat{p}\hat{x}$ ili $\frac{1}{2}(\hat{x}^2\hat{p} + \hat{p}\hat{x}^2)$. U principu, odgovor na pitanje uredjenja ne zadaje se aksiomatski nego fenomenološki: kvantni model treba da opisuje merenja. U praksi se u stvari problem uredjenja retko postavlja, makar u kvantnoj mehanici, i više je teorijske prirode; u kvantnoj teoriji polja najčešće se koristi tzv. normalno uredjenje operatora.

3.5 Operatori koordinate i impulsa

Kao što smo već pomenuli, u prostoru talasnih funkcija $\psi(x)$ kanonsku komutacionu relaciju

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{3.110}$$

realizuju multiplikativni i diferencijalni operator

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \qquad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}. \tag{3.111}$$

Koordinata i impuls su osnovne veličine koje opisuju česticu pa je važno da ih razumemo i sa formalne odnosno matematičke strane, da ispitamo neke njihove osobine kao što su spektar, svojstvene funkcije, itd. Ispostavlja se da su baš ovi operatori relativno komplikovani odnosno po svojim osobinama razlikuju se od matrica: oba operatora su neograničena a spektar im je kontinualan. Doduše, da Heisenberg-ova algebra (3.110) nema konačne reprezentacije lako se vidi: ako uzmemo trag leve i desne strane ove jednačine, u n-dimenzionom prostoru na levoj strani dobićemo 0 a na desnoj $i\hbar n$ tj. kontradikciju. U beskonačno-dimenzionom slučaju trag i operacije pod tragom definisane su samo kad sve konvergira, što nije slučaj sa (3.110). Ono što je medjutim veoma netrivijalno i vrlo važno je da je reprezentacija (3.111) u osnovi jednoznačna: ovaj iskaz (naravno u svojoj preciznoj formi) zove se Stone-von Neumann-ova teorema.

Napišimo dakle svojstvenu jednačina za koordinatu

$$\hat{x}\psi_a(x) = x\psi_a(x) = a\psi_a(x). \tag{3.112}$$

Očigledno je da ova jednačina nema rešenja u skupu neprekidnih funkcija jer zahteva da funkcija $\psi_a(x)$ pomnožena nezavisno promenljivom x u svakoj tački ima istu vrednost kao $\psi_a(x)$ pomnožena konstantom a. Rešenje jednačine može se naći u klasi tzv. uopštenih funkcija: to delta-funkcija $\delta(x-a)$ koja u svim tačkama ima vrednost 0 osim u $x = a$.

Da bismo stekli intuitivnu predstavu o δ-funkciji uvešćemo jedan od nizova neprekidnih funkcija koje u limesu daju $\delta(x-a)$. Konstrukcija koju opisujemo nema samo pedagoški značaj jer daje konkretni skup fizičkih stanja čiji je limes stanje tačno odredjene vrednosti koordinate. Posmatrajmo za $\alpha > 0$ jednoparametarsku familiju

$$\delta(x-a,\alpha) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha|k|+ik(x-a)}dk = \frac{1}{\pi}\frac{\alpha}{\alpha^2+(x-a)^2}. \tag{3.113}$$

Grafik gornje funkcije za 2-3 vrednosti parametra, i skica delta-funkcije. Lako se vidi da je za svako α funkcija $\delta(x-a,\alpha)$ parna oko tačke $x = a$, pozitivna i da ima maksimum u $x = a$. Takodje, nezavisno od α

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a,\alpha)\, dx = 1. \tag{3.114}$$

Delta-funkcija može da se definiše kao limes

$$\delta(x-a) = \lim_{\alpha\to 0}\delta(x-a,\alpha), \tag{3.115}$$

a iz (3.113) možemo da odredimo vrednost limesa,

$$\delta(x-a) = \begin{cases} 0, & x \neq a \\ \infty, & x = a \end{cases} \tag{3.116}$$

Pošto integral (3.114) ne zavisi od α, imamo i

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)dx = 1. \tag{3.117}$$

Poslednja formula kvantifikuje na neki način 'veličinu' singularnosti δ-funkcije u tački $x = a$. Ako u (3.113) uzmemo limes $\alpha \to 0$ dobijamo Fourier-ovu transformaciju δ-funkcije,

$$\delta(x-a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-a)} dx. \tag{3.118}$$

U reprezentaciji (3.115) može se takodje pokazati da važi formula koja generališe (3.114):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)\, \psi(x)\, dx = \psi(a). \tag{3.119}$$

Dokaz koji sledi važi pod pretpostavkom da je funkcija $\psi(x)$ dovoljno regularna da se redosled limesa i integracije može menjati, dakle da je

$$\mathcal{J} = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)\psi(x)\, dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \lim_{\alpha\to 0} \frac{\alpha}{\alpha^2 + (x-a)^2}\, \psi(x)\, dx. \tag{3.120}$$

Pošto je u limesu $\alpha \to 0$ funkcija $\delta(x-a,\alpha)$ različita od nule samo u malom intervalu oko tačke a, $\psi(x)$ ćemo razviti u Taylor-ov red oko a. Imamo

$$\begin{aligned}
\mathcal{J} &= \int \lim_{\alpha\to 0} \frac{\alpha\, dx}{\alpha^2 + (x-a)^2} \Big(\psi(a) + \psi'(a)(x-a) + \frac{1}{2}\psi''(a)(x-a)^2 + \dots\Big) \\
&= \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha\to 0} \Big(\psi(a) \int \frac{\alpha\, dx}{\alpha^2 + (x-a)^2} + \psi'(a) \int \frac{\alpha(x-a)\, dx}{\alpha^2 + (x-a)^2} + \\
&\quad + \frac{\psi''(a)}{2} \int \frac{\alpha\, dx}{\frac{\alpha^2}{(x-a)^2} + 1} + \dots\Big).
\end{aligned} \tag{3.121}$$

Na desnoj strani poslednje jednakosti doprinos drugog člana je nula jer integralimo funkciju neparnu oko a u simetričnom intervalu; u trećem i ostalim članovima u Taylor-ovom razvoju podintegralna funkcija je u limesu nula. Prema tome ostaje samo doprinos prvog člana,

$$\mathcal{J} = \psi(a) \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\pi} \int \frac{\alpha\, dx}{\alpha^2 + (x-a)^2} = \psi(a). \tag{3.122}$$

Izraz (3.119) se može prepisati pomoću skalarnog proizvoda i tada, u matematički strogoj formulaciji, služi kao definicija δ-funkcije kao elementa dualnog prostora: često se uprošćeno ali u stvari tačno kaže da se δ-funkcija definiše odnosno koristi samo 'pod integralom'. Dalje, kažemo da su dve uopštene funkcije $f(x)$ i $g(x)$ jednake ako su jednake pod integralom, odnosno ako za proizvoljno $\psi(x)$ važi jednakost

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)\psi(x) dx. \tag{3.123}$$

Koristeći ovu osobinu može se pokazati da je

$$(x-a)\delta(x-a) = 0, \tag{3.124}$$

tj. da svojstvena jednačina (3.112) ima rešenje

$$\psi_a(x) = \delta(x-a). \tag{3.125}$$

Pošto je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_a^*(x)\psi_b(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)\,\delta(x-b)dx = \delta(b-a), \tag{3.126}$$

vidimo da su svojstvene funkcije koordinate za različite svojstvene vrednosti a i b ortogonalne. I dalje, da se ne mogu normirati jer je vrednost kvadrata norme beskonačna. Ovo je tipična karakteristika svojstvenih funkcija kontinualnog spektra, jer, da naglasimo, svojstvene vrednosti koordinate nisu ničim ograničene već su proizvoljne tačke realne ose: spektar koordinate cela realna osa kao i u klasičnom slučaju. Činjenica da se $\psi_a(x)$ ne mogu normirati znači da ove funkcije ne predstavljaju prava fizička stanja i nemaju statističku interpretaciju: u prirodi ne postoji stanje sa tačno odredjenim položajem. To nam govore i Heisenberg-ove relacije neodredjenosti.

U Dirac-ovoj notaciji svojstveni vektor koordinate za svojstvenu vrednost a označavaćemo sa $|a\rangle$. Analogno relaciji (3.74) važi

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} a|a\rangle\langle a|da = \int_{-\infty}^{+\infty} x|x\rangle\langle x|dx \tag{3.127}$$

a 'sumiranje' po svojstvenim vrednostima je u stvari integracija po parametru a koji je kontinualan. Skup svojstvenih vektora je kompletan kao i u diskretnom slučaju (3.56),

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|dx, \tag{3.128}$$

tako da za svaki vektor $|\psi\rangle$ važi razvoj po bazisu

$$|\psi\rangle = I|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\psi\rangle dx. \tag{3.129}$$

Koeficijenti u razvoju $\langle x|\psi\rangle$ su u stvari talasne funkcije,

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x), \tag{3.130}$$

tj. talasna mehanika je koordinatna reprezentacija kvantne mehanike u kojoj su sve veličine zapisane u svojstvenom bazisu operatora $\hat{x}$.

Slično možemo analizirati i svojstveni problem operatora impulsa. U koordinatnoj reprezentaciji svojstvena funkcija $\chi_k(x)$ koja odgovara svojstvenoj vrednosti $p = k\hbar$ je rešenje jednačine

$$-i\hbar\,\frac{d\chi_k}{dx} = \hbar k\,\chi_k. \tag{3.131}$$

Kao što smo već više puta videli ova jednačina se lako rešava. Njena rešenja su ravni talasi

$$\chi_k(x) = Ce^{ikx} = \langle x|k\rangle \tag{3.132}$$

i postoje za svaki realan broj p. Dakle i spektar impulsa je cela realna osa. Ni ravni talasi nisu fizička stanja tj. imaju beskonačnu normu, ali su za različite vrednosti impulsa medjusobno ortogonalni. Potpuno analogno sa (3.126) normiraju se na δ-funkciju,

$$\langle q|k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_q^*(x)\,\psi_k(x)dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(q-k)x}dx = \delta(q-k), \tag{3.133}$$

pa se za vrednost normalizacione konstante dobija $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Ako ravne talase umesto na δ-funkciju po k normiramo na δ-funkciju po p, konstanta normiranja je $C' = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$. Slično relacijama (3.127-3.128) važi

$$\hat{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar k|k\rangle\langle k|dk, \qquad I = \int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle\langle k|dk. \tag{3.134}$$

Proizvoljni vektor $|\psi\rangle$ možemo pisati i u impulsnoj reprezentaciji,

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle\langle k|\psi\rangle dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k)|k\rangle dk, \tag{3.135}$$

gde smo koeficijente razvoja označili sa $\tilde{\psi}(k) = \langle k|\psi\rangle$. Vezu izmedju koordinatne i impulsne reprezentacije nije teško odrediti:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x| \int_{-\infty}^{+\infty} dk|k\rangle\langle k|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\tilde{\psi}(k)\,dk, \tag{3.136}$$

to je Fourier-ova transformacija.

3.6 ⋆⋆ Hilbert-ov prostor

Prikaz matematičkog formalizma koji je dat i kako je korišćen u ovoj knjizi i da je nešto precizniji bio bi daleko od pune matematičke strogosti. Taj pristup, uobičajen i u prošlosti i danas, bazira se na ključnom rezultatu o ekvivalentnosti matrične i talasne mehanike koji se najkonciznije vidi kroz Dirac-ovu notaciju, ali i na analogiji velikog broja osobina konačnih i beskonačno-dimenzionih Hilbert-ovih prostora. Takav pristup s druge strane bio je možda čak jedan od povoda von Neumann-u da napiše *Matematičke osnove kvantne mehanike*[7], knjigu veoma važnu za zasnivanje oblasti, gde on u uvodu kaže: 'The method of Dirac, mentioned above, (and this is overlooked today in a great part of quantum mechanical literature, because of

[7] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1955.

the clarity and elegance of the theory) in no way satisfies the requirements of mathematical rigor – not even if these are reduced in a natural and proper fashion to the extent common elsewhere in theoretical physics'. Verovatno je ova ocena prestroga; mi ćemo ipak posvetiti ovo poglavlje dopunama i analizi formalizma. Prvo i najviše zbog kompletnosti, daćemo preciznu definiciju Hilbert-ovog prostora. Glavna odstupanja i za fiziku najvažnije specifičnosti beskonačnog broja dimenzija su u teoriji operatora: to je deo funkcionalne analize u koji uopšte nećemo ulaziti, i zainteresovani čitalac bi trebalo da se upozna sa pojmovima kao što su domen operatora, neprekidnost i ograničenost. Pomenućemo medjutim neke poznate rezultate koji se odnose na Heisenberg-ovu i Weyl-ovu algebru kao i jedan primer iz moderne fizike u kome se kvantnomehanička kanonska komutaciona relacija generališe.

Dakle precizno formulisan, standardni postulat kvantne mehanike je: PROSTOR STANJA FIZIČKOG SISTEMA JE SEPARABILNI HILBERT-OV PROSTOR. Većinu pojmova koji se u gornjoj rečenici koriste već smo uveli, i da dopunimo: Hilbert-ov prostor je konačno ili beskonačno-dimenzioni linearni prostor sa skalarnim proizvodom koji je POTPUN. Videli smo da je skalarni proizvod važan za statističku interpretaciju; sem toga, u apstraktno definisani prostor stanja skalarni proizvod uvodi pojmove norme i rastojanja. Norma vektora ψ iz vektorskog prostora V je funkcional koji vektoru pridružuje realan broj, $\parallel\ \parallel: V \to R$, i ima sledeće osobine:

$$\begin{aligned} &\parallel \psi \parallel \geq 0, \quad \parallel \psi \parallel = 0 \ \text{ samo ako je } \psi = 0, \\ &\parallel \psi + \phi \parallel \leq \parallel \psi \parallel + \parallel \phi \parallel \quad \text{(nejednakost trougla)}, \\ &\parallel a\psi \parallel = |a| \parallel \psi \parallel . \end{aligned} \tag{3.137}$$

Jasno je da u prostoru sa skalarnim proizvodom norma može da se definiše kao

$$\parallel \psi \parallel = \langle \psi | \psi \rangle, \tag{3.138}$$

pri čemu se nejednakost trougla svodi na Schwarz-ovu nejednakost. Prostor sa normom je metrički prostor a rastojanje elemenata ψ i ϕ je

$$d(\psi, \phi) = \parallel \psi - \phi \parallel . \tag{3.139}$$

Sada možemo da definišemo potpunost. Prostor V je potpun ako u njemu svaki Cauchy-jev (fundamentalni) niz konvergira, tj. ako osim elemenata i limes svakog Cauchy-jevog niza pripada prostoru V. Da se podsetimo: niz ψ_n nazivamo Cauchy-jevim ako za proizvoljno malo ϵ postoji n tako da je rastojanje $d(\psi_{n_1}, \psi_{n_2}) \leq \epsilon$ za sve članove niza počevši od n-tog, $n_1, n_2 \geq n$. Potpunost vektorskog prostora je matematički dosta prirodan zahtev zatvorenosti strukture: u klasičnoj mehanici npr. fizičke promenljive uvek opisujemo brojevima realne ose koja se dobija upotpunjavanjem (kompletiranjem) skupa racionalnih brojeva. Slično tome i svaki vektorski prostor može se, dodavanjem graničnih vrednosti svih Cauchy-jevih nizova, kompletirati.

Zahtev separabilnosti prostora stanja je malo manje intuitivan. Separabilnim se naziva vektorski prostor V koji ima prebrojiv i svuda gust podskup S, tj. podskup za koji važi: za svaki broj $\epsilon > 0$ i svaki vektor $\psi \in V$ postoji stanje $\chi \in S$ takvo da je rastojanje $d(\psi, \chi) \leq \epsilon$. Znači, stanja iz V mogu se sa proizvoljnom preciznošću aproksimirati stanjima iz prebrojivog podskupa. Ovakav medjusobni odnos na primer imaju skup racionalnih i skup realnih brojeva: svaki realan broj može se proizvoljno dobro aproksimirati racionalnim. U svojoj knjizi iz funkcionalne analize,[8] Kurepa kaže da separabilan Hilbert-ov prostor 'nije ni "malen" jer je beskonačno-dimenzion, a ni "prevelik" jer je separabilan'. Za separabilne Hilbert-ove prostore važi nekoliko teorema važnih za kvantnu mehaniku: svaki ortonormirani skup vektora ovakvog prostora je prebrojiv; prostor ima ortonormirani bazis; i konačno, svaka dva separabilna Hilbert-ova prostora su izomorfna.

Slično uslovu potpunosti, ni uslov separabilnosti nije direktno povezan sa nekom specifičnom fizičkom osobinom i zapravo je u neku ruku zahtev da stanja imaju odredjeniju i bogatiju strukturu a ne sasvim opštu: u kvantnoj mehanici dovoljno je uzeti kvadratno-integrabilne funkcije. Ima medjutim slučajeva kada se iz nekog fizičkog razloga za (kinematički) prostor stanja uzima neseparabilan prostor: interesantan primer je 'loop' kvantna kosmologija.[9] Za razliku od toga, pozitivnost skalarnog proizvoda $\langle\psi|\psi\rangle$ direktno je povezana sa interpretacijom. Ipak ni ovaj poslednji zahtev ne može uvek da se zada pre nego što se konstruiše reprezentacija odnosno model: na primer kod Gupta-Bleuler-ovog kovarijantnog kvantovanja elektromagnetnog polja polazi se od prostora stanja sa indefinitnom metrikom, a tek Lorentz-ov kalibracioni uslov $\langle\psi|\,\partial_\mu A^\mu|\psi\rangle = 0$ redukuje taj početni prostor na prostor fizičkih stanja za koja važi i $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$. U stvari u kvantnoj teoriji polja prostor stanja, tzv. Fock-ov prostor, po pravilu se uvodi konstrukcijom: najvažniji deo te konstrukcije su operatori kreacije i anihilacije.

Za razliku od teorije polja, mehanički sistemi odnosno sistemi sa konačnim brojem stepeni slobode imaju veoma dobru osobinu da je njihovo kvantovanje jednoznačno. Ova osobina proističe iz Stone-von Neumann-ove teoreme koja kaže da je svaka ireducibilna reprezentacija kanonske komutacione relacije

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \tag{3.140}$$

gde su $\hat{x}$ i $\hat{p}$ hermitski, ekvivalentna Schrödinger-ovoj reprezentaciji

$$\hat{x} \to x, \qquad \hat{p} \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}. \tag{3.141}$$

[8] S. Kurepa, *Funkcionalna analiza*, Školska knjiga, 1981.

[9] A. Ashtekar, S. Fairhurst and J. L. Willis, *Quantum gravity, shadow states, and quantum mechanics*, Class. Quant. Grav. **20** (2003) 1031 [gr-qc/0207106].

Dodatni uslov je da se koordinata i impuls reprezentuju u separabilnom prostoru. Dokaz teoreme izvodi se razmatranjem eksponenata od $\hat{x}$ i $\hat{p}$ koje je prvi put uveo Weyl,[10]

$$U(\sigma) = e^{-i\sigma\hat{p}}, \quad V(\tau) = e^{-i\tau\hat{x}}, \tag{3.142}$$

i pošto se Weyl-ova grupa i danas veoma često koristi zadržaćemo se malo na njenim osobinama: prvo ćemo izvesti zakon množenja. Za računanje sa veličinama koje ne komutiraju kao što su matrice ili operatori, jedna od najvažnijih jednakosti je Baker-Campbell-Hausdorff-ova formula

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \dots . \tag{3.143}$$

Ovu formulu nije tako teško dokazati uvodjenjem funkcije $F(s) = e^{sA} B e^{-sA}$ i njenim razvojem u Taylor-ov red po s. Mi ćemo (3.143) prvo primeniti da izračunamo izraz $U^{-1}\hat{x}\,U$. Pošto je $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$ a $[\hat{p}, [\hat{p}, \hat{x}]] = 0$, imamo

$$e^{i\sigma\hat{p}}\,\hat{x}\,e^{-i\sigma\hat{p}} = \hat{x} + \hbar\sigma, \tag{3.144}$$

odnosno

$$U^{-1}(\sigma)\,\hat{x}\,U(\sigma) = \hat{x} + \hbar\sigma. \tag{3.145}$$

Moženjem sa U sleva poslednja relacija se može prepisati kao

$$[\hat{x}, U(\sigma)] = \hbar\sigma U(\sigma). \tag{3.146}$$

Sada možemo da odredimo i $V^{-1}UV$. Iz

$$e^{i\tau\hat{x}} U e^{-i\tau\hat{x}} = U + i\tau[\hat{x}, U] + \frac{(i\tau)^2}{2!}[\hat{x}, [\hat{x}, U]] + \dots \tag{3.147}$$

korišćenjem (3.146) dobijamo

$$V^{-1}(\tau)\,U(\sigma)\,V(\tau) = e^{i\tau\sigma\hbar}\,U(\sigma), \tag{3.148}$$

odnosno

$$U(\sigma)\,V(\tau) = e^{i\tau\sigma\hbar}\,V(\tau)\,U(\sigma), \tag{3.149}$$

ili ako označimo sa $\hat{u} = U(\sigma)$, $\hat{v} = V(\sigma)$ i $q = e^{i\tau\sigma\hbar}$ dobija se

$$\hat{u}\hat{v} = q\hat{v}\hat{u}. \tag{3.150}$$

Sve ove relacije definišu Weyl-ovu algebru. Interesantno je da Weyl-ova algebra (3.150), za razliku od Heisenberg-ove algebre (3.140), za specijalne vrednosti konstante q koje su koreni jedinice, $q^n = 1$, ima konačnu n-dimenzionu reprezentaciju. Ona je data tzv. 'clock' i 'shift' matricama

$$\hat{x} = i\log\hat{v} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q^2 & \dots & 0 \\ . & . & . & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q^{n-1} \end{pmatrix}, \qquad \hat{u} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ . & . & . & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

[10] H. Weyl, The theory of groups and quantum mechanics, Dover Publications, 1931.

Kanonska komutaciona relacija (3.140) je u nekom smislu, srž kvantovanja (preciznije: kanonskog kvantovanja; kvantovanje se, videćemo kasnije, može definisati i polazeći od simetrija) ali je, interpretirana geometrijski, vezana za ravan prostor tj. trodimenzioni euklidski ili četvorodimenzioni prostor Minkowskog. Zato je prirodno da se pretpostavi da se u zakrivljenom prostoru ili na primer na veoma visokim energijama ona modifikuje. Jedna modifikacija koja sledi iz teorije struna data je sa

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar(1 + \beta\hat{p}^2), \tag{3.151}$$

gde je $\beta > 0$ dimenziona konstanta koja zadaje skalu energije na kojoj se odstupanja od standardne kvantne mehanike uočavaju. Pošto je relacija (3.151) dosta jednostavna a ima interesantne posledice, malo ćemo se na njoj zadržati. Jedna od predikcija ovako definisane teorije je da greška merenja položaja ne može da se proizvoljno smanji: postoji donja granica greške. Ovo se vidi iz relacija neodredjenosti

$$\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} \geq \frac{1}{2}\,|\langle[\hat{x}, \hat{p}]\rangle|, \tag{3.152}$$

tj. u našem slučaju iz

$$\langle[\hat{x}, \hat{p}]\rangle = i\hbar\big(1 + \beta\langle\hat{p}^2\rangle\big) = i\hbar\big(1 + \beta(\Delta\hat{p})^2 + \beta\langle\hat{p}\rangle^2\big). \tag{3.153}$$

Iz poslednje jednačine vidimo da relacije neodredjenosti mogu da se napišu kao

$$\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}\big(1 + \beta(\Delta\hat{p})^2\big), \tag{3.154}$$

odnosno

$$\Delta\hat{x} \geq \frac{\hbar}{2}\big(\frac{1}{\Delta\hat{p}} + \beta\Delta\hat{p}\big). \tag{3.155}$$

Iz grafika gornje zavisnosti $\boxed{\text{Ova sličica! } y = \frac{\hbar}{2}(\frac{1}{x} + \beta x)}$ lako vidi se da neodredjenost $\Delta\hat{x}$ ima minimalnu vrednost za vrednost $\Delta\hat{p} = 1/\sqrt{\beta}$, odnosno da je

$$\Delta\hat{x} \geq \hbar\sqrt{\beta} \tag{3.156}$$

u svim fizičkim stanjima. Ovakva osobina poželjna je na primer u kvantnoj gravitaciji, jer principijelna nemogućnost lokalizacije može da bude rešenje problema singulariteta koji je jedan od problema Einstein-ove klasične teorije gravitacije, npr. singulariteta crnih rupa. Reprezentacija algebre (3.151) na prostoru kvadratno-integrabilnih funkcija data je u radu[11] i ima interesantne osobine iz kojih se mogu naučiti neki detalji iz teorije operatora, npr. razlika izmedju simetričnog i hermitskog (autoadjungovanog) operatora kao i pojam indeksa defekta.

[11] A. Kempf, G. Mangano and R. B. Mann, *Hilbert space representation of the minimal length uncertainty relation*, Phys. Rev. D **52** (1995) 1108 [hep-th/9412167].

3.7 Dinamika kvantne mehanike

Prvi i drugi princip ili postulat kvantovanja zadaju kinematiku kvantne mehanike, tj. matematički okvir u kome se teorija formuliše, i kao što smo videli neophodnost baš ovakvog opisa sledi iz podataka skupljenih u eksperimentima. Slično tome, iz eksperimenata se dobija i dinamički zakon odnosno jednačina koja opisuje promenu stanja sistema sa vremenom. Mi smo doduše Schrödinger-ovu jednačinu i neka njena rešenja već u dobroj meri upoznali, ali formulisaćemo je ponovo i malo opštije i zapisati u Dirac-ovoj notaciji. Dakle treći, dinamički, 'postulat' kvantne mehanike glasi: Evolucija stanja fizičkog sistema opisana je Schrödinger-ovom jednačinom,

$$i\hbar\,\frac{d\,|\Psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}\,|\Psi(t)\rangle, \tag{3.157}$$

gde je $\hat{H}$ hamiltonijan sistema, operator koji se dobija kvantovanjem klasičnog hamiltonijana tj. u slučaju konzervativnog sistema, energije. Kad stanje reprezentujemo u koordinatnoj reprezentaciji kao talasnu funkciju $\Psi(\vec{r},t)$ jednačina postaje

$$i\hbar\,\frac{\partial\,\Psi}{dt} = \hat{H}\,\Psi, \tag{3.158}$$

i vidimo da je dinamički postulat u nekom smislu analogan kinematičkim jer se uprošćeno može opisati preskripcijom $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ koja je analogna sa $\vec{p} \to -i\hbar\nabla$.

Pošto je jednačina (3.157) linearna i važi za sva stanja $|\Psi(t)\rangle$, može se formalno rešiti uvodjenjem operatora evolucije $\hat{U}(t,t_0)$:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)\,|\Psi(t_0)\rangle, \tag{3.159}$$

pri čemu je $\hat{U}(t,t_0)$ unitaran operator jer su fizička stanja u svim trenucima normirana, $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 1$. Najčešće ćemo uzimati da je $t_0 = 0$ i pisati $\hat{U}(t,0) = \hat{U}(t)$. Iz Schrödinger-ove jednačine sledi da operator evolucije zadovoljava

$$i\hbar\,\frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U}, \tag{3.160}$$

a početni uslov za $\hat{U}(t)$ je

$$\hat{U}(0) = I. \tag{3.161}$$

U principu, rešavanje operatorske jednačine teži je problem od rešavanja obične, čak i parcijalne, jednačine, zbog nekomutativnosti množenja operatora. Ali u specijalnom slučaju konzervativnog sistema, kada $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$, (3.160) rešava se lako, jer može da se pretpostavi da je $\hat{U}$ funkcija samo od $\hat{H}$ i vremena t koje je parametar. Tada iz

$$i\hbar\,\frac{d\hat{U}}{dt}\,U^{-1} = i\hbar\,\frac{d\log\hat{U}}{dt} = \hat{H} \tag{3.162}$$

i pretpostavke da $\frac{d\hat{U}}{dt}$ komutira sa $\hat{U}$ dobijamo

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}. \tag{3.163}$$

Naravno kao što znamo, svojstvena stanja hamiltonijana (koji ne zavisi od vremena) su stacionarna, jer ako je

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{3.164}$$

imamo i

$$|n(t)\rangle = \hat{U}(t)|n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle. \tag{3.165}$$

Medjutim ako hamiltonijan zavisi eksplicitno od vremena, rešenje jednačine (3.160) u opštem slučaju ne može da se odredi.

Sada ćemo formulisati još jednu vezu kvantne i klasične mehanike odnosno klasični limes, ovoga puta dinamički: Ehrenfest-ovu teoremu. Ehrenfest-ova teorema daje zakon promene očekivane vrednosti opservable $\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$ sa vremenom i dobićemo je ako gornji izraz diferenciramo:

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \frac{d\langle\Psi(t)|}{dt}\,\hat{A}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\hat{A}\,\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt}.$$

Drugi sabirak u poslednjem izrazu različit je od nule samo ako $\hat{A}$ eksplicitno zavisi od vremena, npr. ako je neka veličina vezana za promenljivo spoljašnje polje. S druge strane, prvi i treći sabirak zamenjujemo iz Schrödinger-ove jednačine (3.157) i njoj adjungovane, i dobija se

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle - \frac{i}{\hbar}\,\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle. \tag{3.166}$$

Ovo je Ehrenfest-ova teorema. Iskaz Ehrenfest-ove teoreme može da se uporedi sa osnovnom jednačinom kretanja klasične mehanike zapisanom u Hamilton-ovom formalizmu. Vremenska promena proizvoljne klasične opservable A data je sa

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A,H\}_{PZ}, \tag{3.167}$$

i opet vidimo pravilo da pri kvantovanju Poisson-ova zagrada 'prelazi' u komutator, odnosno $\{A,H\}_{PZ} \mapsto -\frac{i}{\hbar}\,[\hat{A},\hat{H}]$. Ako za opservablu $\hat{A}$ uzmemo koordinatu ili impuls, u slučaju hamiltonijana $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ dobijamo

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{x},\hat{H}]\rangle = \langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}}\rangle = \langle\frac{\hat{p}}{m}\rangle, \tag{3.168}$$

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle = -\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{x}}\rangle. \tag{3.169}$$

Poslednje dve jednačine analogne su, opet, Hamilton-ovim jednačinama kretanja za položaj i impuls ali naravno nisu identične jer kao što znamo, $f(\langle\hat{x}\rangle) \neq \langle f(\hat{x})\rangle$.

3.8 ⋆ Schrödinger-ova i Heisenberg-ova slika

Opis kvantne mehanike koji koristimo, u kome talasna funkcija odnosno stanje sistema zavise od vremena a osnovne opservable ne zavise naziva se Schrödinger-ova slika: ona je prirodno proistekla iz analogije 'talasa materije' sa elektromagnetnim odnosno klasičnim talasima koja je bila osnova intuicije Schrödinger-a, de Broglie-a i drugih. Ali talasna funkcija nije direktno merljiva fizička veličina već je to npr. gustina verovatnoće nalaženja čestice, $\rho(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2$ ili očekivane vrednosti, recimo $\langle \hat{r}^2\rangle = \int r^2 \rho(\vec{r},t)\, dv$, i zbog toga već smo videli funkcije $e^{i\chi(\vec{r},t)}\Psi(\vec{r},t)$ koje se od $\Psi(\vec{r},t)$ razlikuju do na fazni faktor opisuju isto kvantno stanje kao i $\Psi(\vec{r},t)$.

U stvari svi rezultati merenja su ili svojstvene vrednosti opservabli ili verovatnoće njihovog nalaženja. Ove veličine ne menjaju se pri unitarnim transformacijama i ta sloboda može se iskoristiti da se kvantnomehanički opis preformuliše na drugačiji način pri čemu se vremensku evolucija može 'prebaciti' sa stanja na opservable. Naime, u Schrödinger-ovoj slici amamo

$$|\Psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle_S, \qquad \hat{A}_S(t) = \hat{A}_S(0) = \text{const} \tag{3.170}$$

za osnovne operatore kao što su položaj, impuls itd. Označićemo početne vrednosti stanja i opservable sa

$$|\Psi(0)\rangle_S = |\Psi\rangle, \qquad \hat{A}_S(0) = \hat{A}. \tag{3.171}$$

Očekivana vrednost operatora $\hat{A}_S$ u stanju $|\Psi_S\rangle$, izračunata u Schrödinger-ovoj slici je

$$\langle\hat{A}\rangle(t) = \langle\Psi(t)|_S\hat{A}|\Psi(t)\rangle_S = \langle\Psi|\hat{U}^{-1}(t)\hat{A}\hat{U}(t)|\Psi\rangle. \tag{3.172}$$

Naravno, ista čekivana vrednost se dobija kad sve veličine transformišemo nekim unitarnim operatorom: izbor operatora $\hat{U}^{-1}(t)$ daje tzv. Heisenberg-ovu sliku:

$$|\Psi(t)\rangle_H = \hat{U}^{-1}(t)|\Psi(t)\rangle_S = |\Psi\rangle, \qquad \hat{A}_H(t) = \hat{U}^{-1}(t)\hat{A}\hat{U}(t). \tag{3.173}$$

Vidimo da u Heisenberg-ovoj slici operatori zavise od vremena, a stanja ne. Za razliku od Schrödinger-ove slike u kojoj je, kao što znamo,

$$i\hbar\,\frac{d|\Psi(t)\rangle_S}{dt} = \hat{H}_S|\Psi(t)\rangle_S, \qquad i\hbar\,\frac{d\hat{A}_S}{dt} = 0, \tag{3.174}$$

jednačine kretanja u Heisenberg-ovoj slici glase

$$i\hbar\,\frac{d|\Psi(t)\rangle_H}{dt} = 0, \qquad i\hbar\,\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)]. \tag{3.175}$$

Naravno početni uslov je i ovde

$$|\Psi(0)\rangle_H = |\Psi\rangle, \qquad \hat{A}_H(0) = \hat{A} \tag{3.176}$$

jer je u trenutku $t = 0$, $\hat{U}(0) = I$. Jednačina (3.175) je analogna Hamilton-ovoj formi klasičnog zakona kretanja i dobija se iz

$$i\hbar\frac{d}{dt}(\hat{U}^{-1}\hat{A}_S\hat{U}) = i\hbar\,\big(\frac{d\hat{U}^{-1}}{dt}\,\hat{A}_S\hat{U} + \hat{U}^{-1}\hat{A}\,\frac{d\hat{U}^{-1}}{dt}\big)$$

$$= -\hat{U}^{-1}\hat{H}_S\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{A}_S\hat{U} + \hat{U}^{-1}\hat{A}_S\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{H}_S\hat{U},$$

što zaključujemo iz jednačine (3.160) i njoj adjungovane

$$-i\hbar\,\frac{d\hat{U}^\dagger}{dt} = -i\hbar\,\frac{d\hat{U}^{-1}}{dt} = \hat{U}^{-1}\hat{H}. \tag{3.177}$$

Naravno kada je sistem konzervativan $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ pa je i

$$\hat{H}_S(t) = \hat{H}_H(t) = \hat{H}. \tag{3.178}$$

U kvantnoj teoriji polja je veoma važna treća, tzv. interakciona ili Dirac-ova slika. Nju dobijamo kada hamiltonijan koji opisuje prostiranje polja izrazimo kao zbir hamiltonijana slobodnog polja $\hat{H}_0$ i hamiltonijana interakcije $\hat{H}'$,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \tag{3.179}$$

Po pravilu, $[\hat{H}_0, \hat{H}'] \neq 0$. Iz Schrödinger-ove slike u interakcionu prelazi se operatorom $\hat{U}_0(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$:

$$|\Psi(t)\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Psi(t)\rangle_S = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi\rangle, \qquad \hat{A}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}.$$

Očigledno, u interakcionoj slici i stanja i opservable zavise od vremena. Diferenciranjem poslednje jednačine možemo da dobijemo odgovarajući zakon evolucije:

$$i\hbar\,\frac{d|\Psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{H}'_I(t)\,|\Psi(t)\rangle_I \tag{3.180}$$

$$i\hbar\,\frac{d\hat{A}_I(t)}{dt} = [\hat{A}_I(t), \hat{H}_{0,I}(t)]. \tag{3.181}$$

Stanja evoluiraju po interakcionom delu hamiltonijana, a opservable po slobodnom. Ovo poslednje je važno jer omogućava da se interagujuća polja kvantuju na isti način na koji se kvantuju slobodna polja.

3.9 Operatori kreacije i anihilacije

Priču o jednodimenzionim modelima završićemo tako što ćemo ponovo rešiti svojstveni problem harmonijskog oscilatora ali algebarski, uvodeći operatore kreacije i anihilacije. Ovaj metod je jedan od najvažnijih kvantnomehaničkih metoda: konstrukcija prostora stanja iz vakuuma delovanjem operatora kreacije (Fock-ov prostor) primenjuje se, izmedju ostalog, i na kvantovanje polja.

Svojstveni problem hamiltonijana $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ može se rešiti algebarski analizom osobina ovog operatora. Uvedimo (bezdimenzioni) operator anihilacije

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}. \tag{3.182}$$

$\hat{a}$ očigledno nije hermitski operator; njegov adjungovani $\hat{a}^\dagger$ zove se operator kreacije (bezdimenzioni) operator anihilacije

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \tag{3.183}$$

a proizvod

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{3.184}$$

je hermitski ali i nenegativan operator: sve njegove očekivane (pa zato i sve svojstvene) vrednosti su pozitivni brojevi ili nula. Lako se proverava da važi komutaciona relacija

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \tag{3.185}$$

Osim toga, hamiltonijan oscilatora se može izraziti preko $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}), \tag{3.186}$$

tako da je svojstveni problem od $\hat{H}$ ekvivalentan svojstvenom problemu od $\hat{N}$.

Označimo svojstvene vektore operatora $\hat{N}$ (koji postoje, jer je $\hat{N}$ hermitski, i medjusobno su ortogonalni) sa $|n\rangle$:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \tag{3.187}$$

Pošto je $\hat{N}$ nenegativan operator, brojevi n su pozitivni ili nula. Dalje, lako se proveravaju relacije

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -a, \qquad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger. \tag{3.188}$$

sad ćemo pokazati da je i svaki vektor $|\varphi\rangle = \hat{a}^\dagger|n\rangle$ svojstveni vektor od $\hat{N}$. To se vidi iz sledećeg niza jednakosti:

$$\hat{N}|\varphi\rangle = \hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{N}+1)|n\rangle = (n+1)|\varphi\rangle. \tag{3.189}$$

Prema tome, $|\varphi\rangle$ je svojstveni vektor za svojstvenu vrednost $n+1$. Delovanje operatora kreacije menja i dužinu vektora $|n\rangle$. Ako je $|n\rangle$ normiran, $\langle n|n\rangle = 1$, kvadrat dužine vektora $|\varphi\rangle$ dat je sa

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\varphi\rangle = \langle n|(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1)|\varphi\rangle = n+1. \tag{3.190}$$

To znači da je

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle. \tag{3.191}$$

Slično, možemo pokazati da operator anihilacije deluje na sledeći način:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle. \tag{3.192}$$

$\hat{a}^\dagger$ podiže svojstvenu vrednost od $\hat{N}$ za jedan, a $\hat{a}$ je smanjuje za jedan. Prema tome, napr.

$$\hat{a}^k|n\rangle = \sqrt{n(n-1)\dots(n-k+1)}\,|n-k\rangle. \tag{3.193}$$

Ovom konstrukcijom dobili smo da, polazeći od jedne svojstvene vrednosti, n, operatora $\hat{N}$ dobijamo čitav niz vrednosti $n+k$ i $n-k$ za svaki ceo broj (koraka) k. Ali, to istovremeno znači da se u spektru nužno nalaze negativne svojstvene vrednosti, jer k može biti proizvoljno veliko! Odnosno, naša konstrukcija je kontradiktorna. Osim u slučaju kad se medju svojstvenim vrednostima nalazi 0, jer tada delovanje operatora anihilacije daje

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \tag{3.194}$$

jer je $\sqrt{0} = 0$. Time se deo niza svojstvenih vrednosti ispod 0 prekida. Da smo krenuli od nekog ne-celog broja, napr $n = 0.2$, ne bismo mogli da dobijemo uslov prekidanja niza jer bi onda relacija (3.192) glasila

$$\hat{a}|0.2\rangle = \sqrt{0.2}\,|-0.8\rangle, \tag{3.195}$$

i konstruisali bismo, kontradiktorno, svojstveni vektor $|-0.8\rangle$ koji ima negativnu svojstvenu vrednost.

Dakle, samo u slučaju kad je skup svojstvenih vektora upravo $\{\,|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle\dots\}$ rešenje svojstvenog problema ima smisla. Svojstvene vrednosti od $\hat{N}$ su pozitivni i celi brojevi. Ovim smo istovremeno rešili i svojstveni problem hamiltonijana harmonijskog oscilatora: njegov spektar je

$$E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2}), \tag{3.196}$$

kao što smo, uostalom, i ranije dobili. Osnovno stanje, tj. stanje najniže energije $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ je stanje $|0\rangle$ i naziva se vakuum.

Zadatak Odrediti talasnu funkciju osnovnog stanja harmonijskog oscilatora $\langle x||0| =\rangle\psi_0(x)$ u koordinatnoj reprezentaciji iz uslova $\hat{a}\psi_0 = 0$. Iz talasne funkcije osnovnog stanja, delovanjem operatora $\hat{a}^\dagger$, odrediti talasne funkcije prvog i drugog pobudjenog stanja.
Zadatak Napisati relacije (3.191) i (3.192) u koordinatnoj reprezentaciji i pokazati da one u stvari daju rekurentne relacije izmedju Hermité-ovih polinoma.

Zadatak Rešiti svojstveni problem operatora anihilacije,

$$\hat{a}\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x) \tag{3.197}$$

za proizvoljno kompleksno α (operator $\hat{a}$ nije hermitski!). Mogu li se funkcije $\psi_\alpha(x)$ normirati; da li su medjusobno ortogonalne? Svojstvene funkcije 0d $\hat{a}$, $\langle x||\alpha| =\rangle\psi_\alpha(x)$ nazivaju se koherentna stanja. Pokazati da je u svakom koherentnom stanju $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}$.

Zadatak Razviti koherentno stanje $|\alpha\rangle$ po bazisu energije $|n\rangle$, tj. odrediti koeficijente c_n:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle \tag{3.198}$$

Pretpostaviti da je $|\alpha\rangle$ normirano, $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$.

3.10 Zadaci

1. Pokazati 1) $\delta'(x) = -\delta'(-x)$; 2) $\delta(bx) = \frac{\delta(x)}{|b|}$; 3) $\int_b^c \delta(x-a)dx = \theta(c-a)\theta(a-b)$, gde je $\theta(x-a) = \begin{cases} 1, & x > a \\ 0, & x < a \end{cases}$ tzv. step-funkcija, i 4) $\theta'(x-a) = \delta(x-a)$.

2. Pokazati da se definiciona formula za δ-funkciju svodi na razlaganje jedinice,

$$\langle x|\psi\rangle = \int \langle x|y\rangle\langle y|\psi\rangle dy. \tag{3.199}$$

3. Druga aproksimacija δ-funkcije koja se koristi kod vremenski zavisne perturbacije

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi t\alpha^2} = \delta(\alpha) \tag{3.200}$$

da se pokaže da je OK.

4. Treća aproksimacija (u 2d, može i u 1d u 1d treba pogledati stepen)

$$\lim_{\sigma\to 0} \frac{1}{2\pi\sigma^2}\, e^{-\frac{(p+q)^2}{2\sigma^2}} = \delta^2(p+q) \tag{3.201}$$

Glava 4

Višedimenzioni sistemi

4.1 Orbitni ugaoni moment

Već smo u uvodu videli da je, za razliku od koordinate i impulsa, moment impulsa fizička veličina koja ima diskretni spektar. Sa druge strane, kad imamo zadato delovanje impulsa i koordinate, moment impulsa dat je , kao i u klasičnoj mehanici, izrazom $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, odnosno

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad {}_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x. \tag{4.1}$$

Prvo možemo da primetimo da, pošto raznoimene koordinate i impulsi komutiraju npr. $[y, p_z] = 0$, odnosno

$$[x^i, p_j] = i\hbar\delta^i_j, \tag{4.2}$$

komponente operatora momenta impulsa su dobro definisane tj. hermitski su operatori a problem uredjenja ne postoji. Koristeći potpuno antisimetrični tenzor ϵ_{ijk} (tenzor Levi-Civita), koji se definiše osobinom antisimetrije pri izmeni svaka dva indeksa, i $\epsilon_{123} = 1$, vektorski proizvod tj. determinanta može da se izrazi kao

$$L_i = \epsilon_{ijk}x_j p_k. \tag{4.3}$$

Ovde se, kao i ranije, koristi sumaciona konvencija: po ponovljenom indeksu se sumira po svim njegovim vrednostima, tj. od 1 do 3.

Komponente momenta impulsa medjusobno ne komutiraju: lako se može proveriti da je

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \tag{4.4}$$

ili opštije,

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \tag{4.5}$$

Pošto je $\vec{L}$ proizvod koordinate i impulsa, ima dimenzije iste kao dejstvo odnosno kao Planck-ova konstanta $\hbar$. Sa druge strane, sve komponente momenta impulsa komutiraju sa kvadratom

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_i L_i. \tag{4.6}$$

Moment impulsa kao vektor, odnosno sve tri njegove komponente, ne mogu se tačno izmeriti. Ono što najbolje možemo da odredimo istovremeno je kvadrat momenta impulsa, L^2 i jedna od njegovih projekcija, npr. L_z.

———— (Može se) Pokazati da je

$$[L_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k, \qquad [L_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}p_k, \tag{4.7}$$

kao i

$$[L_i, r^2] = 0, \qquad [L_i, p^2] = 0. \tag{4.8}$$

Sad ćemo pokazati kako se svojstvena jednačina za L^2 i L_z rešava u koordinatnoj reprezentaciji. Pošto moment impulsa generiše rotacije, najjednostavniji oblik ima u sfernim koordinatama r, θ, φ. Veza izmedju Dekartovih koordinata $x,\ y,\ z \in (-\infty, +\infty)$ i sfernih koordinata $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi)$, $\varphi \in [0, 2\pi)$ je data se

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta, \tag{4.9}$$

odnosno

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \arctan\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, \quad \varphi = \arctan\frac{y}{x}. \tag{4.10}$$

Da bi se odredio oblik operatora momenta impulsa npr. $L_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$ treba izvršiti smenu promenljivih u parcijalnom izvodu. Na primer

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&= \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
\frac{\partial}{\partial x} &= \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
\frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Konačni rezultat je

$$\begin{aligned}
L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
L_x &= i\hbar\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\hbar\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
L_y &= -i\hbar\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\hbar\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
L_\pm &= \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)
\end{aligned} \tag{4.12}$$

kao i

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right). \tag{4.13}$$

Zadatak Izvesti (4.13) iz formule $L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$. Paziti pri tome da, npr., $\cot\theta$ i $\frac{\partial}{\partial\theta}$ ne komutiraju!

Kao što vidimo, komponente $\vec{L}$ ne zavise od radijalne koordinate r. Prema tome kad rešavamo zajednički svojstveni problem

$$\begin{aligned} L^2 \psi(r, \theta\varphi) &= a\hbar^2 \psi(r, \theta, \varphi) \\ L_z \psi(r, \theta\varphi) &= b\hbar \psi(r, \theta, \varphi), \end{aligned} \tag{4.14}$$

možemo odmah razdvojiti promenljive,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) f(\theta, \varphi). \tag{4.15}$$

Pri tome gornje jednačine postaju

$$\hbar^2 R \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial f}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} \right) = a\hbar^2 RF, \tag{4.16}$$

$$-i\hbar R \frac{\partial f}{\partial\varphi} = b\hbar R f, \tag{4.17}$$

Tako da se odmah vidi da funkciju $R(r)$ možemo da "skratimo" odnosno da ona nije odredjena sistemom jednačina (4.16-4.17). I promenljive θ i φ mogu da se razdvoje: uvodjenjem

$$f(\theta, \varphi) = T(\theta) F(\varphi) \tag{4.18}$$

jednačina (4.17) postaje

$$-i\hbar \frac{dF}{d\varphi} = b\hbar F \tag{4.19}$$

i ima rešenje $F + e^{ib\varphi}$. Iz zahteva da je vrednost funkcije F odnosno ψ ista za $\varphi = 0$ i $\varphi = 2\pi$ tj. da je talasna funkcija jednoznačno definisana u xz-ravni, dobijamo da $b = m$ mora biti *ceo broj*. Tako se dobija da je moment impulsa kvantovan. Treba medjutim zapaziti da svojstvene funkcije orbitnog ugaonog momenta imaju samo celobrojne svojstvene vrednosti za m i l, dok smo u opštem slučaju dobili da su moguće i polucele vrednosti.

Pošto su sve promenljive u talasnoj funkciji razdvojene:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) T(\theta) F(\varphi), \tag{4.20}$$

normiranje se može vršiti po svakoj koordinati zasebno. Uslov

$$\int \psi^* \psi dV = 1 \tag{4.21}$$

ispunićemo zadajući

$$\int_0^\infty R^* R r^2 dr = 1, \quad \int_0^\pi T^* T \sin\theta d\theta = 1, \quad \int_0^{2\pi} F^* F d\varphi = 1. \tag{4.22}$$

Prema tome, vidimo da su normirane svojstvene funkcije operatora L_z

$$F_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \tag{4.23}$$

Zamenjujući dobijenu funkciju $F_m(\varphi)$ u jednačinu (4.16) dobijamo diferencijalnu jednačinu za $T(\theta)$:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\frac{dT}{d\theta}) + (a - \frac{m^2}{\sin^2\theta})T = 0. \tag{4.24}$$

Jednačina zavisi od obe svojstvene vrednosti, a i m. Uvodjenjem smene $\xi = \cos\theta$, $\frac{d}{d\xi} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}$ ona se svodi na nešto jednostavniji oblik

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{dT}{d\xi}\right) + \left(a - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)T = 0. \tag{4.25}$$

Za $m = 0$ ovo je Legendre-ova jednačina

$$(\xi^2 - 1)T'' + 2\xi T' - aT = 0, \tag{4.26}$$

koja za $a = l(l+1)$ ima rešenja - Legendre-ove polinome $P_l(\xi)$:

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{d\xi^l}\left((\xi^2-1)^l\right). \tag{4.27}$$

$P_l(\xi)$ je, očigledno, parni ili neparni polinom stepena l:

$$P_l(-\xi) = (-1)^l P_l(\xi). \tag{4.28}$$

Legendre-ovi polinomi su ortonormirani

$$\int_{-1}^{1} P_l(\xi)P_k(\xi)d\xi = \frac{2}{2l+1}\delta_{lk}. \tag{4.29}$$

Ako je $m \neq 0$, rešenja jednačine (4.25) zovu se pridružene Legendre-ove funkcije

$$P_l^m(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}}P_l(\xi), \tag{4.30}$$

odnosno

$$P_l^m(\cos\theta) = (\sin\theta)^{|m|}\frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}P_l(\cos\theta). \tag{4.31}$$

Relacije ortonormiranosti za pridružene Legendre-ove funkcije glase

$$\int_0^\pi P_k^m(\cos\theta)P_l^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\delta_{kl}. \tag{4.32}$$

Ukupno, rešenja jednačina (4.16-4.17) su

$$f_{m,l} = T_{m,l}(\theta)F_m(\varphi) = Y_l^m(\theta,\varphi) = \langle\theta,\varphi|l,m\rangle, \tag{4.33}$$

i zovu se sferni harmonici. ona predstavljaju koordinatnu reprezentaciju (tj, njen ugaoni deo) svojstvenih vektora $|l,m\rangle$ ugaonog momenta za *celobrojne* vrednosti l i m:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}. \tag{4.34}$$

Sferni harmonici su ortonormirani:

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi} Y_l^{m*}(\theta,\varphi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{4.35}$$

Zadatak Dobiti eksplicitno funkciju Y_l^l iz uslova $L_+|l,l| =\rangle 0$, prikazujući L_+ u koordinatnoj reprezentaciji i uzimajući da je $Y_l^l = T(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{il\varphi}$.

Napisaćemo nekoliko prvih sfernih harmonika i, osim toga, na polarnom dijagramu nacrtati vrednosti $|Y_l^m|^2$. Ove vrednosti, očigledno, zavise samo od ugla θ, a na dijagramu rastojanje od koordinatnog početka daje veličinu $|Y_l^m|^2$, tako da dijagram daje oblik prostorne raspodele verovatnoće zadate sfernim harmonikom Y_l^m.

$$\begin{aligned}
l=0: &\qquad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
l=1: &\qquad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \\
&\qquad Y_1^{\pm1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi} \\
l=2: &\qquad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1) \\
&\qquad Y_2^{\pm1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi} \\
&\qquad Y_2^{\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}
\end{aligned} \tag{4.36}$$

4.2 Čestica u sferno-simetričnom potencijalu

Sad ćemo preći na rešavanje Schrödinger-ove jednačine, odnosno svojstvenog problema, za česticu u sferno-simetričnom potencijalu. Njen hamiltonijan je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r), \tag{4.37}$$

potencijalna energija V zavisi samo od radijalnog rastojanja $r = |\vec{r}|$. Pri ovom kretanju moment impulsa čestice, kao i u klasičnoj mehanici, se održava.

Zadatak Pokazati, u koordinatnoj reprezentaciji, da je $[H, L_i] = 0$: npr, $[H, L_x] = 0$.

Odatle sledi da se hamiltonijan može dijagonalizovati istovremeno sa L^2 i L_z. To se takodje vidi iz oblika laplasijana u sfernim koordinatama

$$\Delta\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}((r\psi) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\psi) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}, \tag{4.38}$$

tako da je operator kinetičke energije

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right). \tag{4.39}$$

Znači, Schrödinger-ova jednačina za kretanje čestice u sferno-simetričnom potencijalu glasi

$$\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{L^2}{2mr^2}\psi + V(r)\psi = E\psi. \tag{4.40}$$

Očigledno, u ovoj jednačini se promenljive mogu razdvojiti,

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)f(\theta,\varphi), \tag{4.41}$$

a ugaoni deo $f(\theta,\varphi)$ su sferni harmonici. dakle,

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{4.42}$$

Smenom ψ u (4.40) se dobija radijalna jednačina, odnosno jednačina za radijalni deo talasne funkcije $R(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V\right)R = ER \tag{4.43}$$

ili, ako umesto R uvedemo funkciju $u(r) = rR(r)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V\right)u = Eu. \tag{4.44}$$

Tako se rešavanje Schrödinger-ove jednačune u centralno-simetričnom potencijalu svodi na jednodimenzioni problem: jednačina (4.44) ima oblik Schrödinger-ove jednačine za česticu u 1d koja se kreće u efektivnom potencijalu

$$V_{ef} = V + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \tag{4.45}$$

Sličan rezultat imali smo i u klasičnoj mehanici. Drugi član u efektivnom potencijalu, "centrifugalna barijera", potiče od momenta impulsa. Normalizacija radijalne funkcije je

$$\int_0^\infty R^* R r^2 dr = \int_0^\infty u^* u dr = 1. \tag{4.46}$$

4.3 Atom vodonika

Atom vodonika sastoji se od elektrona i protona; njihova interakcija je opisana elektrostatičkim Coulomb-ovim potencijalom, tako da je hamiltonijan sistema dat sa

$$H = \frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_p^2}{2m_p} + \frac{q_e q_p}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|}. \tag{4.47}$$

Naelektrisanje protona je $q_p = -q_e = -e$, a elektrostatički potencijal napisan je u CGS-sistemu jedinica. Masa protona m_p mnogo je veća od mase elektrona $m_e = m$, $m_p \sim 2000m$, pa je njegova kinetička energija mnogo manja. Zato je fizički dobra aproksimacija da se pretpostavi da proton miruje a da se samo elektron kreće:

$$\vec{r}_p = 0, \quad \vec{r}_e - \vec{r}_p = \vec{r}, \quad T_p = 0. \tag{4.48}$$

Tako se naš zadatak odredjivanja vezanih stanja protona i elektrona i njihovih energija svodi na rešavanje Schrödinger-ove jednačine za elektron u statičkom Coulomb-ovom potencijalu

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}, \tag{4.49}$$

gde, umesto vodonika, rešavamo jednačinu za "vodoniku sličan atom" čiji je atomski broj Z odnosno naelektrisanje jezgra $-Ze$.

Pokazati da se hamiltonijan (4.47), kao i u klasičnoj mehanici, može svesti na zbir hamiltonijana dva neinteragujuća sistema: relativne čestice i centra mase:

$$\begin{aligned} \vec{r}_{rel} &= \vec{r}_e - \vec{r}_p, & m_{rel} &= \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \\ \vec{r}_{CM} &= \frac{m_e \vec{r}_e + m_p \vec{r}_p}{m_e + m_p}, & m_{CM} &= m_e + m_p \end{aligned} \tag{4.50}$$

$$H = \frac{\vec{p}^2_{CM}}{2m_{CM}} + \frac{\vec{p}^2_{rel}}{2m_{rel}} + \frac{q_e q_p}{r_{rel}}. \tag{4.51}$$

Da li su operatori $\vec{p}_{rel}$, $\vec{r}_{rel}$, $\vec{p}_{CM}$, $\vec{r}_{CM}$, dobro tj. jednoznačno definisani i posle kvantovanja? Odrediti komutatore $[x^i_{rel}, p_{rel\,j}]$, $[x^i_{rel}, p_{CM\,j}]$.

Radijalna jednačina (4.44) u slučaju Coulomb-ovog potencijala glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \left(-\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)u = Eu. \tag{4.52}$$

Prvo ćemo ispitati asimptotski oblikfunkcije u, tj. njeno ponašanje u obe granične tačke $r \to \infty$ i $r = 0$. U beskonačnosti oba člana sa potencijalnom energijom teže nuli pa je jednačina približno

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' = Eu. \tag{4.53}$$

U slučaju $E > 0$ rešenja su asimptotski ravni talasi, odnosno elektron je slobodan. Ova rešenja opisuju resejanje elektrona na protonu a ne vezano stanje elektrona i protona tj. atom vodonika. Nas interesuje slučaj $E < 0$: uzimamo rešenje koje u beskonačnosti opada

$$u(r) \sim e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\,r}. \tag{4.54}$$

Kad $r \to 0$, najveći član je centrifugalni, pa je jednačina približno

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}u = 0. \tag{4.55}$$

odnosno

$$r^2 u'' = l(l+1)u. \tag{4.56}$$

Za $r \to 0$ rešenje se ponaša kao r^{l+1}. Ovakvo ponašanje obezbedjuje da je gustina verovatnoće

$$|\psi|^2 = \frac{|u|^2}{r^2}|Y_l^m|^2 \tag{4.57}$$

regularna u koordinatnom početku i za $l = 0$. Dakle, pretpostavićemo da je rešenje oblika

$$u(r) = e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\,r}v(r) = e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\,r}\sum_{l+1}^{\infty} a_n r^n. \tag{4.58}$$

Iz (4.58) i (4.52) dobijamo jednačinu za v:

$$v'' - 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\,v' - \frac{l(l+1)}{r^2}v + \frac{2mZe^2}{\hbar^2}\frac{v}{r} = 0, \tag{4.59}$$

odnosno rekurentnu relaciju za koeficijente a_n:

$$(n(n+1)-l(l+1))\,a_{n+1}=\left(2n\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}-\frac{2mZe^2}{\hbar^2}\right)a_n. \tag{4.60}$$

Za $n\to\infty$ tj. $r\to\infty$, poslednja relacija se svodi približno na

$$a_{n+1}=\frac{1}{n+1}\,2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\,a_n \tag{4.61}$$

odnosno

$$a_{n+1}=\frac{1}{(n+1)!}\left(2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)^n a_0. \tag{4.62}$$

Ovakav razvoj u red ima funkcija

$$v(r)=e^{2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\,r}. \tag{4.63}$$

U tom slučaju $u(r)$ se ponaša kao $e^{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\,r}$: ukoliko su svi članovi reda prisutni, dobija se drugo, eksponencijalno rastuće rešenje jednačine (4.53). Prema tome, rešemje (4.58) je fizičko jedino ako se $\sum a_k r^k$ svodi na polinom, tj. ako se koeficijenti anuliraju počevši od nekog $n+1$:

$$a_{n+1}=0 \quad\Leftrightarrow\quad n\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}=\frac{mZe^2}{\hbar^2}, \tag{4.64}$$

odnosno za vrednosti energije

$$E_n=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}. \tag{4.65}$$

Znači, energija vezanih stanja je diskretna, kvantovana brojem $n\geq 1$; takodje, $n>l$. Iako u jednačini (4.60) odnosno (4.59) l figuriše eksplicitno, svojstvene energije ne zavise od ovog kvantnog broja. Ova degeneracija je "slučajna" i postoji samo ra potencijale $V(r)\sim\frac{1}{r}$ i $V(r)\sim r^2$. Svojstvene funkcije v_{nl}, naravno, zavise i od n i od l. One se mogu izraziti preko pridruženih Laguerre-ovih polinoma koji se definišu kao

$$\begin{aligned} L_n(\xi)&=e^{\xi}\frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi}\xi^n)\\ L_n^k(\xi)&=(-1)^k\frac{d^k}{d\xi^k}L_{n+k}(\xi). \end{aligned} \tag{4.66}$$

Ukupno, svojstvene funkcije elektrona u atomu vodonika su

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{4.67}$$

gde je
$$R_{nl}(r) = e^{-\frac{r}{na_0}}(\frac{2r}{na_0})^l L^{2l+1}_{n-l-1}(\frac{2r}{na_0}). \tag{4.68}$$

a_0 je Bohr-ov radijus, $a_0 = \frac{\hbar^2}{mZe^2} = 0.5 \cdot 10^{-10} m|_{Z=1}$ i daje red veličine dimenzije atoma. Energija osnovnog stanja je $-E_0 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6eV = .$ Vrednosti ove dve konstante odredjuju karakteristične skale dužine i energije u atomskoj fizici.

Napisaćemo svojstvene funkcije osnovnog i prvog pobudjenog stanja elektrona. Do na normiranje:

$$\begin{aligned}
&\psi_{100} \sim e^{-\frac{r}{a_0}} && 1s \text{ stanje} \\
&\psi_{200} \sim (1 - \frac{r}{2a_0})e^{-\frac{r}{2a_0}} && 2s \text{ stanje} \\
&\psi_{210} \sim re^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta && 2p \text{ stanje} \\
&\psi_{21\pm1} \sim re^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta e^{\pm i\varphi} && 2p \text{ stanje}
\end{aligned} \tag{4.69}$$

U spektroskopskim oznakama, s-stanja odgovaraju vrednosti $l = 0$ kvantnog broja ugaonog momenta, p-stanja imaju $l = 1$, d-stanja $l = 2$ itd.

Svojstvene funkcije elektrona u vodonikovom atomu imaju tri kvantna broja: kvantni broj energije $n = 1, 2, 3, \dots$; kvantni broj kvadrata momenta impulsa $l = 0, 1, \dots, n-1$ i kvantni broj z-projekcije momenta impulsa (magnetni kvantni broj) $m = -l, \dots, l$. Degeneracija n-tog energetskog nivoa je n^2:

$$\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l} 1 = \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 2 \cdot \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2. \tag{4.70}$$

4.4 Čestica u elektromagnetnom polju

U prethodnom poglavlju videli smo kako se rešava Schrödinger-ova jednačina u slučaju kretanja elektrona u elektrostatičkom potencijalu tačkastog naelektrisanja jezgra. Hamiltonijan čestice koja se kreće u proizvoljnom statičkom električnom polju dat je preko elektrostatičkog potencijala $\Phi(\vec{r})$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + e\Phi(\vec{r}) \tag{4.71}$$

gde je V potencijalna energija ostalih polja koja deluju na česticu. Naravno, električno polje $\vec{E} = -\operatorname{grad}\Phi$. U opštem slučaju promenljivog elektromagnetnog polja hamiltonijan čestice dobija se iz hamiltonijana

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \tag{4.72}$$

metodom "minimalne zamene":

$$H \to H - e\Phi, \qquad \vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}, \tag{4.73}$$

gde su $\Phi(t,\vec{r})$ i $\vec{A}(t,\vec{r})$ skalarni i vektorski potencijal elektromagnetnog polja. jačine polja date su sa

$$\vec{E} = -\mathrm{grad}\,\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A}. \tag{4.74}$$

Znači, hamiltonijan za česticu u elektromagnetnom polju je

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + V + e\Phi. \tag{4.75}$$

Pokazati da u klasičnoj mehanici gore navedeni hamiltonijan opisuje kretanje naelektrisane čestice u elektromagnetnom polju. Diskutovati problem uredjenja koordinate i impulsa u izrazu (4.75). Da li je hamiltonijan uvek jednoznačno definisan?

Očigledno je da elektromagnetni potencijali Φ i $\vec{A}$ nisu jednoznačno zadati električnbim i magnetnim poljem $\vec{E}$ i $\vec{B}$ u (4.74) jer su polja izvodi potencijala. Postoji dakle, nejednoznačnost ili sloboda u izboru potencijala Φ i $\vec{A}$: pri transformacijama

$$\Phi \to \Phi' = \Phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}, \qquad \vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} - c\mathrm{grad}\,\chi, \tag{4.76}$$

$\vec{E}$ i $\vec{B}$ se ne menjaju; $\chi(t,\vec{r})$ može biti proizvoljna funkcija. Ove transformacije zovu se gradijentne, ili gauge-transformacije. Klasične jednačine kretanja, kako za elektromagnetno polje tako i za naelektrisanu česticu, invarijantne su tj. ne menjaju se pri transformacijama (4.76). Zato ove transformacije predstavljaju simetriju klasične teorije, koja u ovom slučaju nije simetrija prostora nego tzv. unutrašnja simetrija.

Pokazati da, ako izaberemo vektorski potencijal tako da je $\mathrm{div}\,\vec{A} = 0$ (Coulomb-ov gauge), problem uredjenja operatora u (4.75) ne postoji.

Da li gauge-transformacije predstavljaju i simetriju Schrödinger-ove jednačine, tj. da li je, ako transformišemo $\Phi \to \Phi'$, $\vec{A} \to \vec{A}'$, definisano i preslikavanje $\psi \to \psi'$ tako da su Schrödinger-ove jednačine

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\vec{p}^2 - \frac{e}{c}\vec{A})^2\psi + e\Phi\psi \tag{4.77}$$

i

$$i\hbar\frac{\partial \psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\vec{p}^2 - \frac{e}{c}\vec{A}')^2\psi' + e\Phi'\psi' \tag{4.78}$$

ekvivalentne? Odgovor na ovo pitanje je potvrdan: malo dužim ali pravolinijskim računom može se pokazati da, ako je ψ rešenje jednačine (4.77), onda je ψ' dato sa

$$\psi' = e^{-i\frac{e}{\hbar}\chi}\psi \tag{4.79}$$

rešenje jednačine (4.78). Zato se gauge-transformacije primenjene na talasnu funkciju zovu fazne transformacije.

Proveriti poslednje tvrdjenje.

Sad ćemo pokazati kako izgleda hamiltonijan naelektrisane čestice u nekoliko jednostavnih slučajeva.

1) *Statičko, homogeno električno polje,* $\vec{E} = const.$ Lako se vidi da se ovo polje može opisati potencijalom

$$\Phi = -\vec{E} \cdot \vec{r}, \qquad \vec{A} = 0. \tag{4.80}$$

Prema tome, hamiltonijan je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - e\vec{E} \cdot \vec{r} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{d} \cdot \vec{E}, \tag{4.81}$$

u drugom članu prepoznajemo potencijalnu unergijuelektričnog dipola dipolnog momenta $\vec{d} = e\vec{r}$.

2) *Ravan elektromagnetni talas.* Električno i magnetno polje ravnog elektromagnetnog talasa smo pisali u uvodnom poglavlju:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}, \qquad \vec{B} = \vec{k} \times \frac{c\vec{E}_0}{\omega} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}. \tag{4.82}$$

Ova polja opisuje vektorski potencijal

$$\vec{A} = -i\frac{c}{\omega}\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}, \qquad \Phi = 0. \tag{4.83}$$

U ovom slučaju hamiltonijan čestice dat je sa

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 \tag{4.84}$$

i zavisi eksplicitno od vremena. Sa ovim hamiltonijanom ćemo se sresti kad budemo opisivali emisiju i apsorpciju elektromagnetnih talasa u atomu tj. atomske spektre.

3) *Statičko homogeno magnetno polje,* $\vec{B}$ =*const.* Lako se vidi da je jedan izbor vektorskog potencijala

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}, \qquad \Phi = 0. \tag{4.85}$$

Odredićemo dominantni član koji opisuje interakciju sa magnetnim poljem, pretpostavljajući da je ono malo. Zanemarujući kvadratni član imamo

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}(\vec{p} + \frac{e}{2c}\vec{r} \times \vec{B})^2 \\ &= \frac{1}{2m}(p_i + \frac{e}{2c}\epsilon_{ijk}r_jB_k)^2 = \frac{1}{2m}(p_ip_i + \frac{e}{c}\epsilon_{ijk}p_ir_jB_k) \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\vec{L} \times \vec{B} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}, \end{aligned} \tag{4.86}$$

gde je $\vec{\mu} = \frac{e}{2mc}\vec{L} = -\mu_B\vec{L}$ – magnetni dipolni moment elektrona koji potiče od njegovog orbitnog ugaonog momenta. Koeficijent proporcionalnosti $\mu_B = \frac{|e|}{2mc}$ zove se Bohr-ov magneton.

Kretanje elektrona u konstantnom magnetnom polju jedan je od problema koji se mogu rešiti egzaktno. Ako z-osu usmerimo duž magnetnog polja, $\vec{B} = B\vec{e}_z$, a gauge fiksiramo malo drugačije nego malopre: $\vec{A} = xB\vec{e}_y$, hamiltonijan je

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}(p_y - \frac{eB}{c}x)^2 + \frac{p_z^2}{2m}, \tag{4.87}$$

a Schrödinger-ova jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + i\frac{\hbar eB}{mc}x\frac{\partial\psi}{\partial y} + \frac{e^2B^2}{2mc^2}x^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = E\psi. \tag{4.88}$$

Jednačina se može rešiti razdvajanjem promenljivih. Ako pretpostavimo da je

$$\psi(x,y,z) = F(x,y)Z(z), \tag{4.89}$$

razdvajanjem promenljivih dobijamo jednačine

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z}{dz^2} = E_z Z, \\ &-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + i\frac{\hbar eB}{mc}x\frac{\partial F}{\partial y} + \frac{e^2B^2}{2mc^2}x^2F = (E - E_z)F. \end{aligned} \tag{4.90}$$

Rešenje za Z je $Z(z) = e^{ik_z z}$, za $k_z^2 = \frac{2mE_z}{\hbar^2}$. Partikularno rešenje druge jednačine je oblika $F(x,y) = e^{ik_y y}f(x)$, pa se ona svodi na

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2f}{dx^2} + \frac{1}{2m}(\hbar k_y - \frac{eB}{c}x)^2 f = (E - E_z)f, \tag{4.91}$$

odnosno, posle smene $\xi = x - \frac{c\hbar k_y}{eB}$, $\omega_L = \frac{eB}{mc}$ na jednačinu za harmonijski oscilator

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2f}{d\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega_L^2\xi^2 f = (E - E_z)f. \tag{4.92}$$

ω_L je Larmor-ova frekvenca. Prema tome, rešenja za f su svojstvene funkcije harmonijskog oscilatota a ukupna energija čestice E

$$E = \frac{\hbar^2k_z^2}{2m} + \hbar\omega_L(n + \frac{1}{2}). \tag{4.93}$$

Energija kretanja u xy-ravni, normalnoj na magnetno polje, je kvantovana.

Pokazati da se očekivane vrednosti koordinata x i y menjaju sa vremenom kao u klasičnoj mehanici, harmonijski: $x = a\cos\omega_L t$, $y = a\sin\omega_L t$.

Glava 5

Simetrije

5.1 Zakoni održanja i simetrije sistema

Integrali odnosno konstante kretanja (u klasičnoj fizici) su one fizičke veličine koje se ne menjaju sa vremenom. Uslov da neka fizička veličina ne zavisi od vremena može se formulisati u Lagrange-ovom i u Hamilton-ovom formalizmu. Ako opservabla A ne zavisi eksplicitno od vremena, onda uslov $\frac{dA}{dt} = 0$ znači da je njena Poisson-ova zagrada sa hamiltonijanom jednaka nuli:

$$\frac{dA}{dt} = 0 = \{A, H\}_{PZ}. \tag{5.1}$$

U Lagrange-evom formalizmu konstante kretanja postoje kad imamo tzv. "ciklične koordinate" – one od kojih lagranžijan ne zavisi eksplicitno. Zaista, ako je x ciklična koordinata, onda

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \tag{5.2}$$

tj. odgovarajući generalisani impuls $p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ se održava u vremenu. Noetherina teorema daje vezu izmedju održanih impulsa i simetrije koje odgovarajući sistem poseduje.

I u kvantnoj mehanici integrali kretanja se definišu na sličan način: to su one opservable čije se očekivane vrednosti ne mrnjaju u toku vremena. Iz Ehrenfest-ove teoreme (3.166) lako zaključujemo da ovakve opservable moraju da komutiraju sa hamiltonijanom. Dakle, jednakost

$$[A, H] = 0 \tag{5.3}$$

je definicija integrala kretanja.

U klasičnoj mehanici i teoriji polja integrali kretanja najčešće su u vezi sa simetrijama fizičkog sistema. Neka je, kao u našem prethodnom primeru, ciklična koordinata x. Tada uslov da lagranžijan ne zavisi od x, $\frac{\partial L}{\partial x} = 0$, znači u stvari da je sistem invarijantan na translacije duž x-ose $x \to x + a$,

$y \to y$, $z \to z$, $t \to t$: invarijantnost na translacije po x povlači održanje x-komponente impulsa, p_x. I u kvantnoj mehanici slična veza postoji, jedino što tarnsformacuje simetrije nisu date direktno, svojom definicijom u prostoru i vremenu, nego u reprezentaciji: treba da se definiše kako one deluju na talasnu funkciju.

Koncept simetrije je veoma važan i poznavanje simetrija sistema uvek pojednostavljuje rešavanje fizičkog problema. U nekim oblastima fizike napr. u teoriji elementarnih čestica simetrija ima ključnu ulogu i omogućila kje da se napravi klasifikacija čestica i odredi njihova struktura i bez poznavanja detalja dinamike. U kvantnoj mehanici su reprezentacije simetrije različite od klasičnih; sem toga, pored simetrija prostor-vremena prirodno se pojavljuju i unutrašnje simetrije. Zato ćemo se mi na ovim pojmovima, makar i neprecizno, malo zadržati. Počećemo definicijom transformacija prostora.

Prostorno-vremenske transformacije su preslikavanja

$$\vec{r} \to \vec{r}'(\vec{r}, t; a_i), \quad t \to t'(\vec{r}, t; a_i) \tag{5.4}$$

prostornih i vremenske koordinate, npr. materijalne tačke. Ova preslikavanja u principu mogu da zavise od (realnih) parametara a_i što i je naznačeno u jednačini (5.4). U fizici nas zanimaju skup transformacija u odnosu na koje je fizički sistem (dat na primer svojim jednačinama kretanja) invarijantan. Možda još česće, kada u fizici govorimo o transformacijama prostora, zamišljamo da ne transformišemo fizički objekt nego zapravo koordinatne sisteme u kojima taj ojbekt opisujemo.

Transformacije koordinatnih sistema imaju matematičku strukturu grupe: grupu ćemo označavati sa G, njene elemente sa g_i ili g_a. Grupe baš imaju one osobine koje, intuitivno, očekujemo od "prelaza" iz jednog i drugi koordinatni ili inercijalni sistem, naime:

i) Primena dve uzastopne transformacije može se prikazati kao treca, ekvivalentna transformacija (ili, zatvorenost grupnog množenja: ako su g_1, $g_2 \in G$, onda je i $g_1 g_2 = g \in G$). Uzastopnu primenu transformacija g_1 i g_2 pišemo kao njihovo množenje, $g_1 g_2$.

ii) Postoji identična transformacija, takva koja ne menja koordinatni sistem (tzv. jedinični element, $1 \in G$),

iii) Svaka transformacija ima inverznu, kojom se možemo vratiti u početni koordinatni sistem ($g^{-1} \in G$, $gg^{-1} = g^{-1}g = 1$), i

iv) Asocijativnost: pri množenju transformacije se mogu proizvoljno grupisati po dve tj. $g_1(g_2 g_3) = (g_1 g_2) g_3$.

Redosled vršenja transformacija je u principu bitan, tj. množenje ne mora da bude komutativno, $g_1 g_2 \neq g_2 g_1$.

Broj elemenata grupe može biti konačan ali i beskonačan. U fizici je najăzniji slučaj kada elementi grupe pripadaju nekoj mnogostrukosti, tj. mogi se parametrizovati realnim brojevima a_i, $i = 1, 2, \ldots, n$ koji uzimaju vrednosti u nekom delu prostora $\mathbf{R}^n$. Preciznije, za grupu se kaže da je Lie-jeva ako je oblast promene parametara analitička mnogostrukost, a preslikavanja $g_1g_2 \to g$ i $g \to g^{-1}$ analitička preslikavanja. Za Lie-jeve grupe važi da se svi elementi mogu prikazati u eksponencijalnom obliku

$$g_a = e^{-i\sum a_i T_i}. \tag{5.5}$$

a_i su (realni) parametri, a T_i se zovu generatori grupe. Generatori opisuju dejstvo transformacija bliskih identicnoj (ili, elemente grupe u okolini jedinice), jer za infinitezimalne vrednosti parametara možemo pisati

$$g_a = 1 - \sum a_i T_i, \tag{5.6}$$

zadržavajući se na prva dva člana u razvoju eksponenta u Taylor-ov red, odnosno

$$T_i = i\frac{\partial g_a}{\partial a_i}|_{a_i=0}. \tag{5.7}$$

Generatori grupe čine Lie-jevu algebru. Osnovna relacija u algebri

$$[T_i, T_j] = \sum_k i f^k{}_{ij} T_k, \tag{5.8}$$

odnosno vrednosti strukturnih konstanti $f^k{}_{ij}$, mogu se izvesti iz zakona množenja u grupi.

Navešćemo nekoliko primera transformacija prostornih koordinata. Odmah je jasno da u klasičnoj mehanici kad zadamo transformaciju vektora položaja čestice $\vec{r}$ i vremena t, znamo kako se transformiše i brzina odnosno impuls čestice, a samim tim i sve ostale opservable. Ovo, naravno ne važi za fizička polja.

1) Jednostavan primer je prostorna inverzija odnosno refleksija sve tri ose, P. Transformacija je data sa

$$\vec{r} \to \vec{r}' = -\vec{r}, \qquad t \to t' = t. \tag{5.9}$$

Očigledno, kad dva puta primenimo inverziju prostora, dobijemo identično preslikavanje: $P^2 = 1$, odnosno $P^{-1} = P$. Kao grupa tarnsformacija može se posmatrati dvočlana grupa $\{1, P\}$.

Zadatak Odrediti kako se pri inverziji prostora transformišu impuls $\vec{p}$ i moment impulsa $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

2) Prostorne translacije su definisane vektorom translacije $\vec{a}$:

$$\vec{r} \to \vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}, \qquad t \to t' = t. \tag{5.10}$$

Očigledno, $\vec{p} \to \vec{p}' = \vec{p}$. Ova grupa je Lie-jeva tj. ima beskonačno, kontinualno mnogo elemenata koji su parametrizovani pomoću tri nezavisna parametra, komponenti vektora translacije $\vec{a}$.

Zadatak Kojoj transformaciji odgovara "proizvod" translacija $g_{\vec{a}}g_{\vec{b}}$? Šta je $g_{\vec{a}}{}^{-1}$? Pokazati da je grupa translacija komutativna.

3) Rotacije
Da bismo videli kako se vektor položaja transformiše pri rotacijama, pretpostavimo da se rotacija vektora $\vec{r}$ vrši oko x-ose za ugao α, pri čemu $\vec{r}$ prelazi u $\vec{r}'$. Tome odgovara slika:

Sa slike se vidi da su komponente vektora $\vec{r}$:

$$\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z = x\vec{e}_x + \rho\cos\varphi\vec{e}_y + \rho\sin\varphi\vec{e}_z, \tag{5.11}$$

dok za komponente zarotiranog vektora $\vec{r}'$ imamo

$$\vec{r}' = x'\vec{e}_x + y'\vec{e}_y + z'\vec{e}_z = x\vec{e}_x + \rho\cos(\varphi+\alpha)\vec{e}_y + \rho\sin(\varphi+\alpha)\vec{e}_z. \tag{5.12}$$

Iz ovih jednačina može se dobiti zakon transformacije

$$\begin{aligned} x' &= x \\ y' &= \cos\alpha\, y - \sin\alpha\, z \\ z' &= \sin\alpha\, y + \cos\alpha\, z. \end{aligned} \tag{5.13}$$

Ovaj zakon često se piše u obliku

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = R(\alpha, \vec{e}_x) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \tag{5.14}$$

gde je $R(\alpha, \vec{e}_x)$ matrica rotacije za ugao α oko x-ose. Može se pokazati da svaka rotacija može da se zapiše preko realne 3×3 R kod koje je $\det R = 1$, $R^T R = I$. Poslednji uslov sledi iz činjenice da rotacije ne menjaju dužinu vektora. Pokazuje se, takodje, da je grupa rotacija troparametarska.

Kao što smo već rekli, u klasičnoj mehanici sve opservable su funkcije $\vec{r}$ i $\vec{p}$ tako da zadavanje transformacije $\vec{r}$ i t indukuje zakon promene svih ostalih fizičkih veličina. U kvanoj mehanici, stanja fizičkog sistema $|\psi\rangle$ su vektori, ali naravno ne u trodimenzionalnom realnom prostoru nego u prostoru stanja. Pri transformaciji koordinata g, npr. pri prelazu iz opisa u jednom koordinatnom sistemu na opis u drugom, stanje se menja odnosno prelazi u neko drugo:

$$|\psi'\rangle = U(g)|\psi\rangle. \tag{5.15}$$

Pošto je i $|\psi'\rangle$ stanje tj. vektor dužine 1, $U(g)$ je unitarni operator. dalje, ako izvršimo dve uzastopne transformacije koordinata, prvo g_1 a onda g_2, stanje terba da se promeni kao da smo izvršili ukupnu transformaciju, $g = g_2 g_1$:

$$|\psi''\rangle = U(g_2)|\psi'\rangle = U(g_2)U(g_1)|\psi\rangle = U(g_2 g_1)|\psi\rangle. \tag{5.16}$$

Relacija $U(g_2)U(g_1) = U(g_2 g_1)$ znači da je $U(g)$ reprezentacija grupe transformacija, jer reprezentuje zakon množenja u grupi.

Znači, zaključak je da se transformacije koordinata reprezentuju unitarnim operatorima u prostoru stanja. da je ova reprezentacija u stvari fiksirana, vidimo u koordinatnoj reprezentaciji: prirodno je zahtevati da se pri translacijama i rotacijama talasna funkcija $\psi(\vec{r},t)$ transformiše kao skalarno polje[1]. Neka je zadata opšta transformacija koordinata $t'=t$, $\vec{r}'=R\vec{r}+\vec{a}$ ili u komponentama $x'^i=R^i{}_jx^j+a^i$, koja se sastoji od rotacije R i translacije $\vec{a}$. Klasično polje $F(\vec{r},t)$ se tada transformiše kao

$$F'(\vec{r}',t')=S(R)F(\vec{r},t), \tag{5.17}$$

gde je $S(R)$ – odgovarajuća reprezentacija grupe rotacija. Ako je polje skalar, npr. temperatura, $T(\vec{r},t)$, ono ima samo jednu komponentu koja se pri rotacijama, očigledno, ne menja, $S(R)=1$. Formula (5.17) tada glasi

$$T'(\vec{r}',t')=T(\vec{r},t). \tag{5.18}$$

Ova formula se može shvatiti na sledeći način: $\vec{r}$ i $\vec{r}'$ su koordinate iste tačke u netransformisanom ("starom") i transformisanom ("novom") koordinatnom sistemu, a T i $'$ funkcije koje vrednostima koordinata pripisuju odredjenu vrednost temperature. Tada formula (5.18) kaze da temperatura u odredjenoj tački ima istu vrednost bilo da je izražavamo pomoću stare funkcije u starom koordinatnom sistemu ili pomoću nove funkcije u novom koordinatnom sistemu. Ako polje ima više komponenti, npr. predstavlja, kao električno polje $\vec{E}(\vec{r},t)$ vektor, onda će se pri rotaciji koordinatnog sistema i njegove komponente na odgovarajući način promeniti. Zakon transformacije u tom slučaju glasi

$$E'^i(\vec{r}',t')=R^i{}_jE^j(\vec{r},t), \tag{5.19}$$

jer je za vektore $S(R)=R$.

Ako uzmemo da se talasna funkcija ponaša kao skalarno polje pri transformacijama koordinata, znači da smo potpuno fiksirali način kako se te transformacije prikazuju u kvantnoj mehanici odnosno reprezentaciju. jer, s jedne strane iz

$$\psi'(x')=\psi(x) \tag{5.20}$$

za $x'=Rx+a$ sledi

$$\psi'(x')=\psi(R^{-1}(x'-a)), \tag{5.21}$$

ili ako umesto x' koristimo nezavisno promenljivu x,

$$\psi'(x)=\psi(R^{-1}(x-a)). \tag{5.22}$$

S druge strane, množeći

$$|\psi'\rangle=U(R,a)|\psi\rangle \tag{5.23}$$

[1]U stvari strogo posmatrano, ovo ne samo što nije prirodno nego nije ni tačno, ukoliko čestica ima nenulti spin; ali o tome ćemo govoriti kasnije.

bra-om $\langle x|$, dobijamo

$$\langle x|\psi'\rangle = \langle x|U(R,a)|\psi\rangle. \tag{5.24}$$

Rezultujuća jednačina

$$\langle x|U(R,a)|\psi\rangle = \psi(R^{-1}(x-a)) \tag{5.25}$$

zadaje reprezentaciju $U(R,a)$. Ovo se možda lakše vidi na primerima, pa njih prelazimo.

1) Inverzija prostora

Pri delovanju na trovektore ovu transformaciju smo označili sa P: $P\vec{r} = -\vec{r}$. Označimo operator koji je reprezentije u prostoru talasnih funkcije sa Π:

$$\Pi\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\Pi|\psi\rangle = \psi(P^{-1}\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \tag{5.26}$$

jer za inverziju prostora važi $P^2 = 1$, odnosno $P^{-1} = P$. Jednačina (5.26) daje kako se talasne funkcije menjaju pri ovoj transformaciji prostora. Jasno, i za Π važi

$$\Pi^2\psi(\vec{r}) = \Pi\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \tag{5.27}$$

tj. $\Pi^2 = 1$; svojstvene vrednosti ovog operatora su ± 1. Svojstvene funkcije

$$\Pi\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) = \pm\psi(\vec{r}) \tag{5.28}$$

su parne ili neparne funkcije, i zato se inverzija prostora zove još i parnost.

Kao što smo rekli, možemo da uzmemo da operatori transformacije koordinata, umesto na talasne funkcije, deluju na fizičke opservable po zakonu $M' = U^{-1}MU$. Za parnost, $\hat{\vec{r}}' = \hat{\Pi}\hat{\vec{r}}\hat{\Pi}$, $\hat{\vec{p}}' = \hat{\Pi}\hat{\vec{p}}\hat{\Pi}$. Da bismo utvrdili vrednost transformisanih operatora, pogledajmo kako deluju na proizvoljnu talasnu funkciju $\psi(\vec{r})$:

$$\hat{\vec{r}}'\psi(\vec{r}) = \hat{\Pi}\hat{\vec{r}}\hat{\Pi}\psi(\vec{r}) = \hat{\Pi}\hat{\vec{r}}\hat{\psi}(-\vec{r}) = \hat{\Pi}-\vec{r}\psi(-\vec{r}) = -\vec{r}\psi(\vec{r}) \tag{5.29}$$

tj. $\hat{\vec{r}}' = \hat{\Pi}\hat{\vec{r}}\hat{\Pi} = \hat{\vec{r}}$ kao što i očekujemo. Slično, $\hat{\vec{p}}' = -\hat{\vec{p}}$.

Ubaciti, eventualno, za operator parnosti: $U \sim \exp i\alpha(x^2 + p^2)$??

Zadatak Odrediti parnost sfernog harmonika Y_l^m. Prethodno, odrediti kako se pri operaciji inverzije prostora $\vec{r} \to -\vec{r}$ transformišu sferne koordinate r, θ, φ.

To je ovako: $r \to r$, $\theta \to \pi - \theta$, $\varphi \to \pi + \varphi$ tako da

$$\psi(r,\theta,\varphi) \to \psi(r,\pi-\theta,\pi+\varphi), \tag{5.30}$$

$$e^{im\varphi} \to (-1)^m e^{im\varphi}, \qquad P_l^m(\cos\theta) \to P_l^m(-\cos\theta) = (-1)^{(l+|m|)} P_l^m(\cos\theta) \tag{5.31}$$

$$Y_l^m(\theta,\varphi) \to Y_l^m(\pi-\theta,\pi+\varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{5.32}$$

2) Translacije

Kao što smo videli, translacije čine Lie-jevu grupu čija su tri parametra – komponente vektora za koji je koordinatni sistem transliran. Prema (5.5), opšta translacija se piše kao

$$U(\vec{a}) = e^{-ia_i T_i}, \tag{5.33}$$

gde su T_i generatori translacije. Naravno, $U(-\vec{a}) = U^{-1}(\vec{a}) = e^{ia_i T_i}$. Mi ćemo odrediti ove generatore u reprezentaciji na prostoru talasnih funkcija. Na osnovu (5.17) imamo

$$U(\vec{a})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a}). \tag{5.34}$$

da bismo odredili generatore, uzećemo infinitezimalno malu translaciju i obe strane poslednje jednačine razviti u red. Zadržaćemo se na linearnom članu:

$$\begin{aligned} U(\vec{\epsilon})\psi(\vec{r}) &= e^{-i\epsilon_i T_i}\psi(\vec{r}) = (1 - \epsilon_i T_i)\psi(\vec{r}) + \dots \\ \psi(\vec{r} - \vec{\epsilon}) &= \psi(\vec{r}) + \tfrac{\partial\psi}{\partial x^i}(-\epsilon_i) + \dots . \end{aligned} \tag{5.35}$$

Izjednačavanjem ovih izraza vidimo da je

$$-i\epsilon_i T_i \psi = -\epsilon^i \frac{\partial\psi}{\partial x^i}, \tag{5.36}$$

pa pošto su parametri ϵ_i nezavisni, sledi da je dejstvo generatora translacije dato sa

$$T_i = -i\frac{\partial}{\partial x^i} = \frac{1}{\hbar}\hat{p}_i. \tag{5.37}$$

Translacije generiše operator impulsa.

Zadatak Pokazati da je $\hat{U}^{-1}(\vec{a})\hat{\vec{r}}\hat{U}(\vec{a}) = \hat{\vec{r}} + \vec{a}$ korišćenjem Baker-Campbell-Hausdorff-ove formule

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \dots . \tag{5.38}$$

Zadatak Sistem od n čestica, kao što ćemo videti, opisuje se talasnom funkcijom koja zavisi od $3n$ prostornih promenljivih (i vremena), $\psi = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$. Pri tarnslaciji za vektor $\vec{a}$ ova talasna funkcija menja se u skladu sa definicijom (5.17):

$$U(\vec{a})\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \psi(\vec{r}_1 - \vec{a}, \dots, \vec{r}_n - \vec{a}). \tag{5.39}$$

Pokazati da je generator translacije operator ukupnog impulsa, $\hat{\vec{P}} = \sum \hat{\vec{p}}_i$.

3) Konačno, da vidimo kako se u kvantnoj mehanici reprezentuju rotacije. U slučaju rotacije oko x-ose za ugao α koju smo ranije izveli imaćemo

$$U(R(\alpha, \vec{e}_x))\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}(\alpha, \vec{e}_x)\vec{r}), \tag{5.40}$$

gde je

$$R(\alpha, \vec{e}_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}. \tag{5.41}$$

Kao i ranije, opšta rotacija ima oblik $e^{-i\alpha_i\tau_i}$ gde su τ_i generatori rotacije duž i-te ose, i ako odredimo τ_i našli smo i proizvoljnu transformaciju $U(R(\alpha_i, vece_i))$. τ_i ćemo naći iz infinitezimalne rotacije: u našem slučaju, rotacije za ϵ oko x-ose. Imamo

$$R(\epsilon, \vec{e}_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 \end{pmatrix} \tag{5.42}$$

ako razvijemo $\cos\epsilon$ i $\sin\epsilon$ do članova linearnih po malom parametru ϵ, tako da je

$$R^{-1}(\epsilon, \vec{e}_x) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y+\epsilon z \\ z-\epsilon y \end{pmatrix}. \tag{5.43}$$

Prema tome

$$\psi(R^{-1}(\epsilon, \vec{e}_x)\vec{r}) = \psi(x, y+\epsilon z, z-\epsilon y) = \psi(x,y,z) + \epsilon(z\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial z}). \tag{5.44}$$

Sa druge strane, iz definicije generatora

$$U(R(\epsilon, \vec{e}_x))\psi(x,y,z) = (1 - i\epsilon\tau_x)\psi(x,y,z), \tag{5.45}$$

tako da je generator rotacije oko x-ose

$$\tau_x\psi = iz\frac{\partial\psi}{\partial y} - iy\frac{\partial\psi}{\partial z} = \frac{L_x}{\hbar}\psi, \tag{5.46}$$

gde je L_x x-projekcija operatora momenta impulsa, $L_x = yp_z - zp_y$. I za druge pravce će rezultat biti analogan:generator rotacije je vektor momenta impulsa, $\frac{\vec{L}}{\hbar}$.

Sada možemo da se vratimo na pitanje šta su to simetrije fizičkog sistema. Simetrije su one transformacije (u slučaju prostornih simetrija, transformacije koordinata ili koordinatnog/inercijalnog sistema) pri kojima jednačine kretanja ne menjaju oblik. Odnosno, ako znamo rešenja jednačina kretanja u jednom koordinatnom sistemu, znamo ih i u svakom drugom. Pretpostavimo da razmatramo sliku u kojoj se transformišu vektori stanja $|\psi\rangle$ a ne operatori. U početnom koordinatnom sistemu Schrödinger-ova jednačina glasi

$$i\hbar\frac{d\langle\psi|}{dt} = H\langle\psi|. \tag{5.47}$$

a u transformisanom,[2]

$$i\hbar\frac{d\langle\psi'|}{dt} = H\langle\psi'|, \tag{5.48}$$

[2] U primerima simetrije koje mi razmatramo uvek je $t' = t$, inače zapravo u jednačini (5.48) izvod treba da bude po t'.

pri čemu je $\langle\psi'| = U\langle\psi|$. Prema tome, druga jednačina je u stvari

$$i\hbar U\frac{d\langle\psi|}{dt} = HU\langle\psi|. \tag{5.49}$$

i svodi se na prvu, (5.47), ukoliko je $U^{-1}HU = H$, odnosno $HU = UH$: transformacije simetrije komutiraju sa hamiltonijanom,

$$[H, U] = 0. \tag{5.50}$$

Ako je U generisano generatorima T_i, $U = e^{-ia_iT_i}$, poslednji uslov je ekvivalentan sa

$$[H, T_i] = 0. \tag{5.51}$$

Znači: grupa transformacija predstavlja simetriju sistema ukoliko svi njeni generatori komutiraju sa hamiltonijanom. generatori simetrije su tada konstante kretanja.

Zadatak Pokazati da je hamiltonijan izolovanog sistema n interagujućih čestica

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum +i \neq kV_{ik}(\vec{r}_i - \vec{r}_k) \tag{5.52}$$

invarijantan na translacije, tj. pokazati da se ukupni impuls ovog sistema održava.

To što generatori simetrije komutiraju sa hamiltonijanom znači da se mogu istovremeno dijagonalizovati – odnodsno, hamiltonijan i podskup generatora koji medjusobno komutiraju. Tada nam svojstvena stanja generatora simetrije daju dodatne kvantne brojeve, koji razlikuju stanja iste energije (uklanjaju degeneraciju), a održavaju se u toku vremena. Tipičan primer je kretanje čestice u centralno-simetričnom potencijalu. Klasično a videćemo i kvantno ovaj sistem je invarijantan na rotacije, odnosno njegov moment impulsa se održava. Zato se pri rešavanju Schrödinger-ove jednačine za vodonikov atom prvo (to jest, istovremeno) rešava svojstveni problem operatora momenta impulsa: to je naša sledeća tema.

5.2 Operator momenta impulsa

Treba uočiti da se iz jednačine (4.5) mogu odrediti strukturne konstante rotacione grupe: pošto su generatori $\frac{L_i}{\hbar}$, strukturne konstante su $f^i{}_{jk} = \epsilon_{ijk}$.

Kakve veze imaju ovi komutatori sa činjenicom da se $\vec{r}$ - $\vec{P}$ vektori, a $\vec{r}^2$ i $\vec{p}^2$ skalari?

Ako je $\vec{\varphi}$ infinitezimalna rotacija oko ose $\vec{n}$, $\vec{\varphi} = \varphi\vec{n}$, pokazati da se vektor $\vec{A}$ u trodimnzionom prostoru pri ovoj rotaciji transformiše na sledeći način:

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\varphi} \times \vec{A}. \tag{5.53}$$

Iz pretpostavke da se, posle kvantovanja, pri rotaciji $\vec{\varphi}$ vektorski operator $\hat{\vec{A}}$ transformiše kao

$$\hat{\vec{A}} \to \hat{\vec{A}}' = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{L}}}\,\hat{\vec{A}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{L}}}, \tag{5.54}$$

dobiti komutacione relacije analogne sa (4.7).

Sad ćemo preći na problem odredjivanja svojstvenih vrednosti momenta impulsa:kao što smo rekli, rešavaćemo zajednički svojstveni problem operatora L^2 i L_z. Ovo ćemo prvo rešiti kao kod harmonijskog oscilatora, ispitujući odnose u algebri. Definišimo operatore

$$L_\pm = L_x \pm iL_y; \qquad L_- = (L_+)^\dagger. \tag{5.55}$$

Lako se može proveriti da važi

$$\begin{aligned} [L^2, L_\pm] &= 0, \\ [L_z, L_\pm] &= \pm\hbar L_\pm, \\ [L_+, L_-] &= 2\hbar L_z. \end{aligned} \tag{5.56}$$

Izražen preko $L_\pm$ i L_z, kvadrat momenta impulsa je

$$\vec{L}^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z. \tag{5.57}$$

Pošto je dimenzija momenta impulsa $[L_z] = [\hbar]$, a dimenzija kvadrata, $[L^2[= [\hbar^2]$, označimo svojstvene vrednosti ovih operatora sa $b\hbar$ i $a\hbar^2$. Pretpostavićemo da postoji (bar jedan) zajednički svojstveni vektor koji odgovara ovim svojstvenim vrednostima i označićemo ga sa $|a, b\rangle$:

$$L^2|a, b\rangle = a\hbar^2|a, b\rangle, \qquad L_z|a, b\rangle = b\hbar|a, b\rangle. \tag{5.58}$$

Naravno, L^2 je pozitivan operator pa je $a \geq 0$. Operator 'podizanja' L_+ povećava vrednost b za 1: ako označimo $|\chi\rangle = L_+|a, b\rangle$, imamo

$$\begin{aligned} L^2|\chi\rangle &= L^2L_+|a, b\rangle = L_+L^2|a, b\rangle = a\hbar^2|\chi\rangle, \\ L_z|\chi\rangle &= L_zL_+|a, b\rangle = (L_+L_z + \hbar L_z)|a, b\rangle = (b + 1)\hbar|\chi\rangle. \end{aligned} \tag{5.59}$$

To znači da je i vektor $|\chi\rangle$ zajednički svojstveni za L^2 i L_z:

$$|\chi\rangle \sim |a, b + 1\rangle. \tag{5.60}$$

Izračunajmo njegovu normu, pretpostavljajući da je $|a, b\rangle$ normiran:

$$\langle\chi|\chi\rangle = \langle a, b|L_-L_+|a, b\rangle = \langle a, b|L^2 - L_z^2 - \hbar L_z|a, b\rangle = (a^2 - b^2 - b)\hbar^2. \tag{5.61}$$

Dakle, možemo da zaključimo

$$L_+|a, b\rangle = \sqrt{a^2 - b^2 - b}\,\hbar\,|a, b + 1\rangle. \tag{5.62}$$

pri čemu smo fiksirali i fazni faktor. Primetimo, da bi kvadrat norme bio pozitivan mora da važi

$$a^2 \geq b(b+1). \tag{5.63}$$

Slično, za $|\chi\rangle = L_-|a,b\rangle$ dobija se

$$L_-|a,b\rangle = \sqrt{a^2 - b^2 + b}\,\hbar\,|a,b-1\rangle \tag{5.64}$$

i

$$a^2 \geq b(b-1). \tag{5.65}$$

Znači, $b^2 \leq a^2$ odnosno apsolutna vrednost od b je ograničena odozgo, za fiksirano a. Medjutim s druge strane, pri svakom delovanju L_+ na svojstveni vektore vrednost b-a se poveća za 1, tako da se uzastopnim delovanjem L_+-a b može proizvoljno povećati, što je kontradikcija.Odnosno, uvek je kontradikcija sem kad postoji neka maksimalna vrednost b_{max} za koju je

$$L_+|a,b_{max}\rangle = 0, \tag{5.66}$$

pa se daljim delovanjem operatora L_+ stalno dobija 0. Za ovu vrednost onda važi

$$a^2 - b_{max}^2 - b_{max} = 0, \quad a^2 = b_{max}(b_{max}+1). \tag{5.67}$$

Slično, i delovanje L_- treba da se prekine na nekoj vrednosti b_{min}. Znači

$$a^2 = b_{min}(b_{min} - 1), \tag{5.68}$$

odnosno

$$b_{max}(b_{max}+1) = b_{min}(b_{min}-1) \tag{5.69}$$

to jest

$$(b_{max} + b_{min})(b_{max} - b_{min} + 1) = 0. \tag{5.70}$$

Označićemo

$$b_{max} = -b_{min} = l. \tag{5.71}$$

Pošto je $b_{max} - b_{min} = 2l$ broj koraka izmedju 'najnižeg', $|a, b_{min}\rangle$ i 'najvišeg', $|, b_{max}\rangle$ stanja za fiksirano a, sledi da je $2l$ prirodan broj ili 0. To znači, l može biti ceo ili poluceo broj.

Bazis momenta impulsa zapravo se označava sa

$$|a,b\rangle = |l,m\rangle, \tag{5.72}$$

pri čemu je $m_{min} = l \leq m \leq m_{max} = l$; mogućih vrednosti kvantnog broja m odnosno b ima $2l+1$. Odavde vidimo da su svojstvene vrednosti momenta impulsa kvantovane, diskretne.

5.3 Spin elektrona

Dominantni član koji opisuje energiju interakcije naelektrisane čestice sa slabim magnetnim poljem, i u slučaju nehomogenog polja, je $-\vec{\mu}\cdot B$. razmotrimo šta se dešava u situaciji kada snop čestica koji se kreće npr. duž x-ose nailazi na nehomogeno magnetno polje $\vec{B} = B\vec{e}_z$. U ovom slučaju hamiltonijan je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu}\cdot B = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \mu_B L_z B. \tag{5.73}$$

Promena z-komponente impulsa p_z može se odrediti koristeći jednačine kretanja u Heisenberg-ovoj slici; ili, primenjujući Ehrenfest-ovu teoremu možemo da vidimo kako se menja očekivana vrednost:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\langle p_z\rangle &= \langle [p_z, H]\rangle = \mu_B\langle L_z[p_z, B]\rangle \\ &= -i\hbar\mu_B\langle L_z\tfrac{\partial B}{\partial z}\rangle. \end{aligned} \tag{5.74}$$

Ako pretpostavimo, npr., da je $\frac{\partial B}{\partial z}$=const, dobijamo

$$\frac{d\langle p_z\rangle}{dt} = -\mu_B\frac{\partial B}{\partial z}\langle L_z\rangle. \tag{5.75}$$

Znači, ako je sistem u stanju sa odredjenom vrednošću z-projekcije momenta impulsa, pri prolasku kroz magnetno polje početni snop će da skreće u pravcu nehomogenosti polja. Ako u snopu imamo pomešana stanja sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja, pri prolasku kroz magnetno polje snop se razdvaja na onoliko delova koliko ima mogućih vrednosti L_z.

Eksperimentalnu situaciju analognu gore opisanoj ostvarili su Stern i Gerlach u eksperimentu iz 1922. Oni su merili vrednosti magnetnog dipolnog momenta atoma (tj. jona) srebra pri prolasku kroz nehomogeno magnetno polje. Medjutim, snop se razdvajao ne na neparan broj delova $2l+1$ – zavisno od L_z, nego na dva dela! Sličan eksperiment sa vodonikovim atomima u osnovnom stanju ponovili su 1927. Phipps i Taylor, sa sličnim rezultatom. Umesto da prolazi nepromenjen kroz magnetno polje, snop se cepao na dva. Pri tome je utvrdjeno i da odgovarajući magnetni moment, zbog svog reda veličine, ne potiče od protona nego upravo od elektrona.

Jedino objašnjenje ovakvog ponašanja je da elektron, osim orbitnog, ima i unutrašnji moment impulsa, spin; vrednosti ovog momenta su polucele, $s_z = \pm\frac{1}{2}$. I spin prouzrokuje magnetni dipolni moment

$$\vec{\mu} = g\frac{e}{2mc}\vec{s} = -g\mu_B\vec{s}. \tag{5.76}$$

Faktor proporcionalnosti zove se žiromagnetni odnos; za elektron, $g = 2.0022$. Formule slične (5.76) važe za proton i neutron (uz zamenu $m \to m_p$ odnosno $\mu_B \to \mu_N$; $\mu_N = \frac{|e|}{2m_pc}$ se zove nuklearni magneton), pri čemu su žiromagnetni odnosi $g_p = 5.59$ i $g_n = -3.83$. Polucela vrednost $s = \frac{1}{2}$ dobija se iz činjenice da se početni snop cepa na dva: $2s + 1 = 2$. Prema tome, vidimo da se i polucele vrednosti ugaonog momenta koje smo dobili algebarskom analizom svojstvenih jednačina realizuju u prirodi, i to ne kao orbitni nego kao unutrašnji moment impulsa. Sve elementarne čestice imaju spin; one sa polucelim spinom (kao elektron, proton, neutron) zovu se fermioni dok se čestice sa celobrojnim spinom zovu bozoni (na primer, spin fotona je 1).

Analizirajmo sad malo detaljnije spinska stanja elektrona. Kao što smo videli, projekcija spina na z-osu s_z ima dve moguće vrednosti, $\pm\frac{1}{2}\hbar$; vrednost kvadrata spina s^2 je $\frac{3}{4}\hbar^2$. Znači prostor stanja spina je dvodimenzion, i spinska stanja možemo prikazati kao vektore-kolone od dva elementa. Svojstvena stanja od s^2 i s_z pisaćemo kao

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{5.77}$$

Da vidimo kako se u ovom prostoru prikazuju operatori spina. Očigledno,

$$s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad s^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{5.78}$$

$s_\pm$ možemo naći iz njihovog delovanja na vektore bazisa. Iz opšte formule

$$L_+|l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\,|l, m{+}1\rangle = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|l, m{+}1\rangle \tag{5.79}$$

vidimo

$$s_+\,|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 0 \qquad s_+\,|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \hbar\,|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \tag{5.80}$$

Ako predstavimo s_+ pomoću matrice

$$s_+ = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \tag{5.81}$$

gornje formule mogu se prepisati kao

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \qquad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{5.82}$$

i iz njih možemo odrediti a, b, c i d. Dobijamo

$$s_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad s_- = (s_+)^\dagger = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.83}$$

i dalje

$$s_x = \frac{1}{2}(s_+ + s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2i}(s_+ - s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.84}$$

Matrice σ_i, $s_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ nazivaju se Pauli-jeve matrice.

Pokazati da Pauli-jeve matrice zadovoljavaju relaciju $\sigma_i\sigma_k = \delta_{ik} + i\epsilon_{ikl}\sigma_l$. Odrediti svojstvena stanja projekcije spina $s_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}$ duž ose $\vec{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$. Odrediti operator koji reprezentuje rotaciju za ugao α oko ose $\vec{n}$ u spinskom prostoru, $e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}}$. Koja matrica odgovara rotaciji za 2π? za 4π?

5.4 Prostor stanja elektrona

Stern-Gerlach-ov i ostali eksperimenti pokazuju da elektron, osim položaja i impulsa, karakteriše još jedna osobina nezavisna od prostora – spin. Ovakve osobine nazivaju se unutrašnji stepeni slobode. naravno, spin se manifestuje kroz interakciju sa magnetnim poljem i utiče na kretanje elektrona. "Nezavisnost" spina od prostornih osobina znači da u talasnu funkciju elektrona moramo da dodamo informaciju o spinu, tj. kvantne brojeve koji ga opisuju:

$$\psi_s(\vec{r}) = \langle s, \vec{r}|\psi\rangle. \tag{5.85}$$

Matematički, nezavisnost znači da je prostor stanja elektrona tenzorski proizvod orbitnog i spinskog prostora; simbolički

$$|s, \vec{r}\rangle = |s\rangle \otimes |\vec{r}\rangle. \tag{5.86}$$

Sličan primer smo već imali kod prelaska sa jednodimenzionog na trodimenzioni prostor. Analogno sa (5.86),

$$|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle. \tag{5.87}$$

Osnovna razlika je što je u slučaju spina "spinski prostor" prostor brojnih kolona od dva elementa dok je prostor obrazovan (razapet) bazisom svojstnvenih vektora koordinate $|x\rangle$, kao vektorski prostor beskonačnodimenzion. Dodavanje stepeni slobode realizije se tenzorskim proizvodom; u slučaju konačnodimenzionih vektorskih prostora to je tenzorsko množenje matrica. Kod elektrona,

$$\psi(s, \vec{r}) = |+\rangle \otimes \psi_+(\vec{r}) + |-\rangle \otimes \psi_-(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}. \tag{5.88}$$

Ova, dvokomponentna talasna funkcija naziva se spinor. U mnogim fizičkim problemima spin se dekupluje od prostornih stepeni slobode i sa dovoljnom tačnošću uticaj spina, npr. na vrednosti energije, možemo da zanemarimo. Naravno, prostor stanja elektrona je "dvostruko veći" nego prostor stanja čestice bez spina: npr degeneracija n-tog nivoa energije vodonikovog atoma je zapravo $2n^2$, jer svako od n^2 stanja sa fiksiranim vrednostima $n,\ l,\ m$ može imati projekciju spina na z-osu $+\frac{1}{2}$ ili $-\frac{1}{2}$. Zato je prava oznaka svojstvenih funkcija elektrona u atomu vodonika $|n, l, m, m_s\rangle$.

Slično vektorima, i opservable koje se odnose na orbitne i unutrašnje stepene slobode su nezavisne i mogu se nezavisno (istovremeno) meriti. To znači da komutiraju a matematički su opisane, kao i stanja, tenzorskim proizvodom odgovarajućih operatora.

Razmotrimo na primer kretanje neutrona u homogenom magnetnom polju. Mada je električno neutralan neutron ima magnetni moment jer ima spin, $\mu = -g\mu_N\vec{s}$, i prema tome interaguje sa magnetnim poljem. Odgovarajući hamiltonijan je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu}\cdot\vec{B}, \tag{5.89}$$

ili ako uzmemo u obzir da je impuls definisan u orbitnom prostoru a spin u spinskom, poslednju formulu preciznije možemo zapisati kao

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes (-\frac{\hbar^2}{2m})\Delta + \frac{g\mu_N\hbar B}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes I, \tag{5.90}$$

z-osu smo, očigledno, stavili duž pravca magnetnog polja. Matrice u direktnom proizvodu se množe tako što svaki element prve matrice množi celu drugu matricu, pa tako dobijamo

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{g\mu_N\hbar B}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{g\mu_N\hbar B}{2} \end{pmatrix}. \tag{5.91}$$

Stacionarna Schrödinger-ova jednačina za gornji hamiltonijan glasi

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{g\mu_N\hbar B}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{g\mu_N\hbar B}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}, \tag{5.92}$$

tj.

$$\begin{aligned} \Delta\psi_+ + \tfrac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{g\mu_N\hbar B}{2})\psi_+ &= 0, \\ \Delta\psi_- + \tfrac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{g\mu_N\hbar B}{2})\psi_- &= 0. \end{aligned} \tag{5.93}$$

Partikularno rešenje je

$$\begin{pmatrix} Ae^{i\vec{k}_+\cdot\vec{r}} \\ Be^{i\vec{k}_-\cdot\vec{r}} \end{pmatrix}, \tag{5.94}$$

gde su $k_\pm^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E \mp \frac{g\mu_N\hbar B}{2})$.

Odrediti kako se sa vremenom menja očekivana vrednost x-projekcije spina neutrona u homogenom magnetnom polju $\vec{B} = B\vec{e}_z$, ako je u početnom trenutku neutron bio u svojstvenom stanju s_x-a $\frac{\hbar}{2}$.

5.5 Slaganje ugaonih momenata

U klasičnoj fizici momenti impulsa su vektori i sabiraju se jednostavno: u Decartes-ovom koordinatnom sistemu sabiraju se komponente. U kvantnoj mehanici, medjutim, videli smo da je moment impulsa poseban u tom smislu što njegove komponente medjusobno ne komutiraju pa se i ne mogu istovremeno odrediti. Ima mnogo fizičkih situacija u kojima je bitan zbir ugaonih momenata: na primer, da bismo govorili o spinu sistema od dva ili više elektrona, ili kod jedne čestice, kad se sabira njen spinski i orbitni moment impulsa. Pošto je opšta priča o sabiranju momenata impulsa dosta komplikovana nećemo se u nju upuštati; ipak ćemo na gore navedenim primerima razmotriti neke detalje ovog problema i naravno rezultat.

Pri tome neki elementi intuicije ostaju potpuno isti kao i u klasičnoj fizici. npr. momenti impulsa pojedinačnih čestica su nezavisne opservable, mogu se meriti istovremeno, pa komutiraju. Da bismo opisali kompozitne fizičke veličine koje se sastoje od više, nezavisnih stepeni slobode potreban nam je, kao što smo videli, direktni proizvod prostora stanja.

Kao prvi primer uzećemo sabiranje orbitnog i spinskog ugaonog momenta elektrona. Ako označimo

$$\vec{J} = \vec{S} + \vec{L} \tag{5.95}$$

imaćemo, kao i u prethodnom slučaju, $[\vec{l}, \vec{s}] = 0$, pa se istovremeno mogu dijagonalizovati l^2, l_z, s^2, s_z; odgovarajući bazis bi bio

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes Y_l^m = \begin{pmatrix}Y_l^m\\0\end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \otimes Y_l^{m'} = \begin{pmatrix}0\\Y_l^{m'}\end{pmatrix}. \tag{5.96}$$

Medjutim, nas u principu zanimaju svojstvene vrednosti ukupnog momenta impulsa, tj. zajedničke svojstvene vrednosti od j^2 i j_z. Pošto je

$$\vec{J}^2 = (\vec{S} + \vec{L})^2 = S^2 + L^2 + 2(S_x L_x + S_y L_y + S_z L_z), \tag{5.97}$$

lako se vidi da

$$[J^2, L^2] = 0, \qquad [J^2, S^2] = 0. \tag{5.98}$$

Da vidimo kako operatori J_z i J^2 izgledaju:

$$\begin{aligned}
J_z = &\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \otimes L_z + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \otimes I = \begin{pmatrix}L_z + \frac{\hbar}{2} & 0\\ 0 & L_z - \frac{\hbar}{2}\end{pmatrix}, \\
J^2 = &S^2 + L^2 + 2\vec{S}\cdot\vec{L} = \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \otimes L^2 + \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \otimes I \\
&+\hbar\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} \otimes L_x + \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix} \otimes L_y + \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \otimes L_z \\
= &\begin{pmatrix}L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L_-\\ \hbar L_+ & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z\end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{5.99}$$

Pošto j^2 i j_z komutiraju sa l^2, svojstveni vektor možemo uzeti u obliku

$$\langle\theta,\varphi|j,m_j,s,l\rangle=\psi_{jm_jl}=\begin{pmatrix}\alpha Y_l^m\\ \beta Y_l^{m'}\end{pmatrix}. \tag{5.100}$$

On zadovoljava

$$\begin{aligned}J_z\psi_{jm_jl}&=\hbar m_j\psi_{jm_jl}\\ J^2\psi_{jm_jl}&=\hbar^2 j(j+1)\psi_{jm_jl}.\end{aligned} \tag{5.101}$$

Od jednačina (5.101) prvo ćemo, kao i ranije, rešavati jednačinu za J_z, i ona daje

$$m_j=m+\frac{1}{2}=m'-\frac{1}{2}, \tag{5.102}$$

odnosno

$$m=m_j-\frac{1}{2},\qquad m'=m_j+\frac{1}{2},\qquad m'=m+1. \tag{5.103}$$

Rešavanjem svojstvene jednačine za J^2 dobija se

$$\begin{aligned}&\left(l(l+1)+\tfrac{3}{4}+m\right)\alpha+\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,\beta=\lambda\alpha\\ &\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,\alpha+\left(l(l+1)+\tfrac{3}{4}-(m+1)\right)\beta=\lambda\beta\end{aligned} \tag{5.104}$$

gde je $\lambda=j(j+1)$ svojstvena vrednost od J^2. Determinanta matrice

$$\begin{pmatrix}\left(l(l+1)+\frac{3}{4}+m\right)-\lambda & \sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\\ \sqrt{l(l+1)-m(m+1)} & \left(l(l+1)+\frac{3}{4}-(m+1)\right)-\lambda\end{pmatrix} \tag{5.105}$$

ne zavisi od m i ima nule u

$$\lambda=j(j+1)=\ l^2-\frac{1}{4},\ \ l^2+2l+\frac{3}{4} \tag{5.106}$$

tj. imamo dve moguće svojstvene vrednosti: $j=l+\frac{1}{2}$ i $j=l-\frac{1}{2}$. Vrednosti koeficijenata α i β naći ćemo onda iz svojstvene jednačine, npr. u slučaju $j=l-\frac{1}{2}$ imamo

$$(l+m+1)\alpha=-\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\beta,\quad \alpha=-\sqrt{\frac{j-m_j+1}{j+m_j+1}}\,\beta. \tag{5.107}$$

Sledeći a zapravo najjednostavniji slučaj je sabiranje dva spina $s=\frac{1}{2}$: spin dvoelektronskog sistema. Ukupni spin je

$$\vec{S}=\vec{S}_1+\vec{S}_2, \tag{5.108}$$

pri čemu, kao što smo rekli, $[S_{1i}, S_{2j}] = 0$: spinovi različitih čestica medjusobno komutiraju. Komponente ukupnog momenta impulsa zadovoljavaju

$$\begin{aligned} [S_i, S_j] &= [S_{1i} + S_{2i}, S_{1j} + S_{2j}] \\ &= i\hbar\epsilon_{ijk}S_{1k} + i\hbar\epsilon_{ijk}S_{2k} = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k. \end{aligned} \tag{5.109}$$

Dalje, jasno je da možemo pisati

$$\vec{S}^2 = (S_{1i} + S_{2i})(S_{1i} + S_{2i}) = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \tag{5.110}$$

U slučaju spina $\frac{1}{2}$ zapravo je

$$\vec{S}_1 = \vec{s}_1 \otimes I_2 \tag{5.111}$$

što znači da u merenju na prvom elektronu merimo spin a na drugom ništa, i slično

$$\vec{S}_2 = I_1 \otimes \vec{s}_2. \tag{5.112}$$

Prema tome imamo, npr.

$$S_{1z} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \otimes I = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & 1 & 0 & 0\\0 & 0 & -1 & 0\\0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$S_{2z} = I \otimes \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} \otimes \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & -1 & 0 & 0\\0 & 0 & 1 & 0\\0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$S_z = S_{1z} + S_{2z} = \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$S_{1z}S_{2z} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} \otimes \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & -1 & 0 & 0\\0 & 0 & -1 & 0\\0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

itd. Kada se sračuna $\vec{S}^2$ dobije se

$$\vec{S}^2 = \hbar^2\begin{pmatrix}2 & 0 & 0 & 0\\0 & 1 & 1 & 0\\0 & 1 & 1 & 0\\0 & 0 & 0 & 2\end{pmatrix}. \tag{5.113}$$

Bazis u kome su ove matrice napisane je takodje tenzorski proizvod

$$|+\rangle \otimes |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|+\rangle \otimes |-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|-\rangle \otimes |+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|-\rangle \otimes |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Na osnovu izraza (5.5) i (5.113) vidimo da je S_z u zadatom bazisu već dijagonalna matrica sa svojstvenim vrednostima $\hbar$, 0, $-\hbar$; S^2, medjutim nije. Doduše, svojstveni vektori su joj $|+\rangle \otimes |+\rangle$ i $|-\rangle \otimes |-\rangle$, pa svojstveni problem možemo da rešavamo samo za podmatricu $\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ u potprostoru koji je razapet vektorima $|+\rangle \otimes |-\rangle$ i $|-\rangle \otimes |+\rangle$. Svojstvene vrednosti ove matrice su $2\hbar^2$ i 0, a svojstveni vektori $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ i $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ odnosno $|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle$ i $|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle$.

Znači, da zaključimo: sistem od dva elektrona ima četiri spinska stanja: triplet kod koga je $S = 1$, $m_S = -1, 0, 1$ čine stanja $|+\rangle \otimes |+\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle)$ i $|-\rangle \otimes |-\rangle$, i singlet $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle)$ čija je vrednost spina $S = 0$ pa je naravno i $m_S = 0$.

5.6 Identične čestice

U klasičnoj mehanici sve čestice, i one čije su "svojstvene" osobine iste, mogu u principu da se razlikuju. Ako bismo gledali identične kuglice, možemo da zamislimo da svaku obojimo različitom bojom: u stvari, kuglice ili čestice koje su zapravo iste možemo da razlikujemo po trajektoriji odnosno po položaju i brzini u odredjenom, na primer početnom, trenutku vremena.

I u kvantnoj mehanici čestica se karakteriše svojom masom a uz to svojim spinom i eventualno drugim unutrašnjim kvantnim brojevima, medjutim trajektorija ne može biti tačno odredjena. Važi zapravo princip ili POSTULAT NERAZLIČIVOSTI, koji kaže da se IDENTIČNE ČESTICE NE MOGU NIKAKVIM MERENJEM RAZLIKOVATI. Ovaj postulat je dodatni u odnosu na prethodno definisane i da bismo ga preciznije formulisali treba da vidimo kako se on matematički izražava.

Označimo sa $\psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_N, s_N)$ talasnu funkciju koja opisuje stanje N čestica. Videli smo da je prostor stanja više čestica tenzorski proizvod jednočestičnih prostora, što odgovara mogućnosti nezavisnog opisa osobina svake od pojedinačnih čestica. Operator izmene čestica k i l, P_{kl} može se definisati delovanjem na talasnu funkciju tako što menja mesto argumentima $\vec{r}_k, s_k$ i $\vec{r}_l, s_l$:

$$P_{kl}\,\psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots) = \psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots). \tag{5.114}$$

Zapravo, možemo da budemo i apstraktniji: ako stanje sistema čestica označimo sa $|1, \dots k, \dots l \dots N\rangle$, P_{kl} je izmena

$$P_{kl}\,|1, \dots k, \dots l \dots N\rangle = |1, \dots l, \dots k \dots N\rangle \tag{5.115}$$

i odgovara transpoziciji elemenata k i l, pa je element grupe permutacija S_N. Dejstvo tj. reprezentacija ove grupe je definisano formulom (5.114). Elemente grupe S_N ćemo označavati sa P a transpozicije sa P_{kl}. Transpozicija tj. izmena dve čestice ima $\frac{N(N-1)}{2}$, a ukupan broj permutacija (koje se dobijaju primenom proizvoljnog broja transpozicija) je $N!$. Razlaganje proizvoljne permutacije na transpozicije nije jedinstveno, ali je parnost broja transpozicija ista, tj. ima ih ili paran ili neparan broj. Zato mozemo definisati parnost permutacije P, $(-1)^P$.

Očigledno, kad dva puta primenimo P_{kl} vraćamo se na početnu talasnu funkciju tj. $P_{kl}^2 = 1$. To znači da su moguće svojstvene vrednosti operatora izmene P_{kl}, ± 1. Princip nerazličivosti kaže da nikakvim merenjima ne možemo da razlikujemo stanja kod kojih su dve idenične čestice zamenjene: drugim rečima, najviše što operator izmene može da promeni delovanjem na fizička stanja je fazni faktor:

$$P_{kl}\psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots) = e^{i\alpha}\psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots). \tag{5.116}$$

Ali iz uslova $P_{kl}^2 = 1$ vidi se da fazni faktor može biti samo $+1$ ili -1.

Ispostavlja se da osobina: da li izmena dve čestice menja znak talasne funkcije ili ne, vezana za celobrojost spina čestica. Kod čestica celobrojnog spina, bozona, uvek je $P_{kl}\psi = \psi$, dok kod fermiona odnosno čestica koje imaju poluceli spin važi $P_{kl}\psi = -\psi$.

Da bismo bili eksplicitniji, uzmimo najjednostavniji slučaj, dve čestice koje su u stanjima ψ i χ. Operator izmene ove dve čestice daje

$$P_{12}\,\psi(\vec{r}_1)\chi(\vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2)\chi(\vec{r}_1). \tag{5.117}$$

Ako su čestice različite, stanje kompozitnog sistema može biti opisano talasnom funkcijom $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\chi(\vec{r}_2)$ ali ako su identične ne može, jer se menja pri delovanju P_{12}. Zapravo, zavisno od toga da li su čestice bozoni ili fermioni imamo dve mogućnosti (do na normalizacionu konstantu) da opišemo ovaj sistem,

$$\Psi_b(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\chi(\vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2)\chi(\vec{r}_1), \tag{5.118}$$

ili

$$\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\chi(\vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2)\chi(\vec{r}_1). \tag{5.119}$$

Gornji izrazi mogu se dobiti iz početne talasne funkcije $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ delovanjem operatora simetrizacije S odnosno antisimetrizacije A:

$$S = \frac{1}{2}(I + P_{12}), \qquad A = \frac{1}{2}(I - P_{12}). \tag{5.120}$$

Kao što se lako vidi, S i A su projektori.

I u slučaju N identičnih čestica mogu se definisati operatori koji potpuno simetrizuju ili antisimetrizuju talasnu funkciju. Oni su dati izrazima

$$S = \frac{1}{N!}\sum_P P, \qquad A = \frac{1}{N!}\sum_P (-1)^P P. \tag{5.121}$$

I sada su S i P medjusobno ortogonalni projektori, što se lako može pokazati korišćenjem činjenice da je parnost proizvoda permutacija $P'' = PP'$, $(-1)^{P''} = (-1)^{P+P'}$, kao i da permutacije čine grupu.

Vidi se da se fermionska talasna funkcija, pošto je antisimetrična, može napisati kao determinanta (Slater-ova determinanta)

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_n) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_n) \\ \dots & & & \dots \\ \psi_n(\vec{r}_1) & \psi_n(\vec{r}_2) & \dots & \psi_n(\vec{r}_n) \end{vmatrix}. \tag{5.122}$$

Isto tako jasno je da, ako su dva od stanja $\psi_1, \dots \psi_n$ ista, fermionska talasna funkcija je identički jednaka nuli. Ovo se naziva Pauli-jev princip: dva identična fermiona ne mogu biti u istom kvantnom stanju.

Da bi postulat identičnosti važio, svojstvena vrednost od P_{kl} mora da se održava tj. moramo da imamo

$$[P_{kl}, H] = 0 \tag{5.123}$$

tj. za sve permutacije P važi

$$PHP = H. \tag{5.124}$$

Hamiltonijan ne sme da se menja pri izmeni dve identične čestice, operatori koji zadovoljavaju (5.124) zovu se simetrični operatori. Vidimo da je to najčešće zadovoljeno za

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{ij} V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|). \tag{5.125}$$

Dakle, postulat nerazličivosti matematički se može iskazati kao superselekciono pravilo: prostor stanja N identičnih čestica nije tenzorski proizvod jednočestičnih prostora, nego potprostor ovog tenzorskog proizvoda dobijen delovanjem operatora simetrizacije S (u slučaju bozonskih čestica) ili antisimetrizacija A (kod fermiona.

Primetili smo da, kad gledamo sabiranje dva spina 1/2, sva tri stanja u tripketu su simetrična u odnosu na izmenu čestica (podsistema), a singlet je antisimetričan. Slična osobina važi kod sabiranja bilo koja dva ista angularna momenta, $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$, $l_1 = l_2 = l$, zato što je formalno ovaj sistem možemo smatrati za sistem dve identične čestice, a moment impulsa $\vec{J}$, tj. J^2, J_z, $J_\pm$ su simetrični operatori koji komutiraju sa operatorom izmene P_{12}, pa i sa S i A, i možemo ih istovremeno dijagonalizovati. "Najviše" stanje $|j = 2l, m_j = 2l, l, l\rangle = |l, m_l = l\rangle \otimes |l, m_l = l\rangle$ je simetrično, pa je zbog komutiranja sa P_{12} takav i ceo multiplet. Sledeće stanje, $|j = 2l-1, m_j = 2l-1, l, l\rangle$ je dobijeno kao ortogonalno na $|j = 2l, m_j = 2l-1, l, l\rangle$ pa je prema tome antisimetrično, i sa njim ceo multiplet $j = 2l-1$. Itd.

Primera tj. fizičkih efekata principa nerazličivosti ima mnogo. Podjimo od najjednostavnijeg slučaja – dve čestice. Kinematička činjenica da su talasne funkcije simetrične ili antisimetrične na izmenu čestica tumači se nekada kao "izmenska interakcija" odnosno efektivno privlačenje tj. odbijanje čestica. Uzmimo na primer da su čestice u stanjima opisanim talasnim funkcijama φ i χ koje su medjusobno ortogonalne i normirane i, radi jednostavnosti, obe su npr. parne. Sračunajmo verovatnoću da se obe čestice nadju u potprostoru $z > 0$. Ako su čestice različite, videli smo, njihova talasna funkcija je

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_1)\chi(\vec{r}_2), \tag{5.126}$$

pa je tražena verovatnoća

$$\int_{z_1>0}\int_{z_2>0} dV_1\, dV_2 |\psi|^2 = \int_{z_1>0} |\varphi|^2\, dV_1 \int_{z_2>0} |\chi|^2\, dV_2 = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2} = \frac{1}{4} \tag{5.127}$$

zbog osobina parnosti talasnih funkcija. Ako su čestice bozoni, njihova talasna funkcija je

$$\Psi_b(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi(\vec{r}_1)\chi(\vec{r}_2) + \chi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2)). \tag{5.128}$$

Zato se za traženu verovatnoću dobija

$$\int_{z_1>0}\int_{z_2>0} dV_1\, dV_2 |\psi_b|^2 = \frac{1}{4} + I^* I, \tag{5.129}$$

gde je I integral izmene

$$I = \int_{z>0} \varphi^*(\vec{r})\chi(\vec{r}) dV. \tag{5.130}$$

Lako se vidi da je u slučaju fermionske talasne funkcije $\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi(\vec{r}_1)\chi(\vec{r}_2) - \chi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2))$ rezultat $\frac{1}{4} - I^* I$. Znači, verovatnoća da se dva identična bozona lokalizuju u istom delu prostora veća je nego u slučaju kad su čestice različite; za fermione, verovatnoća je manja. kao da se bozoni efektivno privlače a fermioni efektivno dbijaju mada, da naglasimo opet, nikakve interakcije, interakcionog hamiltonijana, potencijalne energije i sl. nema – efekt je čisto kinematički.

Pomoću Pauli-jevog principa takodje se objašnjava popunjavanje elektronskih nivoa u atomima, tj. periodni sistem elemenata. Ako se, vrlo grubo, pretpostavi da se interakcija izmedju elektrona u atomu može zanemariti u odnosu na interakciju elektrona sa jezgrom, onda svi elektroni u višeelektronskom atomu imaju isti spektar energije i ista svojstvena stanja kao elektroni u vodoniku-sličnom atomu. Medjutim, pošto su elektroni identični fermioni, ne mogu svi da budu u istim, osnovnom stanju energije. Zato, kad poredjamo elemente po rastućem atomskom broju tj. naelektrisanju jezgra, kao da popunjavamoredom svojstvena stanja energije elektrona od nižih ka višim. Elementi koji imaju sličnu konfiguraciju poslednje "ljuske" elektrona se ponašaju slično, jer spoljašnji elektroni dominantno utiču na hemijske osobine. Da budemo precizniji: svojstvena stanja energije elektrona u atomu vodonika označavaju se kvantnim brojevima n, $l = 0, \ldots n-1$, $m = -l, \ldots l$ i $m_s = \pm\frac{1}{2}$ tako da energiju E_n ima $2n^2$ različitih stanja. U periodnom sistemu Mendeljejeva poslednja (delimično ili potpuno) popunjena ljuska n odgovara broju periode. Tako imamo

Spektroskopske oznake s, p, d, f, g, h kao što smo pominjali odgovaraju kvantnom broju ugaonog momenta, tj. redom vrednostima $l = 1, 1, 2, 3, 4, 5$. Oznaka, kod aluminijuma npr, $3s^2 3p^1$ znači da u trećoj, poslednjoj elektronskoj ljusci postoje 3 elektrona, dva u stanjima $l = 0$ ($m_s = \pm\frac{1}{2}$) a treći u jednom od 6 stanja sa $l = 1$ koja naravno sva imaju istu energiju. U stvarnosti, medjutim, medjusobna interakcija elektrona odnosno elektrostatičko polje koje svaki od njih stvara ne može da se zanemari. Najlakše ga je uzeti u obzir pri računu kao "ekraniranje" odnosno modifikaciju Coulomb-ovog potencijala jezgra $-\frac{Ze}{r}$. Tada, kao što smo pominjali, energija u stvari zavisi od dva kvantna broja, n i l. Naravno postoji još mnogo interakcija u atomu koje se uzimaju u obzir pri analizi atomskih spektara. Pravi redosled energetskih nivoa u atomima je $\|$ $1s$, $\|$ $2s$, $2p$ $\|$ $3s$, $3p$ $\|$ [$4s$, $3d$], $4p$ $\|$ [$5s$, $4d$], $5p$ $\|$ [$6s$, $4f$, $5d$], $6p$ $\|$ [$7s$, $5f$, $7p$, $6d$] $\|$. Posle nobelijuma koji ima $Z = 102$ jezgra usled odbijajuće Coulomb-ove interakcije protona postaju nestabilna pa tih elemenata nema u priridi (i hemiji). $4f$ orbite su manje ód $6s$ pa ovi f-elektroni koji bi trebalo da odredjuju zapravo ne utiču na osobine ovih elemenata: lantanidi (od lantana do iterbijuma, $Z = 57$ do $Z = 70$. Slično je sa $5f$ stanjima čije su orbite manje od $7s$, pa od aktinijuma, $Z = 89$ do nobelijuma, $Z = 102$ imamo elemente sličnih osobina, aktinide.

5.7 Izospin

Glava 6

Približne metode

Samo za mali broj jednostavnih sistema Schrödinger-ova jednačina se može rešiti egzaktno. medju njima su važni fizički primeri harmonijskog oscilatora i vodonikovog atoma. Medjutim, najčešće nas zanimaju kompleksniji sistemi, npr. koji imaju veći broj čestica (višeelektronski atomi i dalje, molekuli i kristali) i koji se kreću u komplikovanijim spoljašnjim poljima. Da bi se odredile karakteristike kretanja ovakvih sistema, razvijaju se približne metode. Osnovna fizička ideja je da se nadje neki aproksimativni model, jednostavan za račun, koji opisuje glavne osobine sistema. Specifičnosti ponašanja se zatim izračunavaju nekom od približnih metoda, najčešće iterarivno. U kvantnoj mehanici ne postoji samo jedna varijanta približnog računa. Nekada se polazi od hamiltonijana kao osnove za aproksimaciju, nekad od talasne funkcije; teorija perturbacija se može definisati za stacionarni i nestacionarni hamiltonijan, za stanja diskretnog i kontinualnog spektra. osim analitičkih, razvijeni su metodi koji koriste računare. Mi ćemo prikazati osnovne metode približnog računa kao i neke od primera njihove primene.

6.1 Stacionarna teorija perturbacija

Kod stacionarne teorije perturbacija približno se rešava stacionarna Schrödinger-ova jednačina, odnosno odredjuju se energetski nivoi i svojstvene funkcije. Tipičan problem koji imamo u vidu na primer je: atom se unosi u slabo električno ili magnetno polje.

Kako ovo polje menja njegov spektar energije?

Pretpostavićemo da je hamiltonijan sistema oblika

$$H = H_0 + V, \tag{6.1}$$

H_0 je neperturbovani hamiltonijan čije osobine, tj. spektar, svojstvene funkcije, znamo. V je perturbacija: osnovna pretpostavka je da je ona "mala". To znači, fizički, da su tipične promene energije koje ona unosi u sistem mnogo manje od karakterističnih energija, npr. razlika energetskih nivoa neperturbovanog hamiltonijana H_0. Da bismo istakli ovu činjenicu, pisaćemo

$$H = H_0 + \lambda V, \tag{6.2}$$

pretpostavljajući da je $\lambda \ll 1$ mali parametar, i razvijaćemo u red po λ. Na kraju računa ćemo zameniti $\lambda = 1$. Uvodjenje λ je stvar kako kažu na engleskom, "knjigovodstva" odnosno način da lakše vodimo računa o redovima veličina; pravi parametar po kome se razvija je $\frac{|V|}{|H_0|}$, kako god da smo definisali normu $|\;|$ operatora.

Uzimamo, dakle, da je sistem dominantno opisan hamiltonijanom H_0, korekcije zbog prisustva perurbacije su prvog i višeg reda po λ. Znači, ako sa E_n i ψ_n označimo svojstvene energije i svojstvene funkcije od H,

$$H|\psi_n| =\rangle E_n|\psi_n|,\rangle \tag{6.3}$$

možemo pisati

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |\psi_n| &=\rangle |\psi_n^{(0)}|+\rangle \lambda|\psi_n^{(1)}|+\rangle \lambda^2|\psi_n^{(2)}|+\rangle \dots . \end{aligned} \tag{6.4}$$

pri tome ćemo svojstveni bazis od H_0 označiti sa

$$H_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle \tag{6.5}$$

označiti sa $|psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle$; pretpostavićemo da je diskretan i, za početak, nedegenerisan. Naravno, $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$.

Koristeći (6.4), jednačinu (6.3) možemo da prepišemo kao

$$(H_0 + \lambda V)(|m\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(|n\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \dots). \tag{6.6}$$

Ako u ovoj jednačini izjednačimo članove uz iste stepene λ, dobijamo sistem jednačina

$$H_0|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle \tag{6.7}$$

$$H_0|\psi_n^{(1)}\rangle + V|n\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n\rangle \tag{6.8}$$

$$H_0|\psi_n^{(2)}\rangle + V|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n\rangle \tag{6.9}$$

itd.

Prva od jednačina iz sistema (6.7-6.9) je, naravno, (6.5). Sistem se rešava iterativno: kada se reši jednačina (6.7), dobijene vrednosti $E_n^{(0)}$ i $|n\rangle$ se ubacuju u jednačinu (6.8) koja se onda rešava po $E_n^{(1)}$ i $|\psi_n^{(1)}\rangle$, tzv. *prvim popravkama* energije i svojstvenih stanja. kada znamo nulto stanje i energiju i prve popravke, rešavanjem jednačine (6.9) dobijaju se druge popravke energije i stanja itd.

Da bismo rešili jednačine (6.8) i (6.9), moramo ih napisati u nekom bazisu. najprirodniji je bazis neperturbovanog

hamiltonijana, $\{|k|\}\rangle$. Označićemo

$$\begin{aligned} |\psi_n^{(1)}\rangle &= \textstyle\sum_{k\neq n} c_{nk}^{(1)}|k\rangle, \\ |\psi_n^{(2)}\rangle &= \textstyle\sum_{k\neq n} c_{nk}^{(2)}|k\rangle, \end{aligned} \tag{6.10}$$

itd. Uzeli smo da su popravke ortogonalne na nulto stanje $|n\rangle$; popravka duž $|n\rangle$ ne može se odrediti ali i nema smisla. Dakle, razvijena u bazis jednačina (6.8) glasi

$$H_0 \sum c_{nk}^{(1)}|k\rangle + V|n\rangle = E_n^{(0)} \sum c_{nk}^{(1)}|k\rangle + E_n^{(1)}|n\rangle, \tag{6.11}$$

odnosno

$$\sum (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) c_{nk}^{(1)}|k\rangle + V|n\rangle = E_n^{(1)}|n\rangle. \tag{6.12}$$

Odavde se lako vidi da projekcija ove jednačine na pravac $|n\rangle$ daje popravku energije: množenjem sa $\langle n|$ dobijamo

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle = V_{nn}. \tag{6.13}$$

Ostale projekcije jednačine (6.12) daju prvu popravku stanja, tj. koeficijente $c_{nk}^{(1)}$: množenjem sa $\langle m|$ dobijamo

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) c_{nm}^{(1)} + V_{mn} = 0 \tag{6.14}$$

gde je $V_{mn} = \langle m|V|n\rangle$, odnosno

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \tag{6.15}$$

Tako smo dobili izraze za popravku energije i talasne funkcije u prvom redu teorije perturbacija. Treba zapaziti da smo, pretpostavljajući da se sve funkcije mogu razviti po $\{|k|\}\rangle$ zapravo koristili da je taj skup kompletan tj. da su energetski nivoi nedegenerisani. sada se može rešavati i jednačina (6.9) za drugu, kvadratnu popravku. Napisana u bazisu ona glasi

$$H_0 \sum c_{nk}^{(2)} ketk + V \sum c_{nk}^{(1)}|k\rangle = E_n^{(0)} \sum c_{nk}^{(2)}|k\rangle + E_n^{(1)} \sum c_{nk}^{(1)}|k\rangle + E_n^{(2)}|n\rangle. \tag{6.16}$$

Kao i malopre, da bismo našli drugu popravku energije množimo jednačinu sa $\langle m|$. Dobijamo

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle n|V \textstyle\sum c_{nk}^{(1)}|k\rangle = \sum \dfrac{V_{nk}V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \textstyle\sum \dfrac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \end{aligned} \tag{6.17}$$

Množenjem ostalim vektorima $\langle m|| \neq \langle n||$ može se dobiti druga popravka talasne funkcije.

Kao prvi primer primene teorije perturbacija navešćemo *Stark-ov efekt* za osnovno stanje vodonikovog atoma. Stark-ov efekt je promena (cepanje) energetskih nivoa elektrona u atomu (molekulu, plazmi itd.) u slabom električnom polju, obično homogenom i konstantnom. Hamiltonijan elektrona u atomu vodonika koji se nalazi u električnom polju $\vec{E}$ dat je sa

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \vec{d} \cdot \vec{E}. \tag{6.18}$$

Pošto je polje slabo, potencijalnu energiju električnog dipola elektrona možemo uzeti za perturbaciju

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} = -e\vec{r} \cdot \vec{E} = -eEz \tag{6.19}$$

ako orijentišemo z-osu duž polja. Pošto električno polje ne interaguje sa spinom zanemarićemo spinski stepen slobode: tada je osnovno stanje nedegenerisano. Prva popravka energije je

$$E_1^{(1)} = \langle 1|00|V|100| =\rangle \frac{1}{\pi a_0^3} \int\int\int (-eEr\cos\theta) e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = 0 \tag{6.20}$$

jer je talasna funkcija osnovnog stanja

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}. \tag{6.21}$$

Prema tome, u prvom redu teorije perturbacija energija osnovnog stanja se ne menja. Pošto je prva popravka nula, postaje relevantna druga popravka. Formula za drugu popravku energije glasi

$$E_n^{(2)} = \sum \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{6.22}$$

i izvedena je za slučaj nedegenerisanog spektra, a ovde su svi nivoi energije sem osnovnog degenerisani. U formuli, u stvari u opštem slučaju treba da se sumira po svim stanjima različitim od onog koje popravljamo:

$$E_1^{(2)} = \sum_{nlm \neq 100} \frac{|\langle 1|00|V|nlm||\rangle^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}. \tag{6.23}$$

Matrični elementi perturbacije su

$$\langle 1|00| - eEz|nlm| =\rangle - eE \int\int\int R_{00}^* Y_0^{0*} r\cos\theta R_{nl} Y_l^m r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi. \tag{6.24}$$

Pošto je $Y_0^0=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ a $\cos\theta=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}$, možemo dalje da pišemo

$$\begin{aligned}
&= -eE\int R_{00}^*R_{nl}r^3dr\int\int\frac{1}{\sqrt{3}}Y_1^{0*}Y_l^m\sin\theta d\theta d\varphi\\
&= -eE\int R_{00}^*R_{nl}r^3dr\frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{m0}\delta_{l1}\\
&= -\frac{eE}{\sqrt{3}}\delta_{m0}\delta_{l1}\int R_{00}^*R_{n1}r^3dr.
\end{aligned}\tag{6.25}$$

Ovaj poslednji integral nije lako sračunati analitički. Znači, u formuli (6.23) imamo doprinose od po jednog stanja $|n10\rangle$ iz svakog energetskog nivoa.

Da vidimo kako će se promeniti formula za prvu popravku energije u slučaju kad je energetski nivo degenerisan. To znači da ima više stanja koja imaju istu energiju $E_n^{(0)}$: prebrojimo ih dodatnim kvantnim brojem ν:

$$H_0|n\nu\rangle=E_n^{(0)}|n\nu\rangle.\tag{6.26}$$

Kao i ranije, bazis je ortonormiran

$$\langle n\nu|k\kappa\rangle=\delta_{nk}\delta_{\nu\kappa}.\tag{6.27}$$

Jednačina za popravku prvog reda je

$$H_0\sum c^{(1)}_{n\nu,k\kappa}|k\kappa\rangle+V|n\nu\rangle=E_n^{(0)}\sum c^{(1)}_{n\nu,k\kappa}|k\kappa\rangle+E^{(1)}_{n\nu}|n\nu\rangle.\tag{6.28}$$

Množenjem svojstvenim vektorom $\langle n|\mu|$ iste svojstvene vrednosti energije $E_n^{(0)}$ dobijamo

$$E^{(1)}_{n\nu}\delta_{\mu\nu}=\langle n|\mu|V|n\nu|.\rangle\tag{6.29}$$

Ova formula znači u stvari da se prve popravke energije dobijaju dijagonalizacijom perturbacije, odnosno podmatrice $V_{n\mu,n\nu}$ za fiksirano n.

Kao dalji primer primene teorije perturbacija navešćemo *Zeeman-ov efekt*. Zeeman-ov efekt je promena nivoa energije npr. elektrona u slabom magnetnom polju. Odredimo kako homogeno i konstantno magnetno polje utiče na energetske nivoe elektrona u atomu vodonika. Slično kao i kod Stark-ovog efekta uzećemo da je

$$H=H_0+V,\tag{6.30}$$

$H_0=\frac{\vec{p}^2}{2m}-\frac{e^2}{r}$, dok je $V=-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$. Magnetni moment elektrona potiče od spina i od orbitnog momenta impulsa. Ako je magnetno polje duž z-ose, onda imamo

$$V=\mu_BB(L_z+2s_z).\tag{6.31}$$

Da bismo sračunali prvu popravku energije $E_n^{(1)}$ treba da dijagonalizujemo perturbaciju, $\langle nlmm_s|V|nl'm'm'_s\rangle$. Ona je, zapravo, već dijagonalna:

$$\langle nlmm_s|V|nl'm'm'_s\rangle=\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{m_sm'_s}\mu_BB\hbar(m+2m_s).\tag{6.32}$$

Unošenjem u magnetno polje n-ti nivo energije se cepa, a moguće vrednosti popravki su $E_n^{(1)} = \mu_B B\hbar(m + 2m_s)$. Na primer, osnovno stanje $|100 \pm \frac{1}{2}\rangle$ cepa se na dva:

$E_1^{(1)} = \pm\mu_B B\hbar$

Prvo pobudjeno stanje, $n = 2$, je osmostruko degenerisano, a moguće vrednosti kvantnih brojeva su $l = 0$, $m = 0$, $m_s = \pm\frac{1}{2}$ i $l = 1$, $m = -1, 0, 1$, $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Ovaj nivo cepa se na pet energetskih nivoa:

$E_2^{(1)} = 0,\ \pm\mu_B B\hbar,\ \pm 2\mu_B B\hbar$

Znači, magnetno polje ne razlikuje sva stanja tj. ne uklanja degeneraciju potpuno. Vidimo da ova perturbacija zavisi od projekcije ugaonog momentai zato je istorijski kvantni broj operatora L_z nazvan m, "magnetni kvantni broj".

Izračunajmo sada kako se menja prvo pobudjeno stanje elektrona u vodonikovom atomu u slabom električnom polju. Kao i kod osnovnog stanja zanemarićemo spinski stepen slobode jer se ne kupluje sa električnim poljem, pa ćemo uzeti da je prvo pobudjeno stanje četvorostruko degenerisano. Označimo odgovarajuće talasne funkcije na sledeći način

$$\begin{aligned} &\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\,(1 - \frac{r}{2a_0})\,e^{-\frac{r}{2a_0}} = |1| \\ &\rangle[16pt]\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\,\frac{r}{a_0}\,e^{-\frac{r}{2a_0}}\,\cos\theta = |2| \\ &\rangle[16pt]\psi_{21\pm1} = \mp\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}}\,\frac{r}{a_0}\,e^{-\frac{r}{2a_0}}\,\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} = |3|, \rangle|4|.\rangle \end{aligned} \tag{6.33}$$

Izračunati matrične elemente perturbacije i pokazati da je odgovarajuća podmatrica oblika

$$V = \begin{matrix} 0 & \mathcal{E} & 0 & 0 \\ \mathcal{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix} \tag{6.34}$$

gde je $\mathcal{E} = \frac{31\sqrt{2}}{81\sqrt{3}} eEa_0^4$ (PROVERITI BROJ!!)

Dijagonalizacijom podmatrice perturbacije dobijamo popravke energije u prvom redu teorije perturbacija: $E_2^{(1)} = 0,\ \pm\mathcal{E}$; prvi pobudjeni nivo cepa se na tri.

6.2 Varijacioni metod

varijacioni metod je jedan od aproksimativnih metoda tipičnih za kvantnu mehaniku: koristi se za odredjivanje energije osnovnog (eventualno, prvog pobudjenog) stanja ukoliko u dobroj meri poznajemo oblik talasne funkcije.

Osnova varijacionog metoda je sledeća "teorema", koja se odnosi na funkcional energije $E[\psi]$ definisan kao $E[\psi] = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$. Teorema kaže da, ako je E_0 energija osnovnog stanja, uvek važi $E[\psi] \geq E_0$. Ova teorema lako se izvodi i svodi se na činjenicu da je očekivana vrednost operatora uvek veća ili jednaka od njegove minimalne vrednosti.

U principu znači, energiju E_0 i odgovarajuće osnovno stanje $|\psi_0\rangle$ mogli bismo odrediti variranjem funkcionala energije odnosno iz uslova

$$\frac{\delta E[\psi]}{\delta \psi} = 0. \tag{6.35}$$

Ova jednačina, naravno, ne rešava se ništa jednostavnije od Schrödinger-ove jednačine. Medjutim, ukoliko imamo neku informaciju o talasnoj funkciji osnovnog stanja, npr. da se može aproksimirati familijom funkcija $|\psi(a, b, \dots)\rangle$ (*probne funkcije*) koje zavise od konačnog broja realnih parametara $a, b, \dots$, onda umesto u skupu svih stanja energiju možemo da variramo u podskupu stanja $|\psi(a, b, \dots)\rangle$. Tada se funkcional $E[\psi]$ svodi na funkciju $E(a, b, \dots)$, a varijacioni uslov (6.35) na uslov ekstremuma:

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial b} = 0, \quad \dots . \tag{6.36}$$

Rešavanjem (6.36) dobijaju se vrednosti parametara a_0, b_0, …, a približna minimalna vrednost energije je $E(a_0, b_0, \dots)$. Naravno, ako se u skupu probnih funkcija nalazi svojstvena funkcija osnovnog stanja, tada će se dobiti $E(a_0, b_0, \dots) = E_0$.

Primer: osnovno stanje molekula vodonika i molekulske orbitale

Problem kretanja elektrona u elektrostatičkom potencijalu dva protona koji miruju spada u rešive kvantno-mehaničke probleme: rešava se uvodjenjem pogodnih koordinata. Mi ćemo, medjutim, pokazati kako se ovaj problem može analizirati približno. Metod koji se koristi je uopštena varijanta varijacionog metoda (prilagodjena problemu) jer varijacioni parametar R, rastojanje izmedju jezgara, figuriše i u hamiltonijanu i u talasnoj funkciji. Znači, razmatramo jon molekula vodonika koji se sastoji iz dva protona (u tačkama a i a) i jednog elektrona:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}_a^{\,2}}{2M} + \frac{\vec{p}_b^{\,2}}{2M} + \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V, \\ V &= -\frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_a|} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_b|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|}. \end{aligned} \tag{6.37}$$

Pretpostavićemo da je kinetička energija protona mnogo manja od energije elektrona (Born-Oppenheimer-ova aproksimacija) tako da možemo uzeti da su protoni fiksirani u tačkama $\vec{r}_a$ i $\vec{r}_b$:

$$|\vec{r}_a - \vec{r}_b| = R \approx \text{const} . \tag{6.38}$$

Kao što smo napomenuli, ovako formulisan problem se može rešiti egzaktno: svojstvena stanja elektrona nazivaju se molekulske orbitale. Kako bismo, ako ne poznajemo prava svojstvena stanja, mogli da aproksimiramo ove talasne funkcije? Jedna od mogućnosti je da stanje elektrona prikažemo kao superpoziciju stanja kad je elektron vezan za jezgro a (i prema tome, sistem predstavlja vodonikov atom u a + proton u b), i stanja kada je elektron vezan za jezgro b. Ova talasna funkcija je "linearna kombinacija atomskih orbitala". Za osnovno stanje sistema – uzimamo superpoziciju osnovnih stanja u atomu. Dakle, pretpostavićemo da je

$$\psi(\vec{r}) = \alpha\psi_0(\vec{r} - \vec{r}_a) + \beta\psi_0(\vec{r} - \vec{r}_b), \tag{6.39}$$

gde je

$$\psi_0(\vec{r} - \vec{r}_a) = e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_a|}{a_0}}. \tag{6.40}$$

Stanja ne moramo da normiramo odmah nego ćemo to uraditi kasnije. Ako centar koordinatnog sistema stavimo u jedno od jezgara, npr. $\vec{r}_a = 0$, $\vec{r}_b = \vec{R} = E\vec{e}_z$, vidimo da talasna funkcija zavisi od R

$$\psi = \alpha e^{-\frac{r}{a_0}} + \beta e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{R}|}{a_0}}. \tag{6.41}$$

U principu, α i β su takodje varijacioni parametri – ali ne i u ovom problemu. Kod vodonikovog molekula jezgra su identična, tako da izmena $a \leftrightarrow b$ tj. $\vec{r}_a \leftrightarrow \vec{r}_b$ ne menja sistem, tj. može talasnu funkciju (6.39) da promeni samo do na fazni faktor:

$$\alpha \to \beta e^{i\varphi}, \quad \beta \to \alpha e^{i\varphi} \tag{6.42}$$

odnosno, $\alpha = \pm\beta$. Znači u ovom slučaju mogu' ce su samo dve talasne funkcije – simetrična i antisimetrična tj. parna ("gerade", na nemačkom) i neparna ("ungerade").

Normirati talasne funkcije

$$\psi_\pm = e^{-\frac{r}{a_0}} \pm e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{R}|}{a_0}} = \psi_a \pm \psi_b, \tag{6.43}$$

pokazati da je

$$\langle\psi|_\pm|\psi_\pm| =\rangle 2\pi a_0^3(1 \pm S), \tag{6.44}$$

gde je S integral preklapanja

$$S = \frac{1}{\pi a_0^3}\int d^3r\, e^{-\frac{r}{a_0}-\frac{|\vec{r}-\vec{R}|}{a_0}} = e^{-\frac{R}{a_0}}(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{R^2}{3a_0^2}). \tag{6.45}$$

Koristeći ove probne funkcije može se sračunati vrednost energije elektrona:

$$\begin{aligned}
&\langle\psi|_\pm|\tfrac{\vec{p}^2}{2m} + V|\psi_\pm| =\rangle \\
&= \textstyle\int d^3r\,(\psi_a \pm \psi_b)(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R})(\psi_a \pm \psi_b) \\
&= \textstyle\int d^3r\,\psi_a(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R})\psi_a + (a \leftrightarrow b) \\
&\quad \pm \textstyle\int d^3r\,\psi_a(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R})\psi_b + (a \leftrightarrow b) \\
&= 2\pi a_0^3(H_{aa} \pm H_{ab})
\end{aligned} \tag{6.46}$$

jer se, smenom $\vec{r} \to \vec{r} - \vec{R}$ vidi da su prva dva integrala jednaka. Posle dužeg računa dobija se

$$\begin{aligned} H_{aa} &= \pi a_0^3 \big(-E_\infty + \tfrac{e^2}{R} e^{-\frac{2R}{a_0}} (1 + \tfrac{R}{a_0}) \big) \\ H_{ab} &= \pi a_0^3 \big(-\tfrac{e^2}{a_0} e^{-\frac{R}{a_0}} (1 + \tfrac{R}{a_0}) \big). \end{aligned} \tag{6.47}$$

Ovde je $E_\infty = -\frac{e^2}{R}$. Energije parnog i neparnog stanja su

$$E_\pm = \frac{H_{aa} \pm H_{ab}}{1 \pm S}. \tag{6.48}$$

Zavisnost energije od rastojanja izmedju protona R najbolje se vidi na slici. Obe vrednosti $E_\pm$ imaju asimptotu E_∞. Neparna funkcija, medjutim, nema minimum – ona je *nevezujuća*. Prava, tj. *vezujuća* orbitala je parna.

6.3 Vremenski zavisna perturbacija

kao što i ime kaže, kod vremenski zavisne perturbacije dodatničlan u hamiltonijanu zavisi od vremena. Zapravo, ovo je situacija svih realnih fizičkih sistema: po pravilu sistem ne možemo u potpunosti da izolujemo nego samo "najvećim delom", tako da on uvek ima neku interakciju sa okolinom; interakcija nije konstantna u vremenu i često se opisuje i stohastički.

Kao što znamo, u slučaju kad hamiltonijan H_0 ne zavisi od vremena u Schrödinger-ovoj jednačini

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_0 \Psi \tag{6.49}$$

vremenska promenljiva može se razdvojiti od prostornih. Partikularna rešenja su

$$\Psi_k(t, \vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \psi_k(\vec{r}), \tag{6.50}$$

gde su $\psi_k(\vec{r})$ svojstvene funkcije hamiltonijana

$$H_0 \psi_k(\vec{r}) = E_k \psi_k(\vec{r}). \tag{6.51}$$

Opšte rešenje je linearna kombinacija partikularnih rešenja

$$\Psi(t, \vec{r}) = \sum_k c_k \Psi_k(t, \vec{r}), \tag{6.52}$$

c_k su naravno, proizvoljni ali konstantni kompleksni brojevi.

To znači, svojstvena stanja energije su stacionarna: iz (6.50) vidimo da se njihova promena u vremenu svodi na promenu faznog faktora, dok se npr. gustina verovatnoće $|\Psi(t, \vec{r})|^2$ ali i očekivane vrednosti, ne menjaju. To nije slučaj sa opštim stanjem (6.52). Zato sistem koji je potpuno izolovan ostaje u osnovnom ali i u pobudjenom stanju energije beskonačno dugo.

Mi, dakle, posmatramo sistem opisan hamiltonijanom

$$H(t) = H_0 + V(t). \tag{6.53}$$

Hamiltonijan zavisi od vremena, tako da nema smisla govoriti o njegovim svojstvenim stanjima – ona se ionako menjaju. Medjutim, pošto je (dok god je) perturbacija mala, ipak ima smisla da se sistem karakteriše svojstvenim stanjima osnovnog hamiltonijana H_0, $\psi_k(\vec{r})$ odnosno $|k\rangle$. Ta stanja sad neće biti stacionarna tj. biće mogući prelazi iz jednog u drugo stanje. Verovatnoće ovih prelaza mogu da se računaju perturbativno. Pretpostavimo, dakle, da je stanje sistema u nekom trenutku t, $|\Psi(t)\rangle$. Ono se može razviti po svojstvenom bazisu neperturbovanog hamiltonijana

$$|\Psi(t)\rangle = \sum a_k(t)|k\rangle = \sum c_k(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|k\rangle, \tag{6.54}$$

poslednja formula je slična (6.50), samo što u njoj koeficijenti razvoja $c_k(t)$ zavise od vremena jer opisuju evoluciju po $H = H_0 + V(t)$. Iz Schrödinger-ove jednačine dobićemo kako se menjaju $c_k(t)$ sa vremenom. Iz

$$i\hbar\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (H_0 + V)|\Psi(t)\rangle \tag{6.55}$$

sledi

$$i\hbar\sum\frac{dc_k}{dt}e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|k\rangle = \sum c_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}V|k\rangle. \tag{6.56}$$

Posle množenja sa $e^{\frac{i}{\hbar}E_m t}\langle m||$ dobijamo sistem jednačina za koeficijente

$$i\hbar\frac{dc_m}{dt} = \sum c_k e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)t}V_{mk}. \tag{6.57}$$

Ova jednačina je tačna, tj. u njoj do sada nije korišćena nikakva pretpostavka o interakciji V.

Sada ćemo pretpostaviti da je V perturbacija tj. da je $\frac{|V|}{|H_0|}$ malo, i rešavati problem: kolika je verovatnoća da, ako se u početnom trenutku $t = 0$ sistem nalazio u stanju $|n\rangle$, u kasnijem trenutku t predje u stanje $|m\rangle$? Verovatnoća je, naravno, $|c_m(t)|^2$; pri tome uslov $|\Psi(0)\rangle = |n\rangle$ znači

$$c_k(0) = \delta_{nk}, \tag{6.58}$$

odnosno u $t = 0$ svi koeficijenti u rszvoju su nule sem n-tog. Ako je V mala perturbacija, u t svi koeficijenti $c_k(t)$ bice mali tj. blizu 0, dok će $c_n(t)$ biti blizu 1. Znači u jednačinama (6.57) na desnoj strani možemo da uzmemo da je $c_k(t) = \delta_{nk}$ jer su one već prvog reda po perturbaciji. Sistem se svodi na

$$i\hbar\frac{dc_m}{dt} = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t}V_{mn}. \tag{6.59}$$

Kuplovani sistem od beskonačno jednačina (6.57) (koji je ekvivalentan Schrödinger-ovoj jednačini za kompletan sistem) se pod datom pretpostavkom svodi na jednostavne dekuplovane jednačine (6.59), čije je rešenje

$$c_m = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t} V_{mn} dt. \tag{6.60}$$

Verovatnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ u $t=0$ u stanje $|m\rangle$ u t je

$$|c_m|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|\int_0^t e^{i\omega_{mn}t} V_{mn} dt|^2, \tag{6.61}$$

gde je $\omega_{mn} = \frac{E_m-E_n}{\hbar}$. Ova formula naravno važi i kad perturbacija ne zavisi od vremena. Izmedju ostalog, ovde vidimo da je, zbog apsolutne vrednosti u (6.61) (i naravno zbog realnosti potencijala $V_{mn} = V_{nm}^*$), verovarnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ u $|m\rangle$ jednaka verovatnoći prelaza iz $|m\rangle$ u $|n\rangle$.

Važan specijalni slučaj primene formule (6.61) je kad je perturbacija harmonijska onosno kad periodično zavisi od vremena;

$$V = V_0 \cos\omega_0 t. \tag{6.62}$$

Mi ćemo, podrazumevajući uzimanje realnog dela funkcije, pisati

$$V = V_0 e^{-i\omega_0 t}. \tag{6.63}$$

Za koeficijente c_m dobijamo

$$c_m = -\frac{i}{\hbar}\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega_0)t}-1}{i(\omega_{mn}-\omega_0)} V_{0,mn}, \tag{6.64}$$

odnosno

$$|c_m|^2 = \frac{|V_{0,mn}|^2}{\hbar^2}\frac{4\sin^2\frac{(\omega_{mn}-\omega_0)t}{2}}{(\omega_{mn}-\omega_0)^2}. \tag{6.65}$$

Iz oblika funkcije vidimo da je verovatnoća prelaza najveća u stanje $|\rangle$ za koje je $\omega_{mn} = \omega_0$: najverovatnije je da će sistem apsorbovati kvant energije $\hbar\omega_0$ ako je on baš jednak razlici energetskih nivoa $E_m - E_n$. Ovako se, u slučaju diskretnog spektra, manifestuje *rezonanca*.

Sada ćemo razmatrati verovatnoću jonizacije atoma, tj. prelaza iz stanja $|n\rangle$ u neko od nevezanih stanja, tj. stanja neprekidnog spektra energije $|\nu\rangle$: uzimamo da je $E_\infty - E_n < \hbar\omega_0$.

Formula za verovatnoću prelaza

$$|c_m|^2 = \frac{|V_{\nu n}|^2}{\hbar^2}\frac{4\sin^2\frac{(\omega_{\nu n}-\omega_0)t}{2}}{(\omega_{\nu n}-\omega_0)^2} g(E_\nu) \tag{6.66}$$

ostaje ista, samo što je treba pomnožiti sa "gustinom stanja" odnosno multiplicitetom $g(E_\nu)$ ukoliko je energija E_ν degenerisana. Medjutim, sada u limesu $t \to \infty$ izraz (6.66) prelazi u δ-funkciju, tj. imamo tačnu rezonancu. Reprezentacija δ-funkcije koja se koristi je

$$\delta(\alpha) = \lim_{t\to\infty} \delta(\alpha, t), \tag{6.67}$$

gde je

$$\delta(\alpha, t) = \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi t \alpha^2}. \tag{6.68}$$

Pokazati da je $\lim_{t\to\infty} \delta(\alpha, t) = \begin{cases} 0, & \alpha \neq 0 \\ \infty, & \alpha = 0 \end{cases}$. Pokazati, dalje, da je $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\alpha, t) d\alpha = 1$.

Prema tome, verovatnoća prelaza za veliko vreme t je

$$|c_\nu|^2 = d\frac{|V_{\nu n}|^2}{\hbar^2}\delta(\frac{\omega_{\nu n} - \omega_0}{2} g(E_\nu \pi t = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{\nu n}|^2 \delta(E_\nu - E_n - \hbar\omega_0) t g(E_\nu). \tag{6.69}$$

Ukupna verovatnoća jonizacije, tj. raspada stanja $|n\rangle$ u jedinici vremena je

$$\Gamma = \int |c_\nu|^2 \, dE_\nu = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{\nu n}|^2 g(E_\nu). \tag{6.70}$$

Ova formula naziva se Fermi-jevo zlatno pravilo.

Najvažniji primer rezonance su stimulisana apsorpcija i emisija svetlosti tj. atomski spektri. Elektron u atomu približno je opisan hamiltonijanom

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}, \tag{6.71}$$

a u prisustvu ravnog elektromagnetnog talasa – fotona – hamiltonijan je

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 - \frac{Ze^2}{r}, \tag{6.72}$$

gde je $\vec{A}$ vektorski potencijal za foton, $\vec{A} = \vec{A}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_0 t)}$. Medjutim, u procesima emisije i apsorpcije svetlosti prostorni deo zavisnosti električnog i magnetnog polja može se zanemariti jer su karakteristične dimenzije atoma reda veličine Bohr-ovog radijusa, 10^{-10} m, dok su tipične talasne dužine, npr žuta Na-linija, 687 nm: za 3 ili 4 reda veličine veće. Znači, električno i magnetno polje praktično su konstantni u celom atomu. Pri tome je po energiji dominantna interakcija dipolnog momenta elektrona sa električnim poljem, tako da je hamiltonijan, aproksimativno,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - \vec{d}\cdot\vec{E} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + e\vec{r}\cdot\vec{E}_0 e^{-i\omega_0 t}. \tag{6.73}$$

Znači, u ovom slučaju imamo harmonijsku perturbaciju. Verovatnoća prelaza sa energetskog nivoa E_n na nivo E_m data je, iz (6.65),

$$|c_m|^2 = \frac{|\vec{E}_0 \cdot \vec{d}_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{4\sin^2 \frac{(\omega_{mn} - \omega_0)t}{2}}{(\omega_{mn} - \omega_0)^2} \tag{6.74}$$

i zavisi od matričnih elemenata električnog dipola elektrona: zato se ovi prelazi zovu dipolni. Iz formule (6.74) vidimo da je verovatnoća prelaza 0 ako je matrični element $\vec{d}_{mn}$ jednak nuli: ovi prelazi su "zabranjeni". Razmatranjem vrednosti $\langle m|\vec{d}|n\rangle$ dobijaju se *selekciona pravila* za dipolne prelaze.

Pokazati da za dipolne prelaze u atomu vodonika važe sledeća selekciona pravila:

$$\begin{aligned} &i) \quad \Delta s = 0 \\ &ii) \quad \Delta l = \pm 1 \\ &iii) \quad \Delta m = 0 \text{ za } \vec{E}_0 \parallel z, \quad \Delta m = \pm 1 \text{ za } \vec{E}_0 \perp z. \end{aligned} \tag{6.75}$$

6.4 Teorija rasejanja: potencijalno rasejanje

Zadatak koji rešava teorija rasejanja je sledeći: za dati upadni snop čestica (koji je definisan nekim svojim parametrima kao što su masa čestica, brzina, polarizacija itd.) koji se rasejava na zadatoj meti odnosno potencijalu $U(\vec{r})$ treba odrediti diferencijalni presek rasejanja tj. karakteristike rasejanog snopa. Ove karakteristike izražavaju se efikasnim presekom ili presekom rasejanja σ (slika). Pretpostavimo da je pravac kretanja upadnog snopa z-osa i da ima fluks j_{in},

$$j_{in} = \frac{\text{broj upadnih cestica}}{\text{povrsina} \cdot \text{vreme}}. \tag{6.76}$$

tada je diferencijalni presek $\sigma(\theta, \varphi)$

$$\sigma(\theta, \varphi) d\Omega \equiv d\sigma = \frac{j(\theta, \varphi) d\Omega}{j_{in}} \tag{6.77}$$

gde je $j d\Omega$ fluks čestica koje se raseju u prostorni ugao $d\Omega$. Ukupni presek σ je

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \tag{6.78}$$

i meri se jedinicom površine.

Najjednostavnija pretpostavka je da su stanja pre i posle sudara (u žargonu, *in* i *out* stanja) slobodna stanja, odnosno da pripadaju kontinualnom spektru energije, $E > 0$. Prema tome, da bismo odredili verovatnoće prelaza tj. presek rasejanja treba nam teorija perturbacija za kontinualni spektar – ukoliko se, naravno, problem ne može rešiti egzaktno i ako perturbacija tj. potencijal u kome se čestice rasejavaju mali. Ovo je uobičajena pretpostavka u teoriji rasejanja: da je potencijal $U(\vec{r})$ lokalizovan: ako oblast ove lokalizacije opišemo vrednostima položaja oko koordinatnog početka $\vec{r} = 0$, onda pretpostavka lokalizacije znači da je $U(\vec{r}) \approx 0$ za $|\vec{r}| > a$. Zato je opravdana pretpostavka da su stanja na velikom rastojanju odnosno *in* i *out* stanja u stvari stanja slobodne čestice. Medjutim, i u klasičnoj mehanici postoje druge situacije, pa je moguće da potencijal "zahvati" česticu tj. da ona iz stanja kontinualnog spektra predje u vezano stanje: ovakve slučajeve nećemo razmatrati. i dalje, pretpostavka da potencijalna energija $U(\vec{r})$ ne zavisi od vremena znači da razmatramo u stvari elastično rasejanje (pri kome se održava ukupna energija), i da ćemo ga opisati pomoću stacionarnih stanja kao što smo radili u slučaju jednodimenzionih problema ranije. Opšta teorija rasejanja može da razmatra i sve komplikovanije situacije. Za ulazno stanje obično uzimamo ravan talas impulsa $\hbar k_0$

$$\psi_{in} = \psi^{(0)} = e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} = e^{ik_0 z}. \tag{6.79}$$

Treba dodati još jednu napomenu: u praksi veoma često imamo sudar dva snopa čestica, a ne rasejanje na fiksiranoj meti. Medjutim, kao što smo ranije komentarisali, problem dva tela se uvek može svesti, ako predjemo u sistem centra mase, na problem kretanja efektivne čestice u potencijalu koji je zapravo potencijal interakcije. U ovom smislu ćemo podrazumevati da kad opisujemo sudar dva snopa zapravo uvek radimo u sistenmu centra mase.

Dakle rešavamo Schrödinger-ovu jednačinu

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi \tag{6.80}$$

pretpostavljajući da je ukupna energija pozitivna, $E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} > 0$ i da je neperturbovani hamiltonijan zapravo kinetička energija, $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$. Za neperturbovanu talasnu funkciju $\psi^{(0)}$, *in*-stanje, uzećemo (6.79). Prva popravka talasne funkcije $\psi^{(1)}$ mnogo je manja od $\psi^{(0)}$ kao što je i vrednost potencijalne energije mnogo manja od vrednosti kinetičke energije. Pišemo kao i ranije

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \dots . \tag{6.81}$$

Schrödinger-ova jednačina (6.80) može se prepisati kao

$$\Delta\psi + k_0^2\psi = \frac{2mV}{\hbar^2}\psi = U\psi. \tag{6.82}$$

Nulti i prvi red teorije perturbacija su

$$\begin{aligned}
&\Delta\psi^{(0)} + k_0^2\psi^{(0)} = 0 \\
&\Delta\psi^{(1)} + k_0^2\psi^{(1)} = U\psi^{(0)} \\
&\Delta\psi^{(2)} + k_0^2\psi^{(2)} = U\psi^{(1)} \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{6.83}$$

jednačina (6.83) je perturbativna jednačina koju treba da rešavamo. Rešavaćemo je u svojstvenom bazisu – bazisu ravnih talasa – od H_0, odnosno razvićemo $\psi^{(1)}$, $\psi^{(2)}$, itd. u Fourier-ov integral:

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = \int c_{\vec{k}}^{(1)} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3k, \qquad \psi^{(2)}(\vec{r}) = \int c_{\vec{k}}^{(2)} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3k. \tag{6.84}$$

Jednačina za $\psi^{(1)}$ postaje

$$\int (-k^2 + k_0^2) c_{\vec{k}}^{(1)} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3k = U\, e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}}, \tag{6.85}$$

odnosno, kad se izvrši inverzna Fourier-ova transformacija dobija se vrednost koeficijenata $c_{\vec{k}}^{(1)}$

$$(k_0^2 - k^2) c_{\vec{k}}^{(1)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int U(\vec{r}\,') e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}\,'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} d^3r'. \tag{6.86}$$

Ukupno rešenje za prvu popravku $\psi^{(1)}$ dato je sa

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3r'\, U(\vec{r}\,') \, \frac{1}{k_0^2 - k^2} \, e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k})\cdot\vec{r}\,'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{6.87}$$

Ako u poslednjem integralu izmenimo redosled integracija, dobijamo

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r'\, U(\vec{r}\,') e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}\,'} \int d^3k \, \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{k_0^2 - k^2}. \tag{6.88}$$

Integral

$$G(\vec{r} - \vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{k_0^2 - k^2}. \tag{6.89}$$

definiše Green-ovu funkciju za vremenski nezavisnu Schrödinger-ovu jednačinu za slobodnu česticu, tj. rešenje je jednačine

$$(\Delta + k_0^2) G(\vec{r} - \vec{r}\,') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}\,'). \tag{6.90}$$

Zapravo, korišćenjem Green-ove funkcije G (**??**) se može prepisati kao (tačna) integralna jednačina

$$\psi(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) - \int G(\vec{r} - \vec{r}\,') U(\vec{r}\,') \psi(\vec{r}\,') d^3\vec{r}\,'. \tag{6.91}$$

Razvojem u red talasne funkcije po malom parametru interakcije ova jednačina se može rešiti iterativno, i to je u stvari naš perturbativni razvoj.

Integral (6.89) koji definiše Green-ovu funkciju je divergentan: ima singularitete u $k^2 = k_0^2$. Eksplicitno to vidimo ako integralimo u sfernim koordinatama, postavljajući osu k_z paralelno sa vektorom $\vec{r} - \vec{r}\,'$:

$$G(\vec{r} - \vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \, \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{k_0^2 - k^2}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty \frac{1}{k_0^2-k^2}\,k^2dk\int_0^\pi e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \frac{k^2}{k_0^2-k^2}\,dk\int_{-1}^1 e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|x}dx$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_0^\infty \frac{\sin k|\vec{r}-\vec{r}'|}{k_0^2-k^2}\,k\,dk.$$

Vrednost poslednjeg integrala odnosno način obilaska singulariteta tj. pola $k = k_0$ zapravo treba definisati, a kao što ćemo videti tu definiciju odrediće granični uslovi za zadati problem. Integral se računa primenom Jordan-ove leme, tako što integral po realnoj osi dopunimo integralom po gornjem ili donjem polukrugu (koji je jednak nuli) i time zatvorimo konturu integracije u kompleksnoj ravni. Onda je se rezultat integrala dobija primenom teoreme o reziduumu.

Pretpostavimo da je, u prvom slučaju, pol $+k_0$ pomeren u gornju a pol $-k_0$ u donju poluravan tj. da je obilazak polova kao na slici. Tada imamo

$$G(\vec{r}) = \frac{2\pi}{ir}\int_0^\infty \frac{kdk}{k^2-k_0^2}(e^{ikr}-e^{-ikr}) = \frac{2\pi}{ir}\int_{-\infty}^\infty \frac{kdk}{k^2-k_0^2}e^{ikr} = -\frac{2\pi}{r}\frac{d}{dr}\int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ikr}}{k^2-k_0^2}dk. \tag{6.92}$$

Pošto pri datom obilasku polova imamo

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ikr}}{k^2-k_0^2}dk = 2\pi i\frac{e^{ik_0r}}{2k0}, \tag{6.93}$$

za Green-ovu funkciju dobijamo rezultat

$$G(\vec{r}-\vec{r}') = G^+(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik_0|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}. \tag{6.94}$$

Drugi obilazak polova (slika) daje

$$G^-(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ik_0|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}, \tag{6.95}$$

dok ako integral definišemo kao Cauchy-jevu glavnu vrednost, odnosno poluzbir doprinosa oba pola, dobijamo

$$G^1(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{2\pi}\frac{\cos k_0|\vec{r}-\vec{r}'|}{|\vec{r}-\vec{r}'|}. \tag{6.96}$$

Izračunajmo sada koristeći (6.94) prvu popravku talasne funkcije $\psi^{(1)}$. Dobijamo

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{ik_0|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\,e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}'}U(\vec{r}')\,d^3r' \tag{6.97}$$

Posmatrajmo funkciju $\psi^{(1)}$ u asimptotskoj oblasti, odnosno za velike vrednosti $\vec{r}$. Ako pretpostavimo da je potencijal lokalizovan tj. da je $U(\vec{r}') \neq 0$ samo za vrednosti vektora položaja $\vec{r}'$ lokalizovane u oblasti dimenzija a, $|\vec{r}'| \leq a \leq r$, vidimo da će podintegralna funkcija u (6.97) biti različita od nule samo za male vrednosti $|\vec{r}'|$: znači možemo da je razvijemo u red po parametru $\frac{r'}{r}$. Kako je

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = (r^2 + r'^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}')^{1/2} \approx r(1 - \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}), \tag{6.98}$$

imamo

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{ikr}e^{-ik_0\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r}}}{r}\, e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}'}\,(1 + \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2})\,U(\vec{r}')\,d^3r' \tag{6.99}$$

Vodeći član u poslednjem izrazu je

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{i(\vec{k}_0 - k_0\frac{\vec{r}}{r})\cdot\vec{r}'}\,U(\vec{r}')\,d^3r', \tag{6.100}$$

odnosno, ukupna talasna funkcija data je sa

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r}\,f(\theta,\varphi). \tag{6.101}$$

Inicijalni ravan talas $e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}}$ rasejava se, ukoliko je potencijal lokalizovan, približno kao sferni odnosno izlazni sferni talas. Amplituda rasejanja $f(\theta,\varphi)$ zavisi samo od pravca rasejanja $\frac{\vec{r}}{r}$ odnosno uglova rasejanja θ, φ:

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\,U(\vec{r}')e^{i\vec{r}'\cdot(\vec{k}_0 - \vec{k})}, \tag{6.102}$$

gde smo sa $\vec{k} = k_0\frac{\vec{r}}{r}$ označili talasni vektor koji ima pravac radijusa $\vec{r}$ a $k^2 = k_0^2$. Ovo se naziva *Born-ova aproksimacija*: amplituda rasejanja proporcionalna je Fourier-komponentama potencijala. Često se za razliku brzijna upadnog i rasejanog talasa uvodi oznaka $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_0$. Kako je $k^2 = k_0^2$, imamo da je $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$, gde je θ ugao izmedju vektora $\vec{k}$ i $\vec{k}_0$ – ugao rasejanja. Analizom uslova pod kojima je dobijena formula (6.102) može da se vidi da je Born-ova aproksimacija primenljiva na slabe potencijale, $V \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$, i na brze upadne snopove, $V \ll \frac{\hbar^2 k}{ma}$.

Amplituda rasejanja $f(\theta,\varphi)$ iz (6.102) odredjuje diferencijalni presek rasejanja. Diferencijalni presek definiše se kao

$$d\sigma = \frac{dN}{nN_c} \tag{6.103}$$

gde je dN broj čestica koje se raseju u prostorni ugao $d\Omega$ u jedinici vremena, N_c (=1 u našem slučaju) broj centara rasejanja a n gustina upadnog snopa. Gustina upadnog snopa je gustina struje in-stanja $\psi^{(0)}$

$$n = j_{in} = \frac{\hbar k_0}{m}, \tag{6.104}$$

dok je broj čestica koje se raseju u prostorni ugao $d\Omega$,

$$dN = j_{out} r^2 d\Omega. \tag{6.105}$$

Gustina out-stanja $\psi^{(1)}$ data je sa

$$j_{out} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^{(1)*}\nabla\psi^{(1)} - \psi^{(1)}\nabla\psi^{(1)*}). \tag{6.106}$$

Nas zanima radijalna komponenta ove struje. Imamo

$$\nabla\psi^{(1)}|_r = \frac{\partial}{\partial r}\psi^{(1)} f(\theta,\varphi)e^{ik_0 r}(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}) \approx ikf\frac{e^{ik_0 r}}{r} \tag{6.107}$$

za velika rastojanja p. Prema tome,

$$j_{out}|_r = \frac{\hbar k_0}{m}\frac{|f|^2}{r^2}. \tag{6.108}$$

Diferencijalni efikasni presek dat je sa

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2. \tag{6.109}$$

Primenimo sada dobijenu formulu (6.102) na neke specijalne slučajeve. Ako imamo upadni snop male brzine, $ka \ll 1$, koji se rasejava na sfernosimetričnom potencijalu, za amplitudu rasejanja dobijamo

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}V(r)d^3r \approx -\frac{2m}{\hbar^2}\int V(r)r^2 dr \tag{6.110}$$

pošto je, za $qa \ll 1$ takodje i $\vec{q}\cdot\vec{r} \approx 0$, tj $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \approx 1$. Rasejanje je izotropno. Ako pak imamo upadni snop velike brzine, $ka \gg 1$, u podintegralnoj funkciji (6.110) član $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \cos\vec{q}\cdot\vec{r} + i\sin\vec{q}\cdot\vec{r}$ veoma brzo osciluje tj. ima period koji je mnogo manji od karakterističnog rastojanja promene funkcije $V(\vec{r})$. Zato je rezultat koji se dobija integracijom približno nula jer se pozitivni i negativni doprinosi u integralu potiru – uvek osim u oblasti $\vec{q}\cdot\vec{r} \approx 0$, tj. u $\theta \approx 0$. Brzi snopovi se rasejavaju unapred a (ugaono) širenje snopa je malo.

kao poslednji primer izračunaćemo šta Born-ova aproksimacija daje za efikasni presek rasejanja u Coulomb-ovom potencijalu tj. za rasejanje elektrona na jezgrima atoma. Da bismo "regularizovali" integral za elektrostatički potencijal jezgra uzećemo Yukawa-in potencijal

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}e^{-\alpha r} \tag{6.111}$$

u limesu $\alpha \to 0$. Amplituda rasejanja je

$$f = \frac{mZe^2}{2\pi\hbar^2}\int\frac{e^{-\alpha r}}{r}e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}d^3r = \frac{2mZe^2}{\hbar^2}\frac{1}{q^2+\alpha^2}. \tag{6.112}$$

U limesu $\alpha \to 0$ za efikasni presek se dobija

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{m^2 Z^2 e^4}{4k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}, \tag{6.113}$$

Rutherford-ova formula, tj. rezultat jednak klasičnom rezultatu. Ovo potpuno poklapanje je posledica aproksimacija uvedenih Born-ovom aproksimacijom tj. na neki način je slučajno. Sa druge strane ono predstavlja srećnu istorijsku okolnostjer su Rutherford-ovi eksperimenti i njihova pravilna interpretacija u velikoj meri doprineli poznavanju struktute materije ali i razvoju kvantne mehanike.

6.4.1 Metod parcijalnih talasa

U slučaju kada se čestica rasejava na centralnom potencijalu, rezultati koji se dobijaju u teoriji rasejanja mogu da budu mnogo detaljniji. Osim energije tada se održava i moment impulsa, pa asimptotski ($U(r) = 0$), slobodnu česticu možemo, umesto kvantnim brojem impulsa $\vec{k}$, možemo da opisujemo skupom kvantnih brojeva k (za energiju), l i m.

Da bismo videli osobine svojstvenih stanja kontinualnog spektra čestice koja se kreće u centralnom ptencijalu, vratimo se na rešavanje radijalnog dela Schrödinger-ove jednačine za $E > 0$. Da ponovimo: Schrödinger-ova jednačina

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(r)\psi = E\psi \tag{6.114}$$

može se rešiti razdvajanjem promenljivih,

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_l^m(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{6.115}$$

gde radijalna funkcija $u = u_{E,l}(r)$ zavisi od vrednosti energije E i kvadrata momenta impulsa L^2. Jednačina za u je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \left(U + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)u = Eu. \tag{6.116}$$

Rešavaćemo uvu jednačinu za $U = 0$: ova rešenja su relevantna u asimptotskoj oblasti za proizvoljni potencijal. Jednačina

$$u'' + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u = 0 \tag{6.117}$$

za $E > 0$ ima u asimptotskoj oblasti $r \to \infty$ rešenja e^{ikr}, e^{-ikr}, odnosno ceo radijalni deo je

$$R \sim \frac{e^{\pm ikr}}{r}, \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{6.118}$$

indeks k je kontinualan. Ovo su izlazni i ulazni sferni talasi. Regularno rešenje, koje ima konačne vrednosti talasne funkcije u svim tačkama pa i $r = 0$ se asimptotski ponaša kao

$$R \sim \frac{\sin kr}{r} \tag{6.119}$$

i predstavlja stojeći talas. Kao i za vezana stanja, u okolini $r = 0$ rešenja se ponašaju kao

$$u \sim r^{l+1}, \qquad R \sim r^l. \tag{6.120}$$

Rešenje radijalne jednačine dato je preko Bessel-ovih (cilindričnih) funkcija. Ako uvedemo smenu nezavisne promenljive $x = kr$ radijalna jednačina postaje

$$x^2 u'' + (x^2 - l(l+1))u = 0 \tag{6.121}$$

i vidi se da su njena rešenja $u = xj_l$, $u = xn_l$. Opšte rešenje radijalne jednačine je

$$R_{k,l} = \frac{u_{k,l}(r)}{r} = B_l j_l(kr) + C_l n_l(kr). \tag{6.122}$$

Radijalne funkcike $u_{k,l}$ su normirane:

$$\int_0^\infty u_{k,l}\, u_{k',l}\, dr = \frac{\pi}{2k^2}\,\delta(k-k'). \tag{6.123}$$

U asimptotskoj oblasti ovo rešenje se ponaša kao

$$\frac{u_{k,l}(r)}{r} \sim B_l \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} - C_l \frac{\cos(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} = \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr} \tag{6.124}$$

ako su konstante normirane, $B_l^2 + C_l^2 = 1$ i uvedemo fazne pomake δ_l, $B_l = \cos\delta_l$.

Sad kada smo razjasnili bazis i osnovne osobine rešenja kontinualnog spektra, vratimo se na problem rasejanja. Opšte rešenje Schrödinger-ove jednačine fiksirane energije E za slobodnu česticu, izraženo preko sfernih harmonika, glasi

$$\psi = \sum_{l,m} A_{l,m}\, R_{k,l}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{6.125}$$

Pojedinačna rešenja sa odredjenim momentom impulsa zovu se *parcijalni talasi.* I ovog oblika će biti i svako rešenje jednačine ako je potencijal lokalizovan, u asimptotskoj oblasti $r \to \infty$. Sa druge strane, iz opštih razmatranja već smo videli da, ako je upadni talas ravan, usmeren duž z-ose,

$$\psi_{in} = e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} = e^{ikz}, \tag{6.126}$$

ukupno rešenje imaće oblik

$$\psi = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta). \tag{6.127}$$

U poslednoj jednačini, zbor sferne simetrije potencijala i ukupne radijalne simetrije problema amplituda rasejanja ne zavisi od azimutalnog ugla φ; slično tome, u jednačini (6.125) ne treba u stvari da sumiramo po svim sfernim harmonicima nego samo po onima koji ne zavise od φ. Zato nam trebaju samo rešenja

$$\psi = \sum_l a_l \, R_{k,l}(r) P_l(\cos\theta), \tag{6.128}$$

P_l su Legendre-ovi polinomi. Asimptotski za $r \to \infty$ ovo rešenje se ponaša kao

$$\psi = \sum_l a_l \, \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr} \, P_l(\cos\theta) = \sum_l a_l \, \frac{(-i)^l}{2ikr} \left(e^{ikr + i\delta_l} - e^{-ikr - i\delta_l} \right) P_l(\cos\theta). \tag{6.129}$$

Da bismo uporedili formule (6.126) i (6.129) i odredili koeficijente u razvoju, a_l, treba da upadni ravan talas e^{ikz} razvijemo po Legendre-ovim polinomima. Važi

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) \sim \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \, \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} \, P_l(\cos\theta). \tag{6.130}$$

Izjednačavanjem članova uz ulazni, konvergentni talas e^{-ikr} dobijamo

$$a_l = i^l (2l+1) e^{i\delta_l}. \tag{6.131}$$

Sa druge strane, uporedjivanjem člavova uz e^{ikr} dobijamo amplitudu rasejanja:

$$kf(\theta) = \sum \frac{1}{2i} (2l+1)(S_l - 1) P_l(\cos\theta), \textbf{??} \tag{6.132}$$

gde je $S_l = e^{2i\delta_l}$, odnosno

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l \, P_l(\cos\theta). \tag{6.133}$$

Iz oblika (**??**) formule za rasejanje vidimo da se pri rasejanju na lokalizovanom centru ulazni parcijalni talasi ne menjaju, dok svaki izlazni parcijalni talas ima *fazni pomak* δ_l. Fazni pomaci i karakterišu rasejanje ravnog talasa na sferno-simetričnom potencijalu i mogu se izračunati iz formule (6.110) za amplitudu rasejanja, tačno ili u nekoj aproksimaciji.

Sada ćemo izvesti nekoliko najjednostavnijih posledica izraza (6.133) iz kojih se vidi smisao faznih pomaka. Diferencijalni presek rasejanja dat je sa $\sigma(\theta 0 = |f(\theta)|^2$, a totalni presek sa

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma(\theta) \sin(\theta) d\theta. \tag{6.134}$$

Koristeći ortogonalnost Legendre-ovih polinoma

$$\int_0^\pi P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\sin(\theta)d\theta = \frac{2}{2l+1}\,\delta_{ll'}, \tag{6.135}$$

za ukupni presek dobijamo

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{6.136}$$

Pojedini sabirci u poslednjem izrazu zovu se parcijalne širine rasejanja. Osim toga, uporedjujući (6.136) sa $f(0)$ iz (6.133), dobijamo *optičku teoremu*:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}f(0) \tag{6.137}$$

jer je $P_l(1) = 1$. Ova teorema je veoma značajna i važi i u slučaju opštijem od ovog za koji smo je izveli.

Kao što smo rekli, fazni pomaci zavise od oblika potencijala $U(r)$. Može se dobiti da je

$$\tan\delta_l \approx -k\int_0^\infty j_l^2(kr)U(r)r^2dr. \tag{6.138}$$

Za velike vrednosti ugaonog momenta, $l \gg ka$ i male energije tj. malo k

$$\tan\delta_l \approx -\frac{2^{2l}(l!)^2}{((2l+1)!)^2}\,k^{2l+1}\int_0^\infty U(r)r^{2l+2}dr. \tag{6.139}$$

Znači, pri malim energijama, pošto je $\delta_l \sim k^{2l+1}$, doprinos preseku rasejanja daju samo parcijalni talasi sa malim ugaonim momentima, $l \leq ka$. Ovo je i u skladu sa klasičnom slikom rasejanja: klasično, vrednost momenta impulsa je $|\vec{L}| = |\vec{p}|b$, gde je b parametar sudara a $p = \hbar k$. Za velike vrednosti l odnosno parametra sudara b pri rasejanju na lokalizovanom potencijalu trajektorija upadne čestice se ne menja mnogo – nema skretanja.

Metod parcijalnih talasa je dobar za niske energije, a Born-ova aproksimacija za visoke – komplementarni su.

6.4.2 Rezonance

Jedna od karakterističnih pojava pri rasejanju je pojava dugoživećih stanja ili kvazidiskretnih nivoa energije – rezonanci. Ova pojava posebno je interesantna kad razmatramo sudare više čestica: tada rezonanca predstavlja kvazi-vezano stanje sistema, ili novu česticu koja ima relativno dug period poluraspada. Pojam rezonanci već smo razmatrali pri rasejanju u jednoj dimenziji. Po Interesantno je da se opiše diferencijalni presek u slučaju rezonanci. On ima karakterističnu formu, tj. rezonance se karakterišu pikovima u diferencijalnom preseku va odredjene vrednosti energije, a šitina pika na polovini visine može se, kao što smo videli kod vremenski zavisne perturbacije, povezati sa poluvremenom života rezonance. Oblik linije opisan je Breit-Wigner-ovom formulom, i mi ćemo je izvesti u jednostavnom modelu, koji opisuje rasejanje na sferno-simetričnom potencijalu oblika δ-funkcije. Breit-Wigner-ova formula može se, i opštijem slučaju, dobiti na druge načine: razmatrajući rasejanje u WKB aproksimaciji, ili tretiranjem energije E kao kompleksne promenljive i analitičkim produženjem.

Znači, želimo da odredimo pacijalnu amplitudu δ_0 za rasejanje s-talasa u potencijalu

$$U(r) = \alpha\delta(r-a). \tag{6.140}$$

Ovo je sferna potencijalna jama oblika δ-funkcije, i van $r = a$ svojstvena stanja su rešenja slobodne Schrödinger-ove jednačine a spektar energije je kontinualan. Razmatraćemo slučaj $\alpha a \gg \hbar^2 m$.

Dakle, gledamo s-stanja odnosno $l = 0$,

$$\psi = \frac{u}{r} Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{u}{r} \tag{6.141}$$

Funkcija $u(r)$ je rešenje jednačine

$$-u'' + \frac{2m}{\hbar^2} \alpha\delta(r-a)u = \frac{2mE}{\hbar^2} u, \tag{6.142}$$

odnosno

$$u'' + k^2 u = \tilde{\alpha}\delta(r-a)\, u \tag{6.143}$$

gde smo uveli $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\tilde{\alpha} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}$ Rešenja po u su, i za $r < a$ i za $r > a$ linearna kombinacija ravnih talasa, samo treba da se u tački a nametnu uslovi neprekidnosti:

$$\Delta u(a) = u(a+\epsilon) - u(a-\epsilon) = 0, \qquad \Delta u'(a) = \tilde{\alpha} u(a). \tag{6.144}$$

Stacionarna rešenja pišemo u obliku koji smo koristili u teoriji rasejanja:

$$\frac{u(r)}{r} = \begin{cases} \dfrac{A}{r} \sin kr, & r < a \\ \dfrac{1}{r} (S_0 e^{ikr} - e^{-ikr}), & r > a \end{cases} . \tag{6.145}$$

Iz uslova neprekidnosti dobijamo

$$A = \frac{S_0 e^{ika} - e^{-ika}}{\sin ka} \tag{6.146}$$

i dalje,

$$S_0 = e^{-2ika}\, \frac{\tilde{\alpha} a \sin ka + ka \cos ka + ika \sin ka}{\tilde{\alpha} a \sin ka + ka \cos ka - ika \sin ka} \tag{6.147}$$

razmatraćemo slučaj jake veze, $\tilde{\alpha}a \gg 1$, i malih brzina odnosno energija, $\tilde{\alpha}a \gg ka$. U tom slučaju razlomak u izrazu za S_0 teži jedinici, pa dobijamo

$$S_0 = e^{-2ika}, \qquad \delta_0 = -ka, \tag{6.148}$$

izraze koji su isti kao za rasejanje na nepropustljivoj sferi poluprečnika a. Izuzetak je oblast energije u kojoj je $\sin ka \approx 0$ odnosno $ka = n\pi + \gamma$. U ovom slučaju u oblasti $r < a$ kao da imamo stojeći talas, a odgovarajuće vrednosti k iste su kao vrednosti talasnog vektora u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami. Takvo stanje je dugoživeće, odnosno rezonanca.

Razmatramo vrednosti energije u okolini rezonance, tj. pretpostavljajući da je parametar $\gamma = ka - n\pi$ mali. Tada je

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}\,(1 + \frac{2\gamma}{n\pi}), \tag{6.149}$$

a zavisnost S_0 i parcijalne širine od energije možemo da odredimo "prateći" γ u razvoju S_0 do prvog reda. Imamo

$$\tilde{\alpha}a \sin ka + ka \cos ka \approx (-1)^n\,(\tilde{\alpha}a\gamma + n\pi + \gamma) \tag{6.150}$$

$$= (-1)^n \tilde{\alpha}a \frac{n\pi}{2}\left(1 + \frac{2\gamma}{n\pi} - 1 + \frac{2}{\tilde{\alpha}a}\right) \tag{6.151}$$

$$= (-1)^n \tilde{\alpha}a \frac{ma^2}{\hbar^2 n\pi}\left(E - \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2ma^2}\,(1 - \frac{2}{\tilde{\alpha}a})\right). \tag{6.152}$$

Vidimo da ovde u stvari imamo dva mala parametra u razvoju, γ i ranije uvedeni $\frac{\tilde{\alpha}a}{ka} = \frac{\tilde{\alpha}a}{n\pi}$. Označićemo

$$E_{n,0} = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2ma^2}\,(1 - \frac{2}{\tilde{\alpha}a}). \tag{6.153}$$

Sa druge strane, imaginarni deo u razlomku je

$$ka \sin ka \approx (-1)^n n\pi\gamma = (-1)^n \tilde{\alpha}a \frac{ma^2}{\hbar^2 n\pi}\,\frac{\Gamma_n}{2} \tag{6.154}$$

gde je

$$\Gamma_n = \frac{2\hbar^2 n^2\pi^2}{ma^2}\,\frac{\gamma}{\tilde{\alpha}a} \sim \frac{2\hbar^2 n^2\pi^2}{ma^2}\,\frac{n\Pi}{(\tilde{\alpha}a)^2} \tag{6.155}$$

ako uzmemo da su γ i $\frac{n\pi}{\tilde{\alpha}a}$ istog reda veličine. Tada je izraz za S_0 dat Breit-Wigner-ovom formulom

$$S_0 = e^{-2ika}\,\frac{E - E_{n,0} - \frac{1}{2}\Gamma_n}{E - E_{n,0} + \frac{1}{2}\Gamma_n} \tag{6.156}$$

odnosno, parcijalni presek rasejanja je

$$\sigma_0 = 4\pi\,\frac{|S_0 - 1|^2}{4k^2} = \frac{\pi a^2}{n^2\pi^2}\,\frac{\Gamma_n^2}{(E - E_{n,0})^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}}. \tag{6.157}$$

6.5 Dodatak:Bessel-ove funkcije

Bessel-ove funkcije su rešenja jednačine

$$x^2u'' + xy' + (x^2 - \alpha^2)y = 0 \tag{6.158}$$

α može biti proizvoljan kompleksan broj. Linearno nezavisna rešenja su Bessel-obe funkcije J_α, Neimann-ove funkcije H_α, H ankel-ove funkcije $H_\alpha = J_\alpha + iN_\alpha$ itd.

U slučaju kad je parametar $\alpha = l + \frac{1}{2}$, uvodjenjem smene $y(x) = \sqrt{x}\, j(x)$ Bessel-ova jednačina postaje

$$x^2j'' + 2xj' + (x^2 - l(l+1))j = 0, \tag{6.159}$$

i njena rešenja su sferne Bessel-ove funkcije

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x), \qquad n_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{l+\frac{1}{2}}(x). \tag{6.160}$$

Sferne Bessel-ove funkcije su elementarne funkcije:

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}, \qquad n_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\cos x}{x}. \tag{6.161}$$

Asimptotske vrednosti:

$$\begin{aligned} x \to 0: &\qquad j_l(x) \sim x^l, &\qquad n_l(x) \sim x^l \\ x \to \infty: &\qquad j_l(x) \sim \tfrac{1}{x}\sin(x - \tfrac{l\pi}{2}), &\qquad n_l(x) \sim -\tfrac{1}{x}\cos(x - \tfrac{l\pi}{2}) \end{aligned} \tag{6.162}$$

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \qquad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}. \tag{6.163}$$