

0.1 PREDGOVOR

Kvantna mehanika nije nastala ni brzo ni lako, ili kako 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 iskristališe: 1925. otkrivena je matricna mehanika (Heisenberg), 1926. Schrödinger-ova jednačina a 1928. njen relativistički analog, Dirac-ova 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 1925².

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 od njegovih elemenata 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, moment impulsa i tako dalje. Ideja da su stanja sistema vektori u apstraktnom linearnom prostoru stanja je srž kvantovanja, i njen prirodan deo je novi, kvantnomehanički opis prostornih i drugih simetrija fizičkih 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 važni eksperimenti i izvođenja treba da se vide i ‘prodju’da bi se usvojili, nego i to što je stu-

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

²R. 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.

dentima osim znanja matematičkog formalizma potrebno da razumeju zašto je on neophodan. A možda pre svega, da se na njega naviknu.

U prvoj glavi knjige dat je istorijski uvod u predmet: pregled važnih eksperimenata kao i evolucija teorijskog razmišljanja koje je dovelo do matematičke formulacije ideje kvantovanja. U drugoj glavi, koja služi da se izgradi intuicija i upoznaju osnovni kvantni fenomeni, opisani su najjednostavniji sistemi u jednoj i dve dimenzije. Između opisa jednodimenzionih i višedimenzionih sistema koji je dat u četvrtoj glavi, napravljen je intermeco: treća glava u kojoj se detaljnije govori o formalizmu. Približne metode kvantne mehanike date su u petoj glavi. Naravno, ovakva podela teksta ima i svoju metodološku stranu. U tekstu ima delova koji odstupaju od obima i nivoa izlaganja predviđenih kursom: ta poglavlja označena su zvezdicama i mogu da se preskoče. Na kraju svake glave dati su zadaci.

Ovaj udžbenik je nastao na osnovu kurseva kvantne mehanike koji su držani studentima nastavnog smera i astrofizike, i studentima istraživačkog smera Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu. Zamisao je bila da napravimo tekst koji je komplementaran udžbeniku profesora Fedora Herbuta *Kvantna mehanika za istraživače*, pre svega po induktivnom pristupu i nešto 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 kvantnu mehaniku i modernu fiziku uopšte, i svakako je preporučujemo za čitanje. Od drugih udžbenika, za kurs ovog ili nešto većeg obima i višeg nivoa, studentima preporučujemo sledeće knjige:
S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge UP, 2013.
P.J.E. Peebles, *Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1992.
J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1994.
E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, 1970.
A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland 1967, i naravno
L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Addison-Wesley, 1958.

SADRŽAJ

0.1	PREDGOVOR	1
1	UVERTIRA: ISTORIJSKI UVOD	7
1.1	JEDNAČINE KLASIČNE MEHANIKE	7
1.2	BOLTZMANN-OVA RASPODELA	11
1.3	ELEKTROMAGNETNO POLJE	13
1.4	INTERFERENCIJA	16
1.5	ZRAČENJE CRNOG TELA	18
1.6	FOTOEFEKT	21
1.7	COMPTON-OV EFEKT	22
1.8	LINIJSKI SPEKTRI I MODEL ATOMA	24
1.9	TALASNO-ČESTIČNI DUALIZAM	28
1.10	SCHRÖDINGER-OVA JEDNAČINA	29
1.11	ZADACI	30
2	JEDNODIMENZIONNI SISTEMI	31
2.1	HARMONIJSKI OSCILATOR	31
2.2	STACIONARNA SCHRÖDINGER-OVA JEDNAČINA	35
2.3	JEDNAČINA KONTINUITETA	37
2.4	SLOBODNA ČESTICA	39
2.5	EVOLUCIJA GAUSS-OVOG PAKETA	41
2.6	PROLAZ KROZ POTENCIJALNU BARIJERU	46
2.7	POTENCIJALNE JAME	50
2.8	OSOBINE JEDNODIMENZIONNIH SISTEMA	55
2.9	KRONIG-PENNEY-JEV MODEL	58
2.10	WKB APROKSIMACIJA	60
2.11	DODATAK	63
2.11.1	FROBENIUS-OV METOD	63
2.11.2	HERMITÉ-OVI POLINOMI	64
2.11.3	FOURIER-OVA TRANSFORMACIJA	65
2.11.4	POISSON-OVI INTEGRALI I GAMA-FUNKCIJA	66
2.12	ZADACI	66

3	INTERMECO: MATEMATIČKI FORMALIZAM	67
3.1	KINEMATIKA KVANTNE MEHANIKE	70
3.2	OPSERVABLE I MERENJA	75
3.3	★ HILBERT-OV PROSTOR	81
3.4	★ MATRICA GUSTINE	85
3.5	RELACIJE NEODREDJENOSTI	87
3.6	OPERATORI KOORDINATE I IMPULSA	88
3.7	★ KANONSKO KVANTOVANJE	92
3.8	DINAMIKA KVANTNE MEHANIKE	96
3.9	★ SCHRÖDINGER-OVA I HEISENBERG-OVA SLIKA	98
3.10	OPERATORI KREACIJE I ANIHILACIJE	100
3.11	ZADACI	103
4	TRODIMENZIONNI SISTEMI	105
4.1	ORBITNI UGAONI MOMENT	105
4.2	ČESTICA U SFERNO-SIMETRIČNOM POTENCIJALU	110
4.3	ATOM VODONIKA	111
4.4	ČESTICA U ELEKTROMAGNETNOM POLJU	115
4.5	★ LANDAU-OV PROBLEM	117
4.6	DODATAK	119
	4.6.1 NABLA U SFERNIM I CILINDRIČNIM KOORDINATAMA	119
	4.6.2 SFERNI HARMONICI	120
4.7	ZADACI	120
5	SIMETRIJE	121
5.1	SIMETRIJE I ZAKONI ODRŽANJA	122
5.2	PROSTORNE TRANSFORMACIJE	125
5.3	SIMETRIJE U KVANTNOJ MEHANICI	127
5.4	UGAONI MOMENT	133
5.5	SPIN 1/2	135
5.6	★ PROSTOR STANJA ELEKTRONA	139
5.7	SABIRANJE UGAONIH MOMENATA	140
5.8	★ IZOSPIN	146
5.9	★ SO(4) I SIMETRIJE H-ATOMA	152
5.10	IDENTIČNE ČESTICE	154
5.11	DODATAK	161
	5.11.1 TEORIJA GRUPA	161
	5.11.2 CARTAN-WEYL-OV BAZIS	162
5.12	ZADACI	162
6	KOVARIJANTNOST	165
6.1	GALILEI-JEVE TRANSFORMACIJE	166
6.2	FAZNE TRANSFORMACIJE	168
6.3	EFEKAT AHARONOVA I BOHM-A	170

6.4	ZADACI	173
7	PRIBLIŽNE METODE	175
7.1	STACIONARNA TEORIJA PERTURBACIJA	175
7.2	VARIJACIONI METOD	182
7.3	VREMENSKI ZAVISNA PERTURBACIJA	188
7.4	PERIODIČNA PERTURBACIJA	192
7.5	SPEKTRI ATOMA	194
8	TEORIJA RASEJANJA	197
8.1	BORN-OVA APROKSIMACIJA	200
8.2	METOD PARCIJALNIH TALASA	206
8.3	REZONANCE	212
8.4	DODATAK: BESSEL-OVE FUNKCIJE	214
8.5	ZADACI	216

GLAVA 1

UVERTIRA: ISTORIJSKI UVOD

Nauka koje je obeležila dvadeseti vek bez sumnje je fizika, a najvažnija otkrića fizike u prvoj polovini dvadesetog veka su kvantna mehanika i teorija relativnosti. Dolazak obe teorije najavljen je krajem devetnaestog 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 odredio domen važenja klasične mehanike, i ove granice karakterišu dve skale: brzina svetlosti, $c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$ i Planck-ova konstanta, $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$. Pomenuli smo 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 (kvantnom, relativističkom) opisu paradoksa nema. Stvar je u tome da se naša intuicija o kretanju tela, bazirana na svakodnevnom ljudskom iskustvu, ne može proizvoljno ekstrapolisati na druge uslove, odnosno 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 čestica¹, 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 nekoliko interagujućih čestica. Ako imamo sistem materijalnih tačaka prebrojanih indeksom i , $i = 1, 2, \dots, N$, njegovo stanje je u klasičnoj mehanici zadato položajima svih čestica \vec{r}_i i njihovim brzinama $\vec{v}_i = \dot{\vec{r}}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt}$. Promena stanja sistema odnosno njegovo kretanje opisuje se drugim Newton-ovim

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

zakonom

$$m_i \vec{a}_i = \sum_j \vec{F}_{ij}, \quad (1.1)$$

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 . Sile interakcije najčešće zavise samo od međjusobnog rastojanja,

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

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

U Lagrange-evoj mehanici kretanje se, umesto vektorima položaja čestica \vec{r}_i i njihovim brzinama \vec{v}_i , opisuje generalisanim koordinatama q_i i brzinama \dot{q}_i (sada $i = 1, 2, \dots, 3N$). U jednostavnom slučaju kada su sile potencijalne, ekvivalentan zapis Newton-ovog zakona kretanja su Lagrange-eve jednačine

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (1.3)$$

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

$$S = \int dt L \quad (1.4)$$

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

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (1.5)$$

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

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

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

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}_{PZ}. \quad (1.7)$$

U poslednjoj formuli $\{A, B\}_{PZ}$ označava Poisson-ovu zagradu funkcija $A(q_i, p_i, t)$ i $B(q_i, p_i, t)$ i definiše se kao

$$\{A, B\}_{PZ} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right). \quad (1.8)$$

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

$$\{q_i, p_j\}_{PZ} = \delta_{ij}. \quad (1.9)$$

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 kretanja najprirodnije rešavati u sfernim koordinatama (r, θ, φ) : $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$. Lagranžijan zapisan u sfernim koordinatama je

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

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 su

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

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

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

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

$$mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} = 0, \quad (1.14)$$

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

$$p_\theta = mr^2 \frac{d\theta}{dt} = L = \text{const}. \quad (1.15)$$

U stvari zbog sferne simetrije vektor momenta impulsa \vec{L} je konstantan što odgovara održanju para generalisanih impulsa p_φ i p_θ : normala na ravan $\varphi = \text{const}$ daje pravac vektora \vec{L} a p_θ njegovu apsolutnu vrednost L . Zato 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

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - U(r)) - \frac{L^2}{m^2 r^2}}. \quad (1.16)$$

Rešenje poslednje jednačine daje implicitnu zavisnost položaja od vremena, funkciju $t(r)$:

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

Treba zapaziti da je rešenje (1.17) identično rešenju za kretanje jednodimenzione čestice u efektivnom potencijalu

$$U_{eff}(r) = U(r) + \frac{L^2}{2mr^2}. \quad (1.18)$$

Zato se član $L^2/2mr^2$ koji potiče od momenta impulsa zove centrifugalna energija ili centrifugalna barijera; ovaj član za $L \neq 0$ '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

$$\frac{d\theta}{dr} = \frac{\frac{L}{mr^2}}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - U_{eff}(r))}}. \quad (1.19)$$

Integrali (1.17) i (1.19) mogu da se izraze preko elementarnih funkcija u najvažnijem slučaju Newton-ovog gravitacionog odnosno Coulomb-ovog elektrostatičkog potencijala

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}. \quad (1.20)$$

Uvodjenjem smene

$$u = \frac{L}{mr} - \frac{\alpha}{L} \quad (1.21)$$

integral (1.19) se svodi na tablični integral pa dobijamo

$$\theta = -\arcsin \frac{\frac{L^2}{m\alpha r} - 1}{\sqrt{\frac{2EL^2}{m\alpha^2} + 1}} + \text{const} = -\arcsin \left(\frac{p}{er} - \frac{1}{e} \right) + \text{const}. \quad (1.22)$$

Fiksiranjem integracionih konstanti dobija se jednačina trajektorije

$$\frac{pe}{r} = 1 + e \cos \theta, \quad (1.23)$$

a konstante p i e , parametar orbite i ekscentricitet, su iz (1.22),

$$p = \frac{L^2}{m\alpha}, \quad e = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{m\alpha^2}}. \quad (1.24)$$

Ove trajektorije, rešenja Kepler-ovog problema su konusni preseki, i daju putanje tela pri kretanju u gravitacionom polju Sunca. Kretanje je finitno odnosno tela ostaju vezana u Sunčevoj orbiti ako je njihova energija $E < 0$ tj. $e < 1$. Tada su orbite kružne odnosno eliptične, minimalno i maksimalno rastojanje od centra potencijala su

$$r_{min} = \frac{p}{1+e}, \quad r_{max} = \frac{p}{1-e}. \quad (1.25)$$

Ako je $E \geq 0$ putanje su parabole ($E = 0$, $e = 1$) ili hiperbole ($E > 0$, $e > 1$) a kretanje je infinitno, pa u (1.25) imamo samo minimalno rastojanje.

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. Linearost je osobina koju će jednačine kvantne mehanike imati.

1.2 BOLTZMANN-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 odnosno početne položaje i brzine 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 međusobno slabo interaguju, i da merimo neku fizičku opservablu, na primer 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

$$\rho_i = \rho(E_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N}. \quad (1.26)$$

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 događaja. U najopštijem slučaju u materijalnim sistemima funkcija raspodele zavisi od položaja i impulsa svih čestica.

Verovatnoće u (1.26) 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 $\rho(E)$:

$$dP(E) = \rho(E)dE. \quad (1.27)$$

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

$$\sum_i \rho_i = 1, \quad \int \rho(E)dE = 1, \quad (1.28)$$

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

$$Z = \sum_k \rho_k, \quad \text{ili} \quad Z = \int \rho(E)dE. \quad (1.29)$$

Ako imamo raspodelu verovatnoće možemo da izračunamo srednju ili očekivanu vrednost fizičke veličine pri merenju, npr. u našem slučaju

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i E_i \rho_i}{\sum_i \rho_i}, \quad (1.30)$$

ali i proizvoljnih funkcija ove opservable, na primer stepena,

$$\langle E^n \rangle = \frac{\sum_i (E_i)^n \rho_i}{\sum_i \rho_i}. \quad (1.31)$$

Neodređenost odnosno odstupanje od srednje vrednosti pri merenju neke fizičke veličine kvantifikuje se disperzijom Δ koja se definiše kao

$$(\Delta(E))^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2. \quad (1.32)$$

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

$$E = E_1 + E_2. \quad (1.33)$$

Sa druge strane, pošto podsistemi ne interaguju, gustina verovatnoće da prvi ima energiju E_1 a drugi E_2 je proizvod verovatnoća (pretpostavljamo da je sistem homogen, tj. da su i podsistemi opisani istom raspodelom ρ):

$$\rho(E) = \rho(E_1 + E_2) = \rho(E_1)\rho(E_2), \quad (1.34)$$

jer su događaji nezavisni. Jednakost (1.34) je u stvari jednačina za $\rho(E)$ a njeno rešenje je eksponencijalna funkcija,

$$\rho(E) = e^{-\beta E} \quad (1.35)$$

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

1.3 ELEKTROMAGNETNO POLJE

Osim materijalne tačke i krutog tela klasična mehanika opisuje i drugu vrstu fizičkih sistema: polja. Fizičko polje zadato je vrednostima određene fizičke veličine u svim tačkama prostora (ili u delu prostora) i u svim trenucima vremena, a karakteristični primeri polja su polje temperature, polje brzine tečnosti, 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 zapravo jedino od fundamentalnih polja od značaja u domenu rastojanja i energija koji su relevantni za kvantnu mehaniku². Elektromagnetno polje zadato je vrednostima električnog polja $\vec{E}(\vec{r}, t)$ i magnetnog polja $\vec{B}(\vec{r}, t)$, a njegove jednačine kretanja u vakuumu odnosno dinamičke jednačine su Maxwell-ove jednačine³:

$$\text{div } \vec{E} = 4\pi\rho \quad (1.36)$$

$$\text{div } \vec{B} = 0 \quad (1.37)$$

²Preciznije: jedino polje čije efekte kvantna mehanika na konceptualno zaokružen način može da opiše. Ipak, mnogi važni fenomeni vezani za nuklearne interakcije efektivno se, kvalitativno i kvantitativno, opisuju kvantnom mehanikom.

³Kao što je to dosta uobičajeno u kvantnoj mehanici i atomskoj fizici, Maxwell-ove jednačine pišemo u Gauss-ovom sistemu jedinica.

$$\operatorname{rot} \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (1.38)$$

$$\operatorname{rot} \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad (1.39)$$

gde je $\rho(\vec{r}, t)$ gustina naelektrisanja a $\vec{j}(\vec{r}, t)$ gustina električne struje. Jednačine (1.36) i (1.39) su izvorne jednačine jer opisuju kako promena elektromagnetnog polja zavisi od njegovih izvora, naelektrisanja i struje. Druge dve jednačine, (1.37) i (1.38), su bezizvorne jednačine i mogu se rešiti uvođenjem skalarnog i vektorskog potencijala $\Phi(\vec{r}, t)$ i $\vec{A}(\vec{r}, t)$:

$$\vec{E} = -\operatorname{grad} \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}. \quad (1.40)$$

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

$$\Phi' = \Phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A}' = \vec{A} - c \operatorname{grad} \chi, \quad (1.41)$$

za proizvoljnu funkciju $\chi(\vec{r}, t)$. Ovakve transformacije potencijala nazivaju se gradijentne ('gauge') transformacije, i pošto ne menjaju fizički opservabilno električno i magnetno polje predstavljaju simetriju u teoriji.

Odredićemo rešenja Maxwell-ovih jednačina u vakuumu kada je $\rho = 0$ i $\vec{j} = 0$. Rotor jednačine (1.38) 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 (1.39) po vremenu

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

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

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \Delta \vec{E} = 0. \quad (1.42)$$

Talasna jednačina ima u principu mnogo rešenja. Kad se rešava u jednoj prostornoj dimenziji za skalarno polje ϕ

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0, \quad (1.43)$$

njeno opšte rešenje je

$$\phi(x, t) = f\left(t - \frac{x}{c}\right) + g\left(t + \frac{x}{c}\right), \quad (1.44)$$

i predstavlja linearnu kombinaciju dve proizvoljne funkcije (dva profila ili talasna paketa) f i g . Talas f se kreće duž x -ose u pozitivnom smeru brzinom c , a talas g u negativnom smeru x -ose istom brzinom: u ovo možemo da se uverimo posmatrajući talasni front, odnosno proizvoljnu tačku f_0 na 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. $x = ct - c \cdot \text{const}$, što znači da se tačka f_0 kreće duž x -ose brzinom c .

I u slučaju kada ne možemo da odredimo, na jednostavan način, opšte rešenje, za linearne jednačine postoje sistematski metodi kako se ono nalazi. Da bismo rešili (1.42) naći ćemo prvo njena partikularna rešenja. Pošto jednačina ima konstantne koeficijente rešenja su eksponencijalne funkcije,

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.45)$$

a uslov (1.42) implicira da frekvencija ω i talasni vektor \vec{k} nisu nezavisni već važi

$$\omega^2 = c^2 \vec{k}^2. \quad (1.46)$$

Veza izmedju talasnog broja i frekvencije naziva se disperziona relacija, a rešenje (1.45) zove se ravan monohromatski talas. Talas je monohromatski jer ima odredjenu frekvenciju ω a ravan jer je njegov talasni front ravan u trodimenzionom prostoru, $\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t = \text{const}$. Ova ravan je ortogonalna na pravac prostiranja talasa koji je dat talasnim vektorom \vec{k} . Talasna dužina talasa je

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{2\pi}{k}, \quad (1.47)$$

a \vec{E}_0 je njegova amplituda.

Osim (1.42) imamo ostale tri Maxwell-ove jednačine koje dodatno određuju rešenje. Iz njih dobijamo

$$\vec{k} \cdot \vec{E}_0 = 0 \quad (1.48)$$

$$\vec{B} = -\frac{\vec{k}}{k} \times \vec{E} = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (1.49)$$

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

Treba možda napomenuti da je zapis ravnog talasa (1.45), mada uobičajen, na izvestan način formalan jer eksponencijalna funkcija imaginarnog argumenta $e^{iy} = \cos y + i \sin y$ 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} realni (ili imaginarni) deo rešenja (1.45). U kvantnoj mehanici biće drugačije: talasne funkcije su nužno kompleksne funkcije realnih promenljivih pa zbog toga nisu direktno opservabilne odnosno merljive.

Pošto su Maxwell-ove jednačine linearne, njihovo opšte rešenje je zbir partikularnih rešenja, ravnih talasa. (U jednostavnom slučaju sabiranja dva

ravna talasa to nazivamo interferencijom.) Koeficijenti u zbiru su proizvoljni, a u svakom konkretnom problemu zadati su (tj. mogu se odrediti) vrednostima polja na granici ili u beskonačnosti, tzv. graničnim uslovima. Opšte rešenje za električno polje je

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \int d^3k \vec{E}_0(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \quad (1.50)$$

gde je $\omega = c|\vec{k}|$, a $\vec{E}_0(\vec{k})$ je amplituda ravnog talasa talasnog broja \vec{k} . Linearnost Maxwell-ovih jednačina tj. osobina da je zbir dva ili više rešenja opet rešenje (= fizički moguća konfiguracija) je fenomenološki veoma važna i omogućava da se opišu pojave interferencije i difrakcije svetlosti. Zapravo, obrnuto: činjenica da interferencija i difrakcija postoje u prirodi ukazuje da su jednačine koje opisuju prostiranje svetlosti linearne.

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

$$\mathcal{E} = \frac{1}{8\pi} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2), \quad (1.51)$$

odnosno da je energija

$$E = \frac{1}{8\pi} \int d^3r (\vec{E}^2 + \vec{B}^2). \quad (1.52)$$

U slučaju ravnog talasa lako se dobija

$$\mathcal{E} = \frac{1}{4\pi} \vec{E}_0^2. \quad (1.53)$$

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

1.4 INTERFERENCIJA

Jedan od eksperimenata koji najjasnije karakterišu talasno ponašanje svetlosti je Young-ov interferencijski eksperiment na dva otvora (1801, 1803); pojava interferencije vidi se naravno kod drugih vrsta talasa. Njegov uzbudljiv prikaz može se naći u Feynman-ovom opštem kursu fizike⁴: mi ćemo ga opisati ukratko, uglavnom da bismo prodiskutovali konačne formule.

U eksperimentu je monohromatski izvor svetlosti \mathcal{I} frekvence ω postavljen ispred zaklona na kome su dva linijska otvora, preseka 1 i 2, na međusobnom rastojanju d . Svetlost prolazi kroz otvore i detektuje se na ekranu koji je na rastojanju $l \gg d$ od zaklona.

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

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 ekrana koja je označena 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 približno cilindrični, ali ta činjenica nije ovde toliko bitna jer slabljenje amplitude sa rastojanjem daje efekte višeg reda i može se zanemariti. Dakle, imamo

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_0 \sin(kr_1 - \omega t), \quad \vec{E}_2 = \vec{E}_0 \sin(kr_2 - \omega t), \quad (1.54)$$

gde sa slike vidimo da su rastojanja r_1 i r_2 jednaka

$$r_1^2 = l^2 + \left(y - \frac{d}{2}\right)^2, \quad r_2^2 = l^2 + \left(y + \frac{d}{2}\right)^2. \quad (1.55)$$

Prema tome, ukupno električno polje je

$$\vec{E} = 2\vec{E}_0 \cos \frac{k(r_2 - r_1)}{2} \sin \frac{kr_1 + kr_2 - 2\omega t}{2} \approx 2\vec{E}_0 \cos \frac{k(r_2 - r_1)}{2} \sin(kr - \omega t), \quad (1.56)$$

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

$$\Delta = k(r_2 - r_1) = kl \left(\sqrt{1 + \left(\frac{y}{l} + \frac{d}{2l}\right)^2} - \sqrt{1 + \left(\frac{y}{l} - \frac{d}{2l}\right)^2} \right) = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{yd}{l} \quad (1.57)$$

koristeći $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Iz formule za polje \vec{E} vidi se da se talasi pojačavaju odnosno konstruktivno interferiraju kada je $|\cos \frac{\Delta}{2}| = 1$ i tada se na ekranu pojavljuju svetle pruge:

$$\frac{\Delta}{2} = n\pi, \quad \text{tj.} \quad y = \frac{\lambda l}{d} n. \quad (1.58)$$

U slučaju destruktivne interferencije imamo tamne pruge na rastojanjima

$$y = \frac{\lambda l}{d} \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (1.59)$$

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

Jasno je da kada bi izvor \mathcal{I} u eksperimentu sa istom geometrijom emitovao čestice, na ekranu bi se dobila drugačija slika: dve svetle pruge na mestima preseka pravih \mathcal{I}_1 i \mathcal{I}_2 i ravni ekrana; naravno, u sredini ekrana bilo bi zatamnjenje. To je zato što 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: slučaj difrakcije na rešetki biće nam važan kasnije.

1.5 ZRAČENJE CRNOG TELA

Posle ovog pregleda nekih važnih pojmova klasične fizike preći ćemo u narednim poglavljima na opis eksperimenata sa kraja devetnaestog veka koji su doveli do novih ideja i radikalno promenili klasični opis prirode⁵. U pokušajima da se postojeći fizički koncepti usklade sa rezultatima eksperimenata izdvojile su se dve važne ideje: prva je ideja kvantovanja, odnosno ideja da njutnovska neprekidnost fizičkih pojava i procesa nije univerzalna i da postoje veličine čije izmerene vrednosti mogu biti samo diskretne. Druga ideja je da se pojmovi čestice (materijalne tačke) i polja (talasa) ne mogu uvek tačno razgraničiti, pa je na ‘veoma malim’ rastojanjima stanje tačkaste čestice zapravo korektnije opisati ‘talasnom funkcijom’ koja ima attribute fizičkog polja.

Počecemo od eksperimenata o osobinama zračenja crnog tela. Svako telo 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

$$\mathcal{U}(T) = \epsilon \sigma T^4 \quad (1.60)$$

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

$$\mathcal{U}(T) = \int_0^\infty u(\omega) d\omega = \int_0^\infty u(\lambda) d\lambda. \quad (1.61)$$

Veličina ϵ je konstanta izmedju 0 i 1 i naziva se emisivnost, a zavisi od osobina površine tela: telo sa $\epsilon = 1$ je apsolutno crno telo. σ je Stefan-Boltzmann-ova konstanta, $\sigma = 5.670 \cdot 10^{-8} \text{Jm}^{-2}\text{K}^{-4}\text{s}^{-1}$. Termodinamičko izvodjenje zakona zračenja crnog tela dao je Boltzmann 1884, a 1899. Lummer i Pringsheim su eksperimentalno odredili spektralnu raspodelu zračenja odnosno funkciju $u(\lambda)$.

Slika: Spektralna raspodela za crno telo.

Problem kako da se formula (1.60) 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 $u(\lambda) \sim \lambda^{-4}$; 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. Crno telo realizovano je kao kockasta metalna kutija u kojoj se nalazi elektromagnetno zračenje u toplotnoj ravnoteži, na temperaturi T . Pošto su stranice od metala, elektromagnetni talasi unutar kutije su stojeći talasi: to sledi iz uslova da komponente električnog

⁵Veoma dobar pregled istorijskog razvoja moderne fizike dat je u knjizi R. Eisberg-a, *Fundamentals of Modern Physics*, John Wiley & Sons, 1990.

polja tangentne na stranice moraju biti nula. Ovaj uslov, primenjen na stranice $x = 0$, $y = 0$ i $z = 0$ dozvoljava samo talase oblika

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z, \quad (1.62)$$

a kada 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. dozvoljeni su samo talasi talasnog broja

$$k_x = \frac{\pi n_x}{a}, \quad k_y = \frac{\pi n_y}{a}, \quad k_z = \frac{\pi n_z}{a} \quad (1.63)$$

gde su n_x , n_y i n_z su celi brojevi, odnosno talasi frekvence

$$\omega^2 = \frac{c^2 \pi^2}{a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (1.64)$$

U k -prostoru (u koordinatnom sistemu čije su ose k_x , k_y i k_z) frekvence stojećih talasa su tačke određene trojkama celih brojeva (n_x, n_y, n_z) koje leže na kvadratnoj rešetki; 'gustina' tačaka je $(\frac{a}{\pi c})^3$. Medjutim, za svaku od tih frekvenci energija talasa može biti proizvoljna jer, kao što smo videli, ona zavisi samo od amplitude talasa \vec{E}_0^2 .

U elektrodinamici se pokazuje da je elektromagnetno polje u vakuumu ekvivalentno sistemu neinteragujućih oscilatora različitih frekvenci. Zato je u stanju termodinamičke ravnoteže funkcija raspodele po energiji Boltzmannova raspodela. Srednja vrednost energije za talase fiksirane frekvence ω dobija se usrednjavanjem,

$$\langle E_\omega \rangle = \frac{\int_0^\infty E e^{-\beta E} dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E} dE} = -\frac{d}{d\beta} \log \int_0^\infty e^{-\beta E} dE = \frac{1}{\beta} = kT, \quad (1.65)$$

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

$$du = u(\omega) d\omega = \frac{\langle E_\omega \rangle}{V} N(\omega) d\omega, \quad (1.66)$$

gde je $N(\omega) d\omega$ broj talasa frekvence ω a V zapremina crnog tela. Pošto je zbog graničnog uslova (1.63) broj talasa proporcionalan broju celobrojnih tačaka u k -prostoru, u opsegu frekvenci između 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

$$N(\omega) d\omega = \frac{1}{8} 4\pi \omega^2 d\omega \left(\frac{a}{\pi c}\right)^3 2 = \left(\frac{a}{\pi c}\right)^3 \pi \omega^2 d\omega. \quad (1.67)$$

U poslednjoj formuli smo geometrijski rezultat pomnožili sa 2 jer elektromagnetni talas date frekvence i talasnog broja ima dve polarizacije tj. dva

stepena slobode. Koristeći da je zapremina $V = a^3$, za spektralnu raspodelu dobijamo

$$du = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} kT. \quad (1.68)$$

Ako sa promenljive ω predjemo na talasnu dužinu $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$, imamo

$$du = u(\lambda)d\lambda = 8\pi kT \frac{d\lambda}{\lambda^4}. \quad (1.69)$$

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):

$$\mathcal{U}(T) = \int_0^\infty u(\omega)d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega = \infty \cdot kT. \quad (1.70)$$

U svoje vreme ovaj rezultat je nazvan ultraljubičasta katastrofa, jer integral energije (1.70) divergira u gornjoj granici $\omega \rightarrow \infty$, odnosno za velike vrednosti frekvenci.

Modernim jezikom kvantne teorije polja rekli bismo da integral (1.70) treba da se ‘regularizuje’. Neka vrsta regularizacije i bila je u osnovi Planck-ove ideje: da se srednja vrednost $\langle E_\omega \rangle$ modifikuje 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 (1.65) umesto po kontinualnim 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 $\omega \rightarrow \infty$), tako da je ovakva zamena u nekom smislu opravdana. Za srednju vrednost energije oscilatora frekvence ω se pod ovom pretpostavkom dobija

$$\langle E_\omega \rangle = \frac{\sum_0^\infty n\hbar\omega e^{-\beta n\hbar\omega}}{\sum_0^\infty e^{-\beta n\hbar\omega}} = -\frac{d}{d\beta} \log \sum_0^\infty e^{-\beta n\hbar\omega} = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}, \quad (1.71)$$

pri čemu se u izračunavanju koristi da je suma geometrijskog reda

$$1 + a + a^2 + \dots = \frac{1}{1 - a},$$

za $|a| < 1$. U klasičnom limesu $T \rightarrow \infty$ odnosno $\beta \rightarrow 0$ približno je

$$e^{\beta\hbar\omega} = 1 + \beta\hbar\omega,$$

pa je $\langle E_\omega \rangle = \frac{1}{\beta} = kT$: dobija se klasični rezultat (1.65). Koristeći izraz (1.67) za broj oscilatora $N(\omega)$, za spektralnu raspodelu dobija se Planck-ova raspodela

$$u(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}. \quad (1.72)$$

Koristeći Planck-ovu raspodelu za ukupnu izračenu energiju imamo

$$\mathcal{U}(T) = \int u(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{k^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15} T^4. \quad (1.73)$$

Vrednost određenog integrala je $\frac{\pi^4}{15}$. Kada se u formulu (1.73) zamene numeričke vrednosti konstanti k , \hbar , c i π , za koeficijent proporcionalnosti između \mathcal{U} i T^4 dobija se upravo eksperimentalna vrednost Stefan-Boltzmann-ove konstante σ .

1.6 FOTOEFEKT

Fotoefekt je otkrio Hertz 1887. U drugoj polovini devetnaestog veka vršen je veliki broj eksperimenata u kojima je ispitivan 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. Perrin je 1895. pretpostavio da su katodni zraci u stvari naelektrisane čestice, što je 1897. dokazao J.J. Thomson precizno im izmerivši odnos naelektrisanja i mase, $\frac{e}{m}$, pri čemu je 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, a 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 i potvrdio merenjem odnosa $\frac{e}{m}$. Zavisnost struje koja se meri od napona između elektroda data je na slici: Slika: Fotoefekt, $j(V)$ struja praktično ne zavisi od napona osim za njegove negativne vrednosti, a anulira se pri vrednosti $V = -V_{max}$. To znači da elektroni u trenutku kada su izbijeni iz katode imaju nenultu kinetičku energiju čija maksimalna vrednost iznosi $E_{max} = eV_{max}$. Osim toga, mada je za $V > 0$ struja proporcionalna intenzitetu upadnog zračenja, E_{max} 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_{max} trebalo bi da zavisi od intenziteta zračenja, što se u eksperimentu ne dobija. Detaljniji račun pokazuje da bi u klasičnom opisu trebalo da postoji i drugi efekat: pošto energija elektromagnetnog talasa nije lokalizovana, njen prenos na elektrone nije trenutan nego je potrebno izvesno vreme – za uslove u opisanom eksperimentu to je oko 1 ili 2 minuta, što 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 SVETLOSNIH KVANTIMA KOJI SU LOKALIZOVANI I NOSE ENERGIJU $\hbar\omega$.

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

$$\hbar\omega = A + \frac{1}{2}mv_{max}^2, \quad \frac{1}{2}mv_{max}^2 = eV_{max} \quad (1.74)$$

gde je A 'izlazni rad' elektrona tj. potencijalna energija kojom je elektron vezan u kristalnu rešetku katode. Jednačina (1.74) je čuvena Einstein-ova jednačina fotoefekta.

Einstein-ova teorija između ostalog predviđa linearnu zavisnost između E_{max} i frekvence upadnog zračenja ω :

$$E_{max} = \hbar\omega - A.$$

Slika: Fotoefekt 2, $E(\omega)$ Ovu zavisnost je 1916. eksperimentalno proveo i potvrdio Millikan, i to je bio jedan od velikih trijumfa kvantne teorije. Takodje, određivanjem koeficijenta pravca prave na grafiku Millikan je izmerio Planck-ovu konstantu \hbar koja se do na eksperimentalnu grešku poklopila sa odranije poznatom vrednošću.

Kvantima svetlosti Lewis je 1926. dao ime fotoni. Interesantno je da se podsetimo je prva teorija svetlosti (Descartes 1637, Newton 1704) koja je opisivala geometrijsku optiku takodje bila korpuskularna. Ova teorija je dominirala do otkrića pojave interferencije i Young-ovog eksperimenta 1801, a tokom devetnaestog veka bila potpuno napuštena. Ni sam Planck po svoj prilici nije verovao u čestičnu prirodu svetlosti i u Einstein-ovu smelu fizičku interpretaciju, nego je formulu $E = \hbar\omega$ smatrao za tehnički korak čiji fizički smisao tek treba da se razume⁶.

1.7 COMPTON-OV EFEKT

Einstein-ovo objašnjenje fotoefekta po kome se energija elektromagnetnog talasa predaje u procesu sudara elektrona sa fotonom mnogi fizičari nisu

⁶ Još jedan izuzetan pregled sa detaljnim uvidom u razvoj matematičkih ideja dat je u knjizi G. G. Emch-a, *Mathematical and Conceptual Foundations of 20th-Century Physics*, North-Holland, 1984.

mogli da prihvate jer je ovo objašnjenje zapravo odustajanje od klasične teorije zračenja: kvanti svetlosti ponašaju se kao čestice. Korpuskularna priroda svetlosti je konačno potvrđena otkrićem i 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, $p = \frac{E}{c} = \hbar k$.

Compton-ov eksperiment iz 1923. sastojao se u merenju otklona snopa X-zraka pri prolasku kroz tanki list metala. Eksperimentalno dobijena veza između talasne dužine λ upadnog X-zraka i talasne dužine λ' zraka rasejanog pod uglom θ je

$$\lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos \theta). \quad (1.75)$$

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 , Compton-ova talasna dužina, ne zavisi od frekvence odnosno talasne dužine X-zraka.

Compton je pretpostavio da je proces koji se dešava u metalu zapravo sudar fotona sa elektronom koji je približno u mirovanju. Ova pretpostavka je opravdana jer, kao što smo videli, tipične energije vezivanja elektrona u metalu su reda veličine energija ultraljubičastog zračenja odnosno 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, i naravno, relativistički. 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 glase

$$\begin{aligned} \hbar\omega + mc^2 &= \hbar\omega' + \sqrt{p'^2c^2 + m^2c^4}, \\ \hbar\vec{k} &= \hbar\vec{k}' + \vec{p}', \quad \text{tj.} \quad \hbar k = \hbar k' \cos \theta + p' \cos \varphi \\ 0 &= \hbar k' \sin \theta - p' \sin \varphi. \end{aligned}$$

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

$$\frac{1}{\omega'} = \frac{1}{\omega} + \frac{\hbar}{mc^2}(1 - \cos \theta), \quad (1.76)$$

što daje formulu (1.75) kad se sa frekvenci predje na talasne dužine. Pri tome je $\lambda_C = \frac{h}{mc} = 0.243 \cdot 10^{-11}\text{m}$, u skladu sa eksperimentalno dobijenom vrednošću. U kasnijim eksperimentima (Bothe i Wilson 1923, Bothe i Geiger 1925, Bless 1927.) opservirani su i sami elektroni posle sudara sa fotonom i merena je njihova energija; takodje je potvrđeno da se elektron pojavljuje istovremeno sa rasejanim fotonom tj. da je sudar 'trenutan'.

Fotoefekt i Compton-ov efekt ukazuju na to da je priroda elektromagnetnog zračenja ‘dualna’: u ovim eksperimentima detektuju se kvanti svetlosti koji su prostorno lokalizovani tj. ponašaju se kao čestice određene energije i impulsa. Sa druge strane u brojnim ranijim merenjima koji datiraju još od Young-ovog interferencionog eksperimenta iz 1803. dobro su i detaljno proverene 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 materijalne čestice ponašaju kao talasi.

1.8 LINIJSKI SPEKTRI I MODEL ATOMA

Krajem devetnaestog veka intenzivno su ispitivani i mereni i atomski spektri. Tipična eksperimentalna aparatura kojom se određuje 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 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 (veliki ljubitelj numerologije) je 1885. našao empirijsku formulu za talasne dužine grupe linija u vidljivom delu vodonikovog spektra koja glasi

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad (1.77)$$

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

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (1.78)$$

gde je $R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}$ Rydberg-ova konstanta za vodonik. Primenujući Ritz-ov rekombinacioni princip (1908) koji kaže da se frekvence novih spektralnih linija mogu dobiti kao zbir ili razlika frekvenci postojećih linija, Rydberg-ova formula može da se uopšti,

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (1.79)$$

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

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{(m-a)^2} - \frac{1}{(n-b)^2} \right). \quad (1.80)$$

Formula (1.79) izgleda toliko jednostavno da se nameće ideja da ona u sebi sadrži neki fundamentalni fizički zakon. Prvi korak u njenom objašnjenju bilo je razumevanje strukture vodonikovog 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 potvrđeno u eksperimentima rasejanja X-zraka na atomima (Barkla 1909) u kojima je utvrđeno 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 raspoređeno u atomu i taj model je ispitivan u eksperimentima rasejanja α -čestica na tankim metalnim listovima (Rutherford 1909). Analizirajući rezultate eksperimenta Rutherford je zaključio da se oni ne slažu sa Thomson-ovim modelom, jer model predviđa da je broj čestica rasejanih pod velikim uglovima (većim od $\pi/2$) toliko mali da praktično ne bi trebalo da budu detektovane, što u eksperimentu nije bio slučaj. Rutherford je pretpostavio da je svo pozitivno naelektrisanje (a time i masa) skoncentrisano u centru, “jezgru” atoma i izračunao diferencijalni presek rasejanja α -čestica u Coulomb-ovom elektrostatičkom polju jezgra. Dobio je izraz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4m^2 v^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (1.81)$$

tzv. *Rutherford-ovu formulu*: ovom izrazu θ je ugao rasejanja, a v brzina upadnog snopa α -čestica. Neposredno posle njenog izvodjenja, u eksperimentima Geiger-a i Marsden-a 1911. mereno je i potvrđeno da je efikasni presek za rasejanje α -čestica na atomima opisan baš ovim zakonom. To znači da je atom skoro ‘prazan’, odnosno da je jezgro veoma malih dimenzija: Rutherford je dimenzije jezgra (ispravno) procenio na 10^{-14} m. Interesantno je da i kvantnomehanički račun, kao što ćemo videti u poslednjoj glavi, daje u vodećem redu potpuno istu zavisnost efikasnog preseka od ugla rasejanja. To je u neku ruku bila srećna okolnost za fiziku jer je jednačina (1.81) 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. A odmah se može ukazati i na nedostatak ovog modela: elektroni, za razliku od planeta, pri kružnom kretanju oko jezgra zrače elektromagnetne talase, i u tom procesu gube energiju. Energija elektrona u principu se brzo izrači i elektron pada na jezgro: Rutherford-ov atom nije stabilan.

1913. Bohr je predložio model koji ovaj osnovni problemi rešava opet na postulativan način. Model se bazira se na dve osnovne pretpostavke:

1. ELEKTRONI U ATOMU KREĆU SE OKO JEZGRA PO KRUŽNIM PUTAN-

JAMA, ALI DOZVOLJENE ODNOSNO STABILNE SU SAMO ORBITE NA KOJIMA JE MOMENT IMPULSA KVANTOVAN I IMA VREDNOSTI $L = n\hbar$, 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 iz Bohr-ovog modela se dobija Rydberg-ova formula za emisijski spektar vodonika. Pri kretanju elektrona po krugu njegovo centripetalno ubrzanje potiče od elektrostatičke privlačne sile jezgra pa imamo

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}, \quad \text{tj.} \quad r = \frac{e^2}{mv^2}. \quad (1.82)$$

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

$$L_n = n\hbar\omega = mr_nv_n, \quad (1.83)$$

odgovaraju brzina i poluprečnik

$$v_n = \frac{e^2}{n\hbar} \quad \text{i} \quad r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} n^2 = a_B n^2, \quad (1.84)$$

kao i energija

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{e^2}{r_n} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}. \quad (1.85)$$

Konstanta $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{m}$ je Bohr-ov radijus i definiše red veličine dimenzija atoma odnosno skalu atomske fizike. Kada se u formuli (1.85) zamene vrednosti za masu i naelektrisanje elektrona i izračuna razlika $E_n - E_m$ dobija se (1.79) 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 ovakve fizičke veličine karakteriše. Posebno: da li postoji veza između Planck-ovog i Bohr-ovih postulata kvantovanja? Odgovarajući princip formulisao je Sommerfeld 1915. i on se naziva Sommerfeld-ovo pravilo:

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

$$\oint p_i dx_i = 2\pi\hbar n_i, \quad (1.86)$$

GDE SU n_i POZITIVNI CELI BROJEVI, A INTEGRAL SE RAČUNA PO JEDNOM PERIODU KRETANJA SISTEMA.

Lako se vidi da se Sommerfeld-ovo pravilo kvantovanja može primeniti na vodonikov atom. Videli smo da se u slučaju kretanja u centralnom potencijalu održava moment impulsa, $p_\theta = L$, pa ako primenimo (1.86) na promenljive θ i p_θ direktno dobijamo

$$\oint p_\theta d\theta = 2\pi L = 2\pi\hbar n, \quad (1.87)$$

tj. $L = n\hbar$. Kad se pravilo primeni na drugi par promenljivih, r i p_r , dobija se kvantovanje energije (1.85), i to ne samo za kružne nego i za eliptične orbite (u tom slučaju r_n je velika poluosu elipse). Interesantno je da se Sommerfeld-ovo pravilo može primeniti i na relativističku generalizaciju Bohr-ovog modela pri čemu daje eksperimentalno izmerenu tzv. finu strukturu spektra atoma (Bohr 1915, Sommerfeld 1916) koju je eksperimentalno otkrio Michelson 1891. godine.

Sa druge strane, pravilo daje i kvantovanje za harmonijski oscilator. U jednoj dimenziji energija tj. hamiltonijan oscilatora je

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (1.88)$$

a rešenje klasičnih jednačina kretanja,

$$x = a \cos(\omega t + \varphi), \quad p = -m\omega a \sin(\omega t + \varphi). \quad (1.89)$$

Ako uvrstimo ovo rešenje u (1.86) i integralimo po jednom periodu, $T = \frac{2\pi}{\omega}$ dobijamo

$$\oint p dx = \int_0^T m\omega^2 a^2 \sin^2(\omega t + \varphi) dt = \pi m\omega a^2. \quad (1.90)$$

Sommerfeld-ovo pravilo onda daje

$$m\omega a^2 = 2\hbar n, \quad (1.91)$$

a za energiju oscilatora se dobija

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2 = n\hbar\omega, \quad (1.92)$$

odnosno Planck-ova formula.

Sommerfeld-ovo pravilo imalo je i konceptualni i teorijski značaj zato što je povezaloo kvantovanje sa finitnim kretanjima sistema, a sem toga ukazalo na značaj kanonskih promenljivih. Medjutim intuitivno, za dalji razvoj ideja kvantne mehanike 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

$$\lambda_n = \frac{h}{p_n} = \frac{2\pi\hbar}{mv_n}, \quad (1.93)$$

vidimo da važi

$$n\lambda_n = 2\pi r_n, \quad (1.94)$$

odnosno, na obimu kruga koji predstavlja trajektoriju elektrona nalazi se tačno n talasnih dužina hipotetičkog, elektronu pripisanog talasa. Drugim rečima, kvantovanje momenta impulsa možemo interpretirati kao uslov da su stabilne samo one orbite na kojima je elektron stojeći talas, a 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 pomalo proizvoljno, može se reći da Bohr-ov model sugerise da su čestice u nekom smislu – talasi.

1.9 TALASNO-ČESTIČNI DUALIZAM

De Broglie je 1924. izneo ideju da ne postoji jasna granica između 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 $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, A KRETANJE ČESTICE SE PRI TOME OPISUJE KAO PROPAGACIJA TALASA.

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

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (1.95)$$

Zapazimo da je de Broglie pretpostavio da je jednačina kretanja čestice 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 prostorno (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 Broglie-ove talasne dužine. Ako izračunamo ovu talasnu dužinu npr. za elektron kinetičke energije $E = 10\text{ eV}$, dobijamo $\lambda = 3.9 \cdot 10^{-10}\text{ m}$. Ova talasna dužina nije toliko mala da se ne bi mogla izmeriti: reda je veličine međuatomskih rastojanja u kristalima. Zato su talasne osobine elektrona prvi put eksperimentalno potvrđene upravo difrakcijom elektrona na kristalima, na kristalu nikla u eksperimentu Davisson-a i Germer-a 1927. i na kristalu zlata u eksperimentu G. P. Thomson-a 1928. Uskoro posle toga Estermann, Frisch i Stern dokazali su postojanje difrakcije i u rasejanju helijumovih atoma. Do

danas su izvedeni brojni difrakcioni i interferencioni eksperimenti, ne samo sa elektronima i neutronima nego i sa velikim ('makroskopskim') organskim molekulima i to u (tehnički zahtevnijoj) varijanti interferencije na dva otvora, čime je talasna priroda čestica mnogostruko potvrđjena.

Talasnno-čestični dualizam je jedna od realizacija 'komplementarnosti', pojma koji je 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 $E = \frac{p^2}{2m}$ opisana ravnim talasom

$$\Psi(t, \vec{r}) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}, \quad (1.96)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi, \quad (1.97)$$

jer kao što smo videli, pri delovanju na ravan talas izvod $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ se svodi na množenje sa E , a gradijent $-i\hbar \nabla$ na množenje sa \vec{p} . I u nekom, matematički preciznijem smislu Schrödinger-ova jednačina se dobija zamenom vektora impulsa čestice \vec{p} operatorom $\hat{p} = -i\hbar \nabla$, 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 $U(\vec{r}, t)$, Schrödinger-ova jednačina opet je ekvivalentna izrazu za energiju čestice, $E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t)$, i glasi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \Psi. \quad (1.98)$$

Interesantno je napomenuti da su i Schrödinger, kao i Born i Jordan pokušali da jednačinu kretanja kvantne (talasne, odnosno matricne) mehanike formulišu kao varijacioni princip analogan principu najmanjeg dejstva: danas, međjutim znamo da to nije moguće odnosno moguće je samo formalno, jer funkcional koji se varira fizički nije dejstvo. Dejstvo u kvantnoj fizici ima potpuno drugačiju i specifičnu ulogu koja se najbolje vidi u funkcionalnom formalizmu kvantne mehanike i kvantne teorije polja. Slično, nije moguće ni 'izvesti' Schrödinger-ovu jednačinu: ona je osnovni zakon dinamike kvantnih sistema koji, kao i drugi Newton-ov zakon, sledi direktno iz eksperimenta.

1.11 ZADACI

GLAVA 2

JEDNODIMENZIONNI SISTEMI

2.1 HARMONIJSKI OSCILATOR

Da bismo na neki način zaokružili uvod i odmah pokazali kako se na tehničkom odnosno matematičkom nivou iz Schrödinger-ove jednačine dobija kvantovanje i specijalno Planck-ova formula, rešićemo jednačinu za harmonijski oscilator. Oscilator svakako nije najjednostavniji, a nije ni istorijski prvi sistem za koji je Schrödinger-ova jednačina rešena (u svojim čuvenim radovima iz 1926. Schrödinger je prvo razmatrao vodonikov atom), ali je po svoj prilici fizički najvažniji. Alternativni, veoma važan i u stvari jednostavniji, operatorski način određivanja stanja i energija harmonijskog oscilatora biće dat na kraju sledeće glave i tek time će kvantnomehanički opis ovog fizičkog sistema biti kompletiran.

Potencijalna energija čestice koja vrši harmonijsko oscilovanje oko ravnotežnog položaja $x = 0$ u jednoj dimenziji je

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (2.1)$$

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

$$U(x) = U(a) + \frac{1}{2}U''(a)(x - a)^2 + \dots \quad (2.2)$$

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

$$H = T + U = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad (2.3)$$

pa Schrödinger-ova jednačina glasi

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

gde je $\Psi(x, t)$ talasna funkcija koja opisuje stanje oscilatora i zavisi od jedne prostorne koordinate i vremena.

Jednačina (2.4) nije jednostavna za rešavanje jer je parcijalna jednačina u kojoj nezavisno promenljiva x figuriše eksplicitno; međjutim 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 $\Psi(x, t)$ proizvod oblika

$$\Psi(x, t) = T(t)\psi(x). \quad (2.5)$$

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

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

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 jednake konstanti koju ćemo, zbog dimenzija, označiti sa E . Kasnije ćemo videti da je E zaista vrednost energije dobijenog stanja. Jednačina za $T(t)$

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = ET \quad (2.7)$$

je jednostavna i njeno rešenje je eksponencijalna funkcija,

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

Preostala jednačina za prostorni deo talasne funkcije, $\psi(x)$, zove se vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina. Ona je uvek komplikovanija; u ovom slučaju glasi

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

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

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (2.10)$$

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

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

Naravno, linearna smena iz x u ξ ne može suštinski da uprosti Schrödinger-ovu jednačinu. Po pravilu, diferencijalne jednačine u kvantnoj mehanici su komplikovanije od jednačina klasične mehanike; kod rešivih sistema rešenja

se izražavaju preko specijalnih funkcija. Ipak za neke jednostavnije klase jednačina razradjene su metode za rešavanje kao što je Frobenius-ov metod koji rešenja daje u obliku stepenog reda. U kvantnoj mehanici ovaj metod je pogodan jer se analizom rešenja dobijaju i uslovi kvantovanja.

Da bismo jednačinu (2.11) maksimalno pojednostavili, ispitaćemo prvo osobine njenih rešenja u asimptotskim oblastima (i eventualno, u singularnim tačkama potencijala). Nama trebaju 'fizička rešenja', i mada ovaj termin još nismo precizni definisali, on između ostalog svakako znači da $\psi(x)$ ni u jednoj tački ne divergira. U klasičnoj teoriji polja ovakav zahtev namećemo da bi fizičke veličine kao gustina energije ili impuls polja bile u svim tačkama konačne; u kvantnoj mehanici uslov konačnosti talasne funkcije značiće da gustina verovatnoće nalaženja čestice u svakoj tački ima konačnu vrednost. Pošto su u (2.11) sve funkcije neprekidne, proveravamo ponašanje rešenja samo u asimptotskim oblastima, $x \rightarrow \pm\infty$. Za dovoljno veliko ξ je $\xi^2 \gg \frac{2E}{\hbar\omega}$ pa u (2.11) prvi član u zagradi možemo da zanemarimo, i jednačina postaje

$$\psi'' - \xi^2\psi = 0. \quad (2.12)$$

Lako može da se proveriti da su asimptotska rešenja ove jednačine $e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}$. Rešenje sa plusom u eksponentu divergira za $\xi \rightarrow \pm\infty$ pa ga odbacujemo i egzaktno rešenje tražimo u obliku

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

Zamenjujući izraz (2.13) u jednačinu (2.11) dobijamo da nepoznata funkcija $f(\xi)$ treba da zadovoljava

$$f'' - 2\xi f' + \lambda f = 0, \quad (2.14)$$

gde je

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1. \quad (2.15)$$

Ako (2.14) uporedimo sa jednačinom (2.205), vidimo da je $p_0 = 0$, $q_0 = 0$ a koreni su $r = 0, 1$. Razmatraćemo samo prvo od dva rešenja data u dodatku jer drugo, koje u sebi sadrži $\log \xi$, divergira u $\xi = 0$. Imamo

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

a pošto je k nemi indeks sumiranja, iz

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

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

zamenom u (2.14) dobijamo

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left((k+2)(k+1)a_{k+2} - (2k-\lambda)a_k \right) \xi^k = 0. \quad (2.19)$$

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

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

za koeficijente u razvoju a_k , kojom su određena rešenja Schrödinger-ove jednačine (2.14). Svi parni koeficijenti a_{2k} mogu se izraziti preko a_0 a 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 $k \rightarrow \infty$: proverićemo ga ponovo. Za velike, parne na primer stepene, iz rekurentne relacije (2.20) približno dobijamo

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

Ovako se ponašaju koeficijenta u razvoju funkcije e^{ξ^2} ! Ovaj zaključak u stvari nije iznenadjujući i znači da dobijeno ukupno rešenje ima asimptotiku

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

odnosno to je baš rešenje koje smo smenom (2.13) hteli da odbacimo kao nefizičko. Ali naš postupak rešavanja daje i fizička rešenja Schrödinger-ove jednačine: ona se dobijaju ako se red (2.16) prekine na nekoj konačnoj vrednosti indeksa n pa funkcija $f(\xi)$ postane polinom; naravno, koeficijenti polinoma zadovoljavaju (2.20). Ovakva rešenja u beskonačnosti konvergiraju jer eksponent brže opada nego što polinomijalna funkcija raste. Lako se vidi da uslov

$$a_{n+2} = 0 \quad (2.23)$$

‘odseca’ red (2.16) na n -tom članu, jer su zbog (2.20) zajedno sa a_{n+2} i svi sledeći koeficijenti a_{n+4} , a_{n+6} , ... nula. To jest, svi koeficijenti iste parnosti: da bi se red sveo na polinom treba dodatno da pretpostavimo da su svi koeficijenti suprotne parnosti nula (dva uslova oblika (2.23) za različito n bila bi kontradiktorna). Na primer, za parno n uz (2.23) 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 (2.23) i rekurentna relacija (2.20) definišu jedan polinom stepena n , $H_n(\xi)$, i odgovarajuću talasnu funkciju

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi). \quad (2.24)$$

Polinomi $H_n(\xi)$ zovu se Hermité-ovi polinomi i kao što smo videli, parni su ili neparni. Osim stepena polinoma n uslov (2.23) fiksira i vrednost konstante λ odnosno E :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.25)$$

Znači, energija ne može biti proizvoljna nego je kvantovana odnosno ima diskretne vrednosti. Do na sabirak $\hbar\omega/2$ to su upravo vrednosti koje je Planck postulirao 1901. Stanje najniže energije $\psi_0(x)$ dobija se za $n = 0$ i zove se osnovno stanje. Njemu odgovara talasna funkcija koja je Gauss-ov paket, jer je polinom nultog stepena $H_0(\xi) = \text{const}$:

$$\psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (2.26)$$

Treba da zapazimo da ni u osnovnom stanju energija harmonijskog oscilatora nije nula: to je, kako ćemo videti kasnije, u skladu sa Heisenberg-ovim relacijama neodređenosti, a različito od ponašanja klasičnog oscilatora. Sledeće stanje po energiji, prvo pobudjeno stanje je

$$\psi_1(\xi) = (4\pi)^{-1/4} 2\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega, \quad (2.27)$$

a drugo pobudjeno stanje dato je sa

$$\psi_2(\xi) = (64\pi)^{-1/4} (4\xi^2 - 1) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad E_2 = \frac{5}{2} \hbar\omega. \quad (2.28)$$

Slika: prve tri svojstvene funkcije za HO

Slika: spektar energije HO

Skup dozvoljenih vrednosti energije (ili bilo koje druge fizičke veličine) naziva se spektar: u slučaju harmonijskog oscilatora spektar energije je skup ekvidistantnih tačaka (2.25) dat na slici. Brojne vrednosti konstanti normiranja A_n date su u dodatku, kao i neke od osobina Hermité-ovih polinoma.

2.2 VREMENSKI NEZAVISNA SCHRÖDINGER-OVA JEDNAČINA

Na primeru rešavanja Schrödinger-ove jednačine za harmonijski oscilator uveli smo nekoliko opštih postupaka koji se često koriste. Jedan od njih je razdvajanje vremenske promenljive od prostornih u Schrödinger-ovoj jednačini i ono uvek može da se primeni kada je sistem konzervativan, tj. kada hamiltonijan ne zavisi eksplicitno od vremena. Izvešćemo ga ukratko u opštem slučaju. Neka je hamiltonijan jednočestičnog sistema dat sa

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}). \quad (2.29)$$

Schrödinger-ova jednačina za ovaj sistem glasi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\vec{r})\Psi, \quad (2.30)$$

pri čemu talasna funkcija zavisi od vremena i prostornih koordinata, $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$. Pošto potencijalna energija ne zavisi od vremena možemo naći partikularna rešenja oblika

$$\Psi(\vec{r}, t) = T(t)\psi(\vec{r}). \quad (2.31)$$

Uvodjenjem smene (2.31) dobijamo

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} \psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} T(t) \Delta \psi(\vec{r}) + T(t) U(\vec{r})\psi(\vec{r}), \quad (2.32)$$

odnosno

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + U(\vec{r}). \quad (2.33)$$

U poslednjoj formuli promenljive su razdvojene i jednačina može da bude tačna samo ako su leva i desna strana jednake (istoj) konstanti. Znači, polazna diferencijalna jednačina (2.30) pretvara se u dve od kojih je jedna obična,

$$\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} ET(t), \quad (2.34)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (2.35)$$

Kao što smo ranije pomenuli, izrazu $-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$ odgovara kinetička energija, tako da se (2.35) može pisati i kao

$$H\psi = E\psi \quad (2.36)$$

iz čega se vidi da konstanta E ima smisao ukupne energije. U algebarskoj terminologiji (2.36) je svojstveni problem hamiltonijana ali ovo ćemo detaljnije objasniti u sledećoj glavi.

Od para razdvojenih jednačina prva je jednostavna i njeno rešenje je

$$T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et}. \quad (2.37)$$

Druga, vremenski nezavisna Schrödinger-ova jednačina zavisi od oblika potencijala $U(\vec{r})$, tako da ne može da se reši dok ne preciziramo potencijal. Ako označimo njeno rešenje sa $\psi_E(\vec{r})$, dobijamo

$$\Psi_E(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi_E(\vec{r}), \quad (2.38)$$

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

partikularno rešenje koje opisuje stanje kvantnog sistema fiksirane energije E . Ovo stanje je stacionarno: njegova celokupna promena sa vremenom ogleda se isključivo 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 je linearna kombinacija partikularnih rešenja,

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \psi_n(\vec{r}) + \int c_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi_E(\vec{r}) dE. \quad (2.39)$$

Ono zavisi od vremena odnosno nije stacionarno jer su fazni faktori u sumi različiti. U izrazu (2.39) imamo dve vrste 'sabiranja' rešenja: u prvom sabirku to je po indeksu n , kada su vrednosti energije E_n , kao kod harmonijskog oscilatora, diskretne. Može međjutim da se desi da vrednosti u spektru energije budu i kontinualne (ili samo kontinualne, na primer kod slobodne čestice), 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 relativni udeo pojedinih sabiraka su proizvoljne. One su određene početnim uslovom, stanjem sistema u nekom zadatom trenutku npr. u $t = 0$. Činjenica da se iz proizvoljnog početnog stanja $\psi(\vec{r})$,

$$\psi(\vec{r}) \equiv \Psi(\vec{r}, 0) = \sum c_n \psi_n(\vec{r}) + \int c_E \psi_E(\vec{r}) dE, \quad (2.40)$$

mogu jednoznačno odrediti koeficijenti u razvoju c_n i c_E je veoma netrivialan matematički iskaz koji pre svega zahteva da bude preciznije definisan: ova formula odgovara, u linearnoj algebri, razvoju vektora po zadatom bazu. Mi naravno nećemo da ulazimo u odgovarajuće matematičke teoreme ali ćemo na primerima pokazati kako invertovanje formule (2.40) 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 diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu. Zbog toga se jedna od njenih posledica može napisati u obliku jednačine kontinuiteta $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0$. Naime, kompleksnom konjugacijom (2.30) dobijamo (potencijalna energija je realna funkcija, $U = U^*$),

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U \Psi^*, \quad (2.41)$$

pa kad (2.30) pomnožimo sa Ψ^* a (2.41) sa Ψ i oduzujemo imamo

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^* \Psi) - \frac{i\hbar}{2m} \text{div}(\Psi^* \text{grad } \Psi - \Psi \text{grad } \Psi^*) = 0. \quad (2.42)$$

U poslednjem izrazu prepoznamo jednačinu kontinuiteta kod koje su gustina i struja date sa

$$\rho = \Psi^* \Psi, \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (2.43)$$

Podsetimo se da je važenje jednačine kontinuiteta uvek vezano za zakon održanja: u mehanici fluida na primer održava se ukupna masa tečnosti, u elektrodinamici ukupno naelektrisanje. Konstanta kretanja koja se dobija iz (2.42) je integral

$$\int \rho dV. \quad (2.44)$$

Lako se vidi da on ne zavisi od vremena,

$$\frac{d}{dt} \int \rho dV = \int \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int \operatorname{div} \vec{j} dV = \oint \vec{j} \cdot d\vec{S} = 0. \quad (2.45)$$

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 (ili talasne funkcije) i struja na granici jednake nuli.

Jednačina kontinuiteta u kvantnoj mehanici je osnov njene statističke interpretacije. Gustina

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (2.46)$$

interpretira se kao gustina verovatnoće nalaženja čestice: $dP = \rho(\vec{r}, t) dV$ 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,

$$\int |\Psi(\vec{r}, 0)|^2 dV = 1, \quad (2.47)$$

onda se zbog (2.45) to normiranje u vremenu održava odnosno u svim kasnijim i prethodnim trenucima $\rho(\vec{r}, t)$ ima smisao: gustine raspodele 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.

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

$$\langle x \rangle = \int x \Psi^* \Psi dV, \quad (2.48)$$

a očekivana vrednost odgovarajuće komponente brzine v_x je

$$\langle v_x \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int x \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi dV + \int x \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dV. \quad (2.49)$$

Primenjujući Schrödinger-ovu jednačinu dobijamo

$$\frac{2mi}{\hbar} \langle v_x \rangle = \int x \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^2} \right) \Psi dV - \int x \Psi \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) dV. \quad (2.50)$$

Posle dve parcijalne integracije i odbacivanja površinskih članova dobijamo

$$\langle v_x \rangle = -\frac{i\hbar}{2m} \int (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}) dV = \int j_x dV. \quad (2.51)$$

Drugim rečima, veličina

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \text{grad } \Psi - \Psi \text{grad } \Psi^*)$$

je gustina struje verovatnoće jer određuje srednju vrednost brzine čestice; pomoću nje se u teoriji rasejanja opisuje fluks snopa čestica.

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 (2.47) daje i tip opadanja talasne funkcije u beskonačnosti: u jednoj dimenziji, $|\Psi|$ mora da opada brže nego $x^{-1/2}$ za $x \rightarrow \pm\infty$, dok u tri dimenzije $|\Psi|$ opada brže od $r^{-3/2}$ za $r \rightarrow \infty$.

2.4 SLOBODNA ČESTICA

Razmotrimo sada sa malo više detalja najjednostavniji fizički sistem, slobodnu česticu odnosno česticu koja se kreće van polja sile. Schrödinger-ova jednačina je

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi. \quad (2.52)$$

Sistem je 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 dokaže i to ćemo uraditi kasnije.

Ako stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E\psi \quad (2.53)$$

rešavamo u Descartes-ovom koordinatnom sistemu, onda možemo da razdvojimo i tri prostorne promenljive. Uvodjenjem smene

$$\psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z), \quad (2.54)$$

i ponavljanjem postupka razdvajanja dobijamo tri jednačine

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} = E_x X \quad (2.55)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y}{dy^2} = E_y Y \quad (2.56)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z}{dz^2} = E_z Z, \quad (2.57)$$

E_x, E_y, E_z su proizvoljne pozitivne konstante koje zadovoljavaju uslov $E_x + E_y + E_z = E$. Sve jednačine imaju isti oblik,

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{2mE_x}{\hbar^2} X = 0. \quad (2.58)$$

(2.58) je homogena diferencijalna jednačina sa konstantnim koeficijentima i zato su njena rešenja eksponencijalne funkcije. Pretpostavljajući

$$X = e^{ik_x x},$$

vidimo da k_x mora da zadovoljava

$$k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}, \quad (2.59)$$

tj. de Broglie-jevu disperzionu relaciju. Znači, imamo dva različita i nezavisna kvantna stanja $e^{ik_x x}$ i $e^{-ik_x x}$ za istu vrednost energije E_x : kažemo da je energija dvostruko degenerisana. Ova stanja su naravno ravni talasi:

$$\Psi_1(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_x t} X(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_x t} e^{ik_x x} \quad (2.60)$$

koji se prostire u pozitivnom smeru x -ose i

$$\Psi_2(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_x t} e^{-ik_x x} \quad (2.61)$$

koji se prostire u negativnom smeru.

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

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (2.62)$$

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

$$\int (e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{r}})^* e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{r}} dV = \int dV = \infty, \quad (2.63)$$

a 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 uvek su talasni paketi koji su manje ili više lokalizovani u prostoru i koji nemaju precizno određenu frekvencu, a ravni talasi (2.62) su matematička idealizacija koja je veoma korisna za račun ali i za intuiciju. Treba dodati da se u matematički strožem tretmanu korišćenje ravnih talasa (2.62) može opravdati činjenicom da, mada nefizička, ova stanja predstavljaju dobro definisan limes fizičkih stanja.

2.5 EVOLUCIJA GAUSS-OVOG PAKETA

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

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t + ikx} dk. \quad (2.64)$$

Da je izraz (2.64) 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 (2.64) je opšte rešenje: to znači da se stanje koje ima proizvoljnu početnu konfiguraciju $\psi(x) \equiv \Psi(x, 0)$ može prikazati u obliku (2.64),

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{ikx} dk, \quad (2.65)$$

pri čemu su koeficijenti $c(k)$ jednoznačno određeni. 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

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (2.66)$$

Fizička stanja uvek normiramo na jedinicu. Zato je uslov na koeficijente $c(k)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dk dk' c^*(k') c(k) e^{-i(k'-k)x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dk 2\pi |c(k)|^2 = 1. \quad (2.67)$$

Poslednju formulu kao i normalizaciju ravnih talasa ćemo izvesti u sledećoj glavi, pa ćemo videti da je Fourier-ove koeficijente nešto prirodnije uvesti

na simetričan način,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk, \quad \tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (2.68)$$

Talasnim paketom najčešće ne zovemo proizvoljnu funkciju $\psi(x)$, već funkcije koje su dobro lokalizovane tj. imaju relativno uzak maksimum za određenu vrednost položaja x_0 . Takve funkcije se dobijaju ako je i raspodela po talasnom broju, $c(k)$, lokalizovana oko određene 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 (2.64), $\phi = kx - \omega t$:

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \delta k}^{k_0 + \delta k} c(k) e^{-i\omega t + ikx} dk. \quad (2.69)$$

Izraz možemo da razmatramo i za proizvoljnu disperzionu relaciju, $\omega = \omega(k)$. Član $e^{i\phi}$ 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 pa je tu vrednost integrala najveća. Sledi, prema tome, da $\Psi(x, t)$ ima maksimum za

$$\frac{d}{dk}(kx - \omega t) = 0, \quad (2.70)$$

odnosno u tačkama

$$x = \frac{d\omega}{dk} t = v_g t. \quad (2.71)$$

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

$$\omega = ck, \quad \frac{d\omega}{dk} = c, \quad (2.72)$$

dok je kod slobodne kvantne čestice,

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}, \quad \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}. \quad (2.73)$$

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.

Problem koji rešavamo je kako sa vremenom evoluiru talasni paket koji u početnom trenutku ima oblik Gauss-ove raspodele,

$$\psi(x) = \Psi(x, 0) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x}. \quad (2.74)$$

Gauss-ova ili normalna raspodela je važna jer su mnoge pojave u fizici i prirodi njom opisane. Videćemo uskoro da, zbog relacija neodređenosti,

Gauss-ov paket predstavlja stanja slobodne kvantne čestice koja su najpribližnija klasičnom opisu. Gustina verovatnoće je

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = |A|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} \quad (2.75)$$

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

$$|A|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}; \quad (2.76)$$

i možemo da uzmemo da je A pozitivan broj,

$$A = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}}. \quad (2.77)$$

Gauss-ov paket Kada nacrtamo gustinu verovatnoće, vidimo da je raspodela (2.75) funkcija zvonastog oblika, simetrična oko svog maksimuma u nuli. Izračunajmo srednju vrednost i disperziju položaja u stanju (2.74). Za srednju vrednost koordinate dobijamo

$$\langle x \rangle = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = 0, \quad (2.78)$$

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

$$\langle x^2 \rangle = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = \frac{a^2}{2}. \quad (2.79)$$

Prema tome za disperziju koordinate se dobija

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2}{2}. \quad (2.80)$$

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

Za gustinu struje imamo

$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) = \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}}, \quad (2.81)$$

a integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} j(x) dx = \frac{\hbar k_0}{m} = v_0 \quad (2.82)$$

daje srednju brzinu talasnog paketa.

Da bismo odredili kako Gauss-ov paket evoluirá treba da nadjemo talasnu funkciju u kasnijim trenicima, $\Psi(x, t)$. Za to je dovoljno da odredimo koeficijente $c(k)$ iz (2.64) u bilo kom npr. početnom trenutku jer rekli smo, koeficijenti ne zavise od vremena. $c(k)$ se dobija inverznom Fourier-ovom transformacijom (2.66) funkcije $\psi(x)$, u našem slučaju:

$$c(k) = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x} e^{-ikx} dx. \quad (2.83)$$

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

$$c(k) = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2}. \quad (2.84)$$

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

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t + ikx} dk = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t + ikx} e^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2} dk. \quad (2.85)$$

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

$$\Psi(x, t) = A e^{-\frac{a^2 k_0^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}} e^{-\frac{(x - ia^2 k_0)^2}{2a^2} \frac{1}{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}}, \quad (2.86)$$

a odgovarajuća gustina verovatnoće je

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} e^{-\frac{(x - v_0 t)^2}{a^2} \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}}. \quad (2.87)$$

Ako izračunamo srednje vrednosti $\langle x(t) \rangle$ i $\langle x(t)^2 \rangle$ vidimo da se vrh talasnog paketa, u skladu sa (2.82), kreće brzinom v_0 : $\langle x(t) \rangle = v_0 t$. Uz to, talasni paket se širi jer disperzija koordinate raste,

$$(\Delta x(t))^2 = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right). \quad (2.88)$$

Gauss-ov paket je jedno od karakterističnih stanja slobodne čestice pa ćemo se na njemu zadržati da razmotrimo još neke od detalja 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 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 određeni rezultat 1 a za sve ostale 0, ali po pravilu rezultati će se u pojedinačnim merenjima 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 trenucima. (Naravno, često ne umemo tačno da rešimo jednačinu, ali ovo pitanje je tehničko a ne principijelno.) Samim tim znamo i raspodelu verovatnoće u svakom trenutku, tj. možemo jednoznačno da predvidimo sve eksperimentalne rezultate.

Jasno je kako se iz gustine verovatnoće $\rho(\vec{r})$ računa 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} :

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \int \Psi^* f(\vec{r}) \Psi d^3r. \quad (2.89)$$

Medjutim, kako se u opštem slučaju određuje srednja vrednost brzine ili impulsa i njihovih funkcija? Jednačina kontinuiteta nas upućuje na veličinu koja daje srednju vrednost brzine i već smo je koristili,

$$\langle \vec{v} \rangle = \int \vec{j} d^3r, \quad (2.90)$$

odnosno

$$\langle \vec{p} \rangle = m \langle \vec{v} \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \int (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) d^3r. \quad (2.91)$$

Da bismo poslednju jednačinu napisali u obliku sličnom (2.89), drugi sabirak parcijalno integralimo,

$$\int \Psi \nabla \Psi^* d^3r = - \int (\nabla \Psi) \Psi^* d^3r + \oint \text{div}(\Psi \Psi^*) d\vec{S} \quad (2.92)$$

i odbacimo površinski član koji je nula jer je vrednost talasne funkcije u asimptotskoj oblasti nula. Prema tome

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \Psi^* (-i\hbar \nabla) \Psi d^3r. \quad (2.93)$$

Oblik ove očekivane vrednosti analogan je sa (2.89)

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \Psi^* \hat{p} \Psi d^3r, \quad (2.94)$$

ako impulsu pridružimo operator nabra,

$$\vec{p} \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \nabla, \quad (2.95)$$

što je identično pravilu koje smo koristili za ravne talase. Uopštavajući, imamo npr.

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

gde je Δ Laplace-ov operator.

U slučaju jedne dimenzije je

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

pa možemo da izračunamo srednju vrednost i neodredjenost impulsa za Gauss-ov paket (2.74) u početnom trenutku. U skladu sa onim što smo već dobili,

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

Srednja vrednost kvadrata impulsa je

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

tako da je disperzija

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

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

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (2.101)$$

U nastavku ćemo videti 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 minimalan nazivaju se koherentna stanja.

2.6 PROLAZ KROZ POTENCIJALNU BARIJERU, KOEFIČIJENTI 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 x tj. diferencijalna jednačina ima konstantne koeficijente. Na sličan način možemo dobiti rešenja i kad potencijal $U(x)$ nije svuda konstantan već ‘deo po deo’, na intervalima x -ose. Ovakvi potencijali predstavljaju dobru ili bar prvu

aproximaciju za mnoge fizičke probleme i na njima možemo da upoznamo neke od najvažnijih karakteristika kvantnog opisa sistema.

Prvi problem koji ćemo na ovaj način analizirati je problem rasejanja čestice na potencijalnoj barijeri oblika

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 < x < a \\ 0, & x > a. \end{cases} \quad (2.102)$$

Potencijalna barijera Već smo videli šta je tipična postavka problema rasejanja: pretpostavlja se da na metu opisanu potencijalom $U(x)$ pada upadni snop čestica emitovan u početnom trenutku $t = -\infty$. Potencijal $U(x)$ je lokalizovan oko ‘centra rasejanja’ (npr. tačke $x = 0$), što znači da je $U(x) \neq 0$ samo u određenom delu prostora linearne dimenzije a , $|x| < a$. Izvor čestica se nalazi na velikom rastojanju od mete gde je potencijal nula, pa se može uzeti da se upadni snop asimptotski kreće pravolinijski, odnosno da ima dobro definisan impuls: kvantno, talasna funkcija upadnog snopa ψ_u je ravan talas. Pri sudaru sa metom talasna funkcija se menja, a u trenutku detekcije $t = +\infty$ rasejani talas može da se razvije po ravnim talasima i taj razvoj, kao što ćemo videti kasnije, daje diferencijalni presek rasejanja.

Pošto u jednoj dimenziji imamo samo dva moguća ugla rasejanja, 0 i π , efikasni presek rasejanja je opisan sa dve vrednosti: koeficijentom transmisije (prolaza) i koeficijentom refleksije (odbijanja) snopa. 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: zato tražimo rešenje stacionarne Schrödinger-ove jednačine za fiksiranu 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 tražimo da je talasna funkcija neprekidna. Ovaj uslov je fizički i znači da raspodela verovatnoće u bliskim tačkama ne sme mnogo da se razlikuje. Drugi uslov je uslov neprekidnosti prvog izvoda talasne funkcije, i on direktno sledi iz Schrödinger-ove jednačine: izvešćemo ga u jednodimenzionom slučaju. Razmotrimo ponašanje rešenja $\psi(x)$ u proizvoljnoj tački x ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (2.103)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} \psi''(x) dx + \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} U(x)\psi(x) dx = E \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} \psi(x) dx, \quad (2.104)$$

i oceniti vrednosti pojedinih sabiraka. Vrednost prvog integrala je

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

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

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

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

(Teorema o srednjoj vrednosti 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 $U(x)$ i talasna funkcija $\psi(x)$ u razmatranom intervalu konačni.) U limesu $\epsilon \rightarrow 0$, drugi i treći član se anuliraju i iz (2.104) dobijamo

$$\psi'(x+0) = \psi'(x-0), \quad (2.108)$$

odnosno, prvi izvod talasne funkcije mora biti neprekidan. Videćemo da kod potencijala koji imaju beskonačan skok, na primer za $U(x) = U_0\delta(x)$, 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

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

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

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

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

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

Rešavaćemo prvo 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,

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

Konačno, jednačina se u oblasti III, $x > a$, rešava isto kao u oblasti I. Za ukupnu talasnu funkciju dobijamo

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

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

U rešenju (2.113), odnosno u

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

nije teško prepoznati šta je upadni, a šta reflektovani i transmitovani talas. Kao što smo rekli, relevantan je oblik u asimptotskim oblastima $x = \pm\infty$, i dalje, znamo da su sabirci proporcionalni sa e^{ikx} ravni talasi koji imaju impuls $\hbar k$ tj. kreću se 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

$$\psi_u = Ae^{ikx}, \quad \psi_r = Be^{-ikx}, \quad \psi_t = Fe^{ikx} \quad (2.115)$$

i nametnemo granični uslov $G = 0$, jer u postavci problema nema talasa koji se iz $x = +\infty$ kreće ulevo: izvor snopa čestica je u $x = -\infty$. Uslovi neprekidnosti u $x = 0$ i $x = a$ glase

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

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

$$\begin{aligned} A + \alpha B &= e^{-\kappa a + ika} F \\ A + \frac{1}{\alpha} B &= e^{\kappa a + ika} F, \end{aligned} \quad (2.117)$$

pa iz poslednje dve jednačine dobijamo

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

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

Koeficijent transmisije dat je odnosom gustina struja verovatnoće,

$$T = \frac{|j_t|}{|j_u|}, \quad (2.120)$$

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

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

Odavde dobijamo da je

$$T = \frac{k|F|^2}{k|A|^2} = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 \cosh^2 \kappa a + (\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2 \kappa a} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \kappa a}, \quad (2.122)$$

i slično za koeficijent refleksije,

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

Da proanaliziramo dobijeni rezultat. Rešavanjem Schrödinger-ove jednačine za potencijalnu barijeru (2.102) nismo dobili nikakav poseban uslov 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 kroz barijeru, zadali smo granični uslov $G = 0$ i odredili konstante B i F . Poslednja konstanta A naravno ne može se odrediti iz uslova neprekidnosti nego je zadata normalizacijom. Na osnovu toga izračunali smo koeficijente refleksije i transmisije R i T ; kao što se odmah vidi, $R + T = 1$. Upadni talas se delom reflektuje a delom prolazi kroz barijeru, a ukupni fluks se održava. Ali ono što je interesantno i novo je da čestica može da prodje kroz barijeru i u slučaju $E < U_0$, što je u klasičnoj mehanici nemoguće! Ovaj, tipično kvantni, fenomen naziva se tunel efekt, i veoma je važan za objašnjenje mnogih pojava u fizici, na primer α -raspada jezgra. Naravno, kada je $U_0 \gg E$ koeficijent prolaza je mali,

$$T \approx \frac{4E}{U_0 \sinh^2 \kappa a}. \quad (2.123)$$

Koeficijent transmisije T , osim odnosa U_0 i E , zavisi i od širine barijere a . Izvedimo približnu formulu koja važi u slučaju kada je $\kappa a \gg 1$, tj. $\sinh \kappa a \approx \cosh \kappa a \approx \frac{1}{2} e^{\kappa a}$. Tada je

$$T \approx \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} a}. \quad (2.124)$$

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

2.7 POTENCIJALNE JAME

Sledeći fizički sistem koji ćemo modelovati deo po deo konstantnim potencijalom je vezujući potencijal, potencijalna jama. Razmatraćemo prvo slučaj

kad je potencijalna jama beskonačno duboka tj. kada je potencijal

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, a) \\ \infty, & x \notin (0, a) \end{cases}. \quad (2.125)$$

Ovakav potencijal opisuje jednodimenzionu “kutiju” u kojoj je čestica lokalizovana, ili zatvorena. Schrödinger-ova jednačina je u intervalu $(0, a)$ ista kao jednačina za slobodnu česticu:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi \quad (2.126)$$

Beskonacno duboka jama i ima rešenja

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = \alpha \sin kx + \beta \cos kx, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (2.127)$$

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

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0, \quad (2.128)$$

odnosno $\beta = 0$, $ka = n\pi$. Rešenja Schrödinger-ove jednačine su stojeći talasi: posle normiranja dobijamo stacionarna stanja

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad (2.129)$$

kojima odgovaraju vrednosti energije

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2. \quad (2.130)$$

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

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

$$V(x, y) = U(x) + U(y) = \begin{cases} 0, & x \in (0, a) \wedge y \in (0, a) \\ \infty, & x \notin (0, a) \vee y \notin (0, a) \end{cases} \quad (2.131)$$

gde je U dato sa (2.125). Ovo je dvodimenziona kvadratna kutija. Stacionarna Schrödinger-ova jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + V\psi = E\psi, \quad (2.132)$$

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

$$\psi(x, y) = X(x)Y(y). \quad (2.133)$$

Tada za X i Y dobijamo jednačine

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} + U(x)X = E_1 X, \quad (2.134)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y}{dy^2} + U(y)Y = E_2 Y, \quad (2.135)$$

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

$$\psi_{n_1, n_2}(x, y) = \frac{\pi}{a} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{a}. \quad (2.136)$$

Ovo rešenje ima energiju

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2). \quad (2.137)$$

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

$$\psi_{1,1} = \frac{\pi}{a} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi y}{a}, \quad E_{1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}, \quad (2.138)$$

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

$$\psi_{1,2} = \frac{\pi}{a} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi y}{a}, \quad \psi_{2,1} = \frac{\pi}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} \sin \frac{\pi y}{a}. \quad (2.139)$$

Drugo pobudjeno stanje je opet nedegenerisano, ali na primer energija $\frac{50}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$ je trostruko degenerisana jer joj odgovaraju tri kvantna stanja: $\psi_{1,7}$, $\psi_{7,1}$ i $\psi_{5,5}$ (to jest, $1+49=49+1=25+25$).

Jednostavan model beskonačno duboke jame možemo da uporedimo sa nešto realističnijim modelom vezujućeg potencijala, potencijalnom jamom konačne dubine. Potencijalna energija u ovom slučaju može se prikazati kao

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, a) \\ U_0, & x \notin (0, a) \end{cases}. \quad (2.140)$$

Konačna potencijalna jama

Schrödinger-ovu jednačinu rešavamo na već uobičajeni način, zasebno u svakoj od tri oblasti, $x < 0$, $0 < x < a$, $x > a$, a onda dobijene funkcije glatko

spajamo. Ako tražimo rešenja koja su unutar potencijalne jame odnosno imaju energiju $E < U_0$, dobijamo funkciju oblika

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, & x < 0, & \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \\ C \sin kx + D \cos kx, & x \in (0, a), & k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ Ge^{\kappa x} + Fe^{-\kappa x}, & x > a, & \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \end{cases}. \quad (2.141)$$

Pošto talasna funkcija ne sme eksponencijalno da raste u asimptotskim oblastima $x \rightarrow \pm\infty$, granični uslov je $B = 0$, $G = 0$.

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

$$A = D, \quad (2.142)$$

$$\kappa A = kC, \quad (2.143)$$

$$C \sin ka + D \cos ka = Fe^{-\kappa a}, \quad (2.144)$$

$$k(C \cos ka - D \sin ka) = -\kappa Fe^{-\kappa a}. \quad (2.145)$$

Ako u poslednje dve jednačine zamenimo prve dve, dobijamo dva rešenja za F ,

$$F = Ae^{\kappa a} \left(\frac{\kappa}{k} \sin ka + \cos ka \right) = -Ae^{\kappa a} \frac{k}{\kappa} \left(\frac{\kappa}{k} \cos ka - \sin ka \right) \quad (2.146)$$

koja moraju biti jednaka. Uslov konzistentnosti je

$$\left(\frac{\kappa}{k} \right)^2 \tan ka + 2 \frac{\kappa}{k} - \tan ka = 0, \quad (2.147)$$

odnosno

$$\tan ka = \frac{2 \frac{\kappa}{k}}{1 - \left(\frac{\kappa}{k} \right)^2}, \quad \tan \frac{ka}{2} = \frac{\kappa}{k}. \quad (2.148)$$

Pre nego što predjemo na rešavanje poslednje jednačine, nekoliko opštih napomena. Sistem (2.143-2.145) je sistem od četiri linearne homogene jednačine, i ima netrivialno rešenje samo ako mu je determinanta jednaka nuli. To naravno znači da nisu sve jednačine nezavisne, nego da ćemo u rešenju tri konstante, npr. C , D , F , moći da izrazimo preko četvrte, A , koja ostaje neodređena. Uslov da je determinanta nula daje vezu izmedju k , κ i a , odnosno to je jednačina koja određuje energiju E i daje njeno kvantovanje. Treba da zapazimo da ova jednačina postoji samo kada tražimo vezana stanja tj. rešenja koja su unutar potencijalne jame: ako je $E > U_0$, rešenja u sve tri oblasti imaju oblik ravnih talasa odnosno trigonometrijskih funkcija, i u principu nema razloga da namećemo uslov $B = 0$, $G = 0$; ako rešavamo problem rasejanja na potencijalnoj jami, možemo kao u prethodnom poglavlju staviti samo $G = 0$. Znači, za $E > U_0$ dobija se sistem

od četiri jednačine sa šest (ili pet) 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 (U_0, ∞) .

Ali vratimo se na određivanje dozvoljenih vrednosti energije za $0 < E < U_0$. Imamo da je $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $\kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$, tako da jednačina (2.148) zapisana po promenljivoj E glasi

$$\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} = \tan(c\sqrt{E}), \quad (2.149)$$

gde je $c = \sqrt{\frac{ma^2}{2\hbar^2}}$. Jednačina je transcendentna, i možemo da je rešavamo ili numerički ili grafički: pošto nam ne trebaju tačne vrednosti rešenja nego samo njihova egzistencija i broj, koristićemo drugi metod. Metod se sastoji u tome da se na grafiku nacrtaju dve funkcije, jedna koja je jednaka levoj strani jednačine i druga koja je jednaka desnoj, i gledaju njihovi preseki. U našem slučaju sa leve strane je funkcija koja ima ponašanje slično hiperboli, definisana je samo u intervalu $(0, U_0)$ 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 između 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 tački $E = 0$), i drugo, da je broj preseka konačan jer je interval promene promenljive E ograničen. U principu broj rešenja može tačno da se utvrdi i zavisi od odnosa dubine i širine potencijalne jame, U_0 i a .

Konačna pot. jama, rešenja za energiju

Znači, energija čestice unutar potencijalne jame je kvantovana tj. ima diskretne vrednosti, a energetske nivoa i odgovarajućih stanja ima konačno mnogo. Spektar energije sastoji se od nekoliko tačaka između 0 i U_0 i kontinualnog intervala $(U_0, +\infty)$. Ovo je osnovna razlika u odnosu na beskonačno duboke potencijale kod kojih vezanih stanja ima beskonačno mnogo.

Spektar, konačna jama

Odredimo još za konačno duboku potencijalnu jamu koeficijent transmisije pri rasejanju. To znači da pretpostavljamo da je $E > U_0$, a rešenje kao i ranije uzimamo u obliku

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}, & x < 0, & k = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & x \in (0, a), & k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ Fe^{ikx}, & x > a, & k = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} \end{cases}. \quad (2.150)$$

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

$$A + B = C + D, \quad (2.151)$$

$$\frac{k'}{k} (A - B) = C - D, \quad (2.152)$$

$$Ce^{ika} + De^{-ika} = Fe^{ik'a}, \quad (2.153)$$

$$Ce^{ika} - De^{-ika} = \frac{k'}{k} Fe^{ik'a}. \quad (2.154)$$

Ove jednačine možemo da rešimo i da izrazimo konstante B i F preko A . Dobija se

$$\frac{A}{Fe^{ik'a}} = \cos ka - i \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin ka, \quad (2.155)$$

pa je koeficijent transmisije

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 \cos^2 ka + (k^2 + k'^2)^2 \sin^2 ka}. \quad (2.156)$$

Ovaj rezultat može se u stvari dobiti i iz (2.120) zamenom $k \rightarrow k'$, $\kappa \rightarrow ik$, tj. $\cosh \kappa a \rightarrow \cos ka$, $\sinh \kappa a \rightarrow i \sin ka$. Transmisija, konačna jama

Zavisnost koeficijenta transmisije od energije E/U_0 data je na slici. Osim od proizvoda ka on zavisi i od $(k^2 + k'^2)/2kk' = (1 + \frac{U_0}{2E})/\sqrt{1 + \frac{U_0}{E}}$ koji teži jedinici za velike vrednosti energije, pa je tada kao što i očekujemo barijera prozirna, $T \rightarrow 1$. Maksimumi koeficijenta transmisije $T = 1$, dobijaju se za vrednosti koje odgovaraju diskretnim nivoima energije čestice u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami, $ka = n\pi$ i nazivaju se kvazidiskretni nivoi ili rezonance. Za male vrednosti E to su uski i izraženi pikovi. Kasnije ćemo videti da, u analizi rasejanja u tri dimenzije, rezonance opisuju dugoživeća stanja.

2.8 OSOBINE JEDNODIMENZIONIH SISTEMA

Ovo poglavlje sumira i sistematizuje osobine talasnih funkcija koje smo u primerima do sada dobili. U stvari od osobina koje ćemo navesti samo su (5) i (6) 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.

(1) 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. Takođe, iz Schrödinger-ove jednačine smo

izveli da je, ako su skokovi potencijala konačni, neprekidan i prvi izvod talasne funkcije. To smo dobili integrirajući Schrödinger-ovu jednačinu u malom intervalu $(x - \epsilon, x + \epsilon)$ oko proizvoljne tačke x :

$$-\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} \frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) dx + \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} U(x)\psi(x) dx = \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} E\psi(x) dx. \quad (2.157)$$

Ovaj metod daje rezultat i ako potencijal ima beskonačan skok npr. tipa δ -funkcije, $U(x) = -U_0 \delta(x - a)$. $\delta(x)$ 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 precizno definisati je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) f(x) dx = f(a). \quad (2.158)$$

Dakle, kad jednačinu (2.157) integralimo u okolini tačke a dobija se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(a + 0) - \psi'(a - 0)) - U_0 \psi(a) = 0, \quad (2.159)$$

odnosno i prvi izvod talasne funkcije ima skok čija je vrednost

$$\psi'(a + 0) - \psi'(a - 0) = -\frac{2mU_0}{\hbar^2} \psi(a). \quad (2.160)$$

Mada su potencijali dati preko δ -funkcije očigledno, strogo gledano, nefizički, zbog svoje jednostavnosti su veoma zgodni kao modeli određenih fizičkih interakcija.

(2) Druga matematička činjenica koja sledi iz zahteva kvadratne integrabilnosti talasne funkcije je da talasna funkcija 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.

(3) 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 stacionarne Schrödinger-ove jednačine važi

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* E \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + U(x)\psi \right) dx. \quad (2.161)$$

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

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 dx + \int_{-\infty}^{+\infty} U|\psi|^2 dx \geq U_{min} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = U_{min}. \quad (2.162)$$

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

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi'' dx = \frac{\hbar^2}{2m} (-\psi^* \psi'|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 dx) \geq 0. \quad (2.163)$$

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 između najmanje i najveće eksperimentalno merljive vrednosti te opservable.

(4) Prodiskutujemo još jednom šta su u kvantnoj mehanici vezana a šta slobodna stanja, uzimajući za potencijalnu energiju funkciju $U(x)$ kao na slici – neka ona na primer ima sa desne strane asimptotu U_0 a sa leve teži u beskonačnost. Vezana stanja U klasičnoj mehanici oblast kretanja čestice ograničena je tačkama a i b u kojima se $U(x)$ preseca sa pravom $E = \text{const}$, $U(a) = E = U(b)$ jer, zbog održanja energije, u ovim tačkama kinetička energija i brzina čestice postaju nula pa se čestica zaustavlja i odbija. 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, $E < U_0$, ovo prodiranje u barijeru je malo jer verovatnoća prolaza eksponencijalno opada sa rastojanjem. To možemo da proverimo rešavajući Schrödinger-ovu jednačinu u asimptotskoj oblasti $x \rightarrow +\infty$ u kojoj $U(x) \rightarrow U_0$. Tu se jednačina svodi na

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + U_0 \psi = E \psi, \quad (2.164)$$

pa je asimptotsko rešenje $\psi \approx e^{-\kappa x}$ gde je $\kappa^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$, i ono teži nuli za $x \rightarrow \infty$. Verovatnoća da česticu nadjemo daleko od potencijalne jame je nula: stanje je vezano a kretanje čestice je lokalizovano. Ako je međjutim $E > U_0$, stanje je asimptotski opisano funkcijom $\psi \approx e^{ikx}$ za $k^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}$ odnosno ravnim talasom, i čestica može da ode beskonačno daleko. Karakter stanja određen je njegovim asimptotskim ponašanjem.

Slede dve osobine vezanih stanja karakteristične za jednodimenzione sisteme.

(5) 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 prepíšemo kao

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}, \quad (2.165)$$

odnosno

$$\psi_1''(x)\psi_2(x) - \psi_2''(x)\psi_1(x) = 0. \quad (2.166)$$

Ako poslednju relaciju integralimo od $-\infty$ do x , koristeći pri tom da je asimptotska vrednost ψ_1 i ψ_2 nula, dobijamo

$$\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = \text{const} = 0, \quad (2.167)$$

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

$$\log \psi_1 = \log \psi_2 + C \quad (2.168)$$

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

(6) Oscilaciona teorema: Talasna funkcija kojom je opisano n -to pobudjeno stanje energije ima n nula. Ovu teoremu nećemo dokazivati mada smo na primerima već videli da važi: kod harmonijskog oscilatora n -to pobudjeno stanje proporcionalno je Hermité-ovom polinomu n -tog reda H_n koji ima n realnih nula; kod beskonačno duboke potencijalne jame n -to pobudjeno stanje dato je talasnom funkcijom $\psi_{n+1} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{(n+1)\pi x}{a}$.

2.9 ★ KRONIG-PENNEY-JEV MODEL:

ENERGIJA PROVODNIH ELEKTRONA

Kronig-Penney-jev 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 možemo da modelujemo na različite načine, na primer pomoću deo-po-deo konstantnog potencijala; još jednostavnije je da se pretpostavi da je u svakom čvoru rešetke potencijal oblika privlačne δ -funkcije. Rešetka je jednodimenziona i ima period a ,²

$$U(x) = -U_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na), \quad (2.169)$$

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

$$\psi(x) = \alpha_n e^{ikx} + \beta_n e^{-ikx}, \quad x \in (na, (n+1)a), \quad (2.170)$$

²U poglavlju o simetrijama videćemo da je oblik talasne funkcije kod periodičnih sistema u velikoj meri fiksiran translacionom simetrijom.

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 onda x_n iamju isti interval promene, $x_n \in (0, a)$. Imamo

$$\psi(x) = \alpha_n e^{ik(na+x_n)} + \beta_n e^{-ik(na+x_n)} = A_n e^{ikx_n} + B_n e^{-ikx_n}, \quad (2.171)$$

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 (2.171) ista geometrijska tačka zadata je vrednostima $x_n = a$ i $x_{n+1} = 0$. Uslov neprekidnosti talasne funkcije u ovoj tački je

$$A_n e^{ika} + B_n e^{-ika} = A_{n+1} + B_{n+1}, \quad (2.172)$$

a uslov za skok prvog izvoda (2.160),

$$ik(A_{n+1} - B_{n+1}) - ik(A_n e^{ika} - B_n e^{-ika}) = -\frac{2mU_0}{\hbar^2}(A_{n+1} + B_{n+1}). \quad (2.173)$$

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

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ika} \left(1 - \frac{imU_0}{\hbar^2 k}\right) & -\frac{imU_0}{\hbar^2 k} e^{-ika} \\ \frac{imU_0}{\hbar^2 k} e^{ika} & e^{ika} \left(1 + \frac{imU_0}{\hbar^2 k}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \mathcal{A} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \quad (2.174)$$

gde je \mathcal{A} ,

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} e^{-ika} \left(1 - \frac{imU_0}{\hbar^2 k}\right) & -\frac{imU_0}{\hbar^2 k} e^{-ika} \\ \frac{imU_0}{\hbar^2 k} e^{ika} & e^{ika} \left(1 + \frac{imU_0}{\hbar^2 k}\right) \end{pmatrix}. \quad (2.175)$$

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

$$\begin{pmatrix} A_{-n} \\ B_{-n} \end{pmatrix} = \mathcal{A}^n \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathcal{A}^{-n} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (2.176)$$

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

$$\det(\mathcal{A} - \lambda I) = 0 \quad (2.177)$$

je, kada se zameni (2.175),

$$\lambda^2 - 2\lambda \left(\cos ka - \frac{mV_0}{\hbar^2 k} \sin ka\right) + 1 = 0, \quad (2.178)$$

odnosno

$$\lambda^2 - 2b\lambda + 1 = 0 \quad (2.179)$$

za

$$b = \cos ka - \frac{mV_0}{\hbar^2 k} \sin ka. \quad (2.180)$$

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 je $\lambda_{1,2} = e^{\pm i\beta}$.

Uslov $|b| \leq 1$, Kronig-Penney rešenja

$$-1 \leq \cos ka - \frac{mV_0}{k\hbar^2} \sin ka \leq 1 \quad (2.181)$$

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

$$\cos ka - 1 \leq \frac{mV_0}{a\hbar^2} \frac{\sin ka}{ka}. \quad (2.182)$$

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

$$f(\xi) = \cos \xi - 1, \quad g(\xi) = \frac{mV_0}{a\hbar^2} \frac{\sin \xi}{\xi}, \quad (2.183)$$

rešenja nejednakosti (2.182) 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,

$$\frac{mV_0}{a\hbar^2} \frac{\sin \xi}{\xi} \leq \cos \xi + 1. \quad (2.184)$$

Presek dva skupa dozvoljenih vrednosti E daje spektar energije provodnih elektrona i kao što se vidi, ovaj spektar se sastoji od intervala odnosno ima zonsku strukturu.

2.10 WKB APROKSIMACIJA

WKB aproksimacija daje jednu od veza kvantne mehanike sa klasičnom, odnosno njen semiklasični limes, a ime je dobila po Wentzel-u, Kramers-u i Brillouin-u koji su ovu aproksimaciju izveli i analizirali u radovima iz 1926. godine. Klasični limes kvantne mehanike definiše se uslovom $\hbar \rightarrow 0$, odnosno uslovom da je Planck-ova konstanta ‘mala’, mala u odnosu na vrednosti dejstva (jer dimenziono, \hbar je dejstvo) koje su karakteristične za zadati fizički problem. Semiklasična aproksimacija je aproksimacija do linearnog člana u razvoju po \hbar . Već na osnovu onoga što smo do sada naučili je jasno da se kvantni opis dosta razlikuje od klasičnog pa limes $\hbar \rightarrow 0$ nije tako jednostavno izvesti kao npr. nerelativistički limes u specijalnoj teoriji relativnosti:

u sledećoj glavi videćemo da je matematički opis klasične i kvantne mehanike potpuno različit, i zato je ova veza netrivialna. Medjutim, slično kao kod WKB aproksimacije uspostavlja se i veza između talasne i geometrijske optike: geometrijska optika je limes talasne optike (odnosno elektrodinamike) kada su talasne dužine ravnih talasa zanemarljivo male³.

Razmatramo stacionarnu Schrödinger-ovu jednačinu u jednoj dimenziji,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (E - U(x))\psi(x) = 0, \quad (2.185)$$

koju uvodjenjem 'klasičnog impulsa' $p(x)$,

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U(x))} = \frac{p(x)}{\hbar} \quad (2.186)$$

možemo da prepisemo u obliku

$$\psi'' + k^2(x)\psi = 0. \quad (2.187)$$

Za slobodnu česticu rešenja ove jednačine su ravni talasi

$$\psi = e^{\pm \frac{i}{\hbar} px}, \quad (2.188)$$

pa ćemo i za opšti slučaj jednačine (2.185) uvesti talasnu funkciju istog oblika,

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}. \quad (2.189)$$

Nova nepoznata funkcija S treba da bude rešenje jednačine

$$i\hbar S'' - S'^2 + 2m(E - U) = 0. \quad (2.190)$$

Pretpostavljajući da se S može razviti u red po malom parametru \hbar ,

$$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \frac{\hbar^2}{i^2} S_2(x) + \dots, \quad (2.191)$$

zamenom u jednačinu i izjednačavanjem članova uz iste stepene \hbar dobijamo

$$(S'_0)^2 - 2m(E - U) = 0, \quad (2.192)$$

$$S''_0 + 2S'_0 S'_1 = 0, \quad (2.193)$$

$$S''_1 + (S'_1)^2 + 2S'_0 S'_2 = 0, \quad (2.194)$$

i tako dalje, niz rekurentnih jednačina. Dati sistem može se rešavati rekurentno, red po red. U nultom redu, za S_0 dobijamo

$$S_0 = \pm \int \sqrt{2m(E - U(x))} dx = \pm \int p dx. \quad (2.195)$$

³ *Principles of Optics*, M. Born, E. Wolf, Pergamon Press, 1964. Slična tzv. 'aproksimacija visokih frekvenci' koristi se i u drugim oblastima fizike za dobijanje disperzionih relacija, npr. kod gravitacionih talasa.

Koristeći ovo rešenje možemo da rešimo prvi red, (2.193),

$$S_1 = -\frac{1}{2} \log S'_0 + \text{const} = -\frac{1}{2} \log p. \quad (2.196)$$

Prema tome, ukupno rešenje u prvom redu po \hbar je

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p dx} + \frac{c_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p dx}. \quad (2.197)$$

Druga korekcija, S_2 , može se dobiti iz (2.194) zamenom sada poznatih funkcija S_0 i S_1 . Zapravo, sličnom smenom u vremenski zavisnoj talasnoj funkciji

$$\Psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)} \quad (2.198)$$

mogli smo da rešavamo vremenski zavisnu Schrödinger-ovu jednačinu. U tom slučaju dobili bismo

$$S(x, t) = -Et + S(x), \quad (2.199)$$

a zamena funkcije (2.198) u Schrödinger-ovu jednačinu daje

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \Delta S + U. \quad (2.200)$$

Za $\hbar = 0$ ovo je Hamilton-Jacobi-jeva jednačina klasične mehanike koja ima rešenje $S = -Et + S_0$. Znači, zapisana preko faze talasne funkcije, Schrödinger-ova jednačina se za $\hbar = 0$ svodi na klasičnu Hamilton-Jacobi-jevu jednačinu. Pri tome je faza u prvoj aproksimaciji proporcionalna klasičnom dejstvu sistema, S/\hbar .

Rešenje (2.197) zapisano je za slučaj čestice koja ima energiju veću od maksimuma potencijala, tj. kada je kretanje čestice slobodno. Međutim jednačinu bismo na isti način rešavali i za slučaj $E < U_{max}$, samo bi rešenje onda bilo izraženo preko eksponencijalnih funkcija:

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p| dx} + \frac{c_2}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int |p| dx}. \quad (2.201)$$

Interesantno je pitanje kako se navedena dva rešenja glatko spajaju kad rešavamo kretanje čestice koja nailazi na potencijalnu barijeru. Tehnički, problem je u tome što u tački a u kojoj bi se čestica klasično zaustavila, $E = U(a)$, ne možemo da primenimo WKB aproksimaciju, pa ni izraze (2.197) i (2.201). Ovo se lako proverava: uslov pod kojim smo dobili rešenje je

$$\frac{\hbar S''}{S'^2} \ll 1. \quad (2.202)$$

Kad izračunamo levu stranu ove nejednakosti za S_0 dobijamo

$$\frac{\hbar S''_0}{S'^2_0} = \frac{\hbar m U'}{p^3}, \quad (2.203)$$

što očigledno nije malo u okolini tačke $p = 0$. Pažljivom analizom uslova spajanja dobija se da se pri prolaski kroz barijeru menja faza talasne funkcije: odgovarajuće pravilo može da se formuliše kao zamena

$$\frac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int p dx} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \left| \int p dx \right| - \frac{\pi}{4}\right). \quad (2.204)$$

2.11 DODATAK

2.11.1 FROBENIUS-OV METOD

Jedan od metoda za rešavanje linearnih diferencijalnih jednačina drugog reda je Frobenius-ov metod, i on omogućava da se nadju rešenja u obliku razvoja u Taylor-ov red. Zapravo, u jednačinama koje se sreću u matematičkoj fizici najčešće imamo ‘modifikovani’ Taylor-ov red, tj. razvoj u stepeni red pomnožen nekom jednostavnom funkcijom koja se može dobiti ispitivanjem asimptotskog ponašanja rešenja. To je i način koji smo primenili pri rešavanju Schrödinger-ove jednačine za harmonijski oscilator.

Frobenius-ov metod može se primeniti se na jednačinu oblika

$$x^2 y'' + xp(x)y' + q(x)y = 0, \quad (2.205)$$

i govori o egzistenciji njenih rešenja u okolini regularne singularne tačke $x = 0$, tj. tačke u kojoj su funkcije $p(x)$ i $q(x)$ analitičke i imaju Taylor-ove razvoje

$$p(x) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k x^k, \quad q(x) = \sum_{k=0}^{\infty} q_k x^k, \quad (2.206)$$

sa radijusom konvergencije $R > 0$. Oblik linearno nezavisnih rešenja jednačine (2.205) određen je korenima r_1 i r_2 pomoćne jednačine

$$r(r-1) + p_0 r + q_0 = 0. \quad (2.207)$$

U zavisnosti od osobina korena imamo tri vrste rešenja; rešenja su izražena pomoću razvoja u Taylor-ov red koji konvergira u intervalu $0 < |x| < R$.

(1) $r_1 - r_2 \notin \mathbb{Z}$. Linearno nezavisna rešenja su oblika

$$y_1 = x^{r_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad y_2 = x^{r_2} \sum_{k=0}^{\infty} b_k x^k. \quad (2.208)$$

(2) $r_1 = r_2$. Rešenja su

$$y_1 = x^{r_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad y_2 = y_1(x) \log x + x^{r_2} \sum_{k=1}^{\infty} b_k x^k. \quad (2.209)$$

(3) $r_1 - r_2 \in \mathbb{Z}$. Rešenja su

$$y_1 = x^{r_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad y_2 = c y_1(x) \log x + x^{r_2} \sum_{k=0}^{\infty} b_k x^k, \quad (2.210)$$

konstanta c može biti i 0.

U sva tri slučaja veza tj. rekurentna relacija između koeficijenata a_k (ili b_k) dobija se zamenom Taylor-ovog razvoja u početnu diferencijalnu jednačinu.

2.11.2 HERMITÉ-OVI POLINOMI

Osim kao rešenja Hermité-ove jednačine

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0, \quad (2.211)$$

Hermité-ovi polinomi mogu da se definišu i sa

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (2.212)$$

ili pomoću funkcije generatriše

$$e^{2\xi t - t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{t^n}{n!}. \quad (2.213)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_n(\xi) d\xi = \delta_{mn} 2^n \sqrt{\pi n!}, \quad (2.214)$$

odnosno, talasne funkcije (Hermité-ove funkcije) koje odgovaraju vrednostima n, m ,

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n \sqrt{\pi n!}}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad (2.215)$$

su ortonormirane,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(\xi) \psi_n(\xi) d\xi = \delta_{mn}. \quad (2.216)$$

Prvih nekoliko polinoma su

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi. \end{aligned} \quad (2.217)$$

Hermité-ovi polinomi zadovoljavaju rekurentne veze

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi), \quad (2.218)$$

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi), \quad (2.219)$$

kao i

$$2^{n/2} H_n(x+y) = \sum_k^n \binom{n}{k} H_k(\sqrt{2}x) H_{n-k}(\sqrt{2}y). \quad (2.220)$$

Interesantna je relacija

$$\sum_n \frac{t^n}{2^n n!} H_n(x) H_n(y) = (1-t^2)^{-1/2} e^{\frac{2xyt-(x^2+y^2)t^2}{1-t^2}}. \quad (2.221)$$

2.11.3 FOURIER-OVA TRANSFORMACIJA

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

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{ikx} dk \quad (2.222)$$

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

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \quad (2.223)$$

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:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk, \quad (2.224)$$

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (2.225)$$

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

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp, \quad (2.226)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx. \quad (2.227)$$

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

Za Fourier-ove koeficijente važi

$$\widetilde{(\psi')} (k) = ik\tilde{\psi}(k), \quad \widetilde{(\psi'')} (k) = -k^2\tilde{\psi}(k), \quad (2.228)$$

kao i

$$\widetilde{(\psi\chi)} (k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k-l) \tilde{\chi}(l) dl. \quad (2.229)$$

2.11.4 POISSON-OVI INTEGRALI I GAMA-FUNKCIJA

Osnovni Poisson-ov integral je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-px^2-qx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}} e^{\frac{q^2}{4p}}, \quad \operatorname{Re} p > 0 \quad (2.230)$$

Iz njega se diferenciranjem po parametrima mogu dobiti i drugi Poisson-ovi integrali

$$\int x e^{-px^2-qx} dx = -\frac{\partial}{\partial q} \int e^{-px^2-qx} dx = -\frac{q}{2p} \sqrt{\frac{\pi}{p}} e^{\frac{q^2}{4p}}, \quad (2.231)$$

$$\int x^2 e^{-px^2-qx} dx = -\frac{\partial}{\partial p} \int e^{-px^2-qx} dx = \frac{q^2 + 2p}{4p^2} \sqrt{\frac{\pi}{p}} e^{\frac{q^2}{4p}}, \quad (2.232)$$

Ipak, integrali koji u sebi sadrže proizvod monoma i eksponencijalne funkcije najlakše se računaju pomoću gama-funkcije. Gama-funkcija je specijalna funkcija koja može da se definiše kao rešenje jednačine

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \quad \Gamma(1) = 1. \quad (2.233)$$

$\Gamma(z)$ je definisana za kompleksne vrednosti argumenta z i ima proste polove u $z = -n$ za $n = 0, 1, 2, \dots$. Nama je važna njena integralna reprezentacija

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{z-1} dt, \quad \arg t = 0 \quad (2.234)$$

koja važi za $\operatorname{Re} z > 0$.

Slika gama funkcije za realni argument

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

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (2.235)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \frac{(2n-1)!!}{2^n}. \quad (2.236)$$

2.12 ZADACI

GLAVA 3

INTERMECO: MATEMATIČKI FORMALIZAM

Svakodnevni jezik koji koristimo sadrži mnogo implicitnih pretpostavki, odnosno informacija i saznanja o stvarima i svetu koji opisuje¹. Na primer, opšte je poznato (a možda i tačno) da Eskimi imaju sto reči za sneg a nijednu za rat. Ili očigledno, pre dvadeset prvog veka pojmovi ‘facebook’ i ‘pametni telefon’ nisu postojali jer nisu imali odgovarajući, konkretni sadržaj. Slično je i sa jezikom fizike. Fizika, na osnovu eksperimentalnih posmatranja identifikuje koji su to ‘aspekti realnosti’ važni za opis prirode i pojava u njoj, i pridružuje im određene matematičke pojmove i strukture. Povezivanje brojeva koji se dobiju u eksperimentu sa matematičkim konceptima je složen i po svoj prilici nejednoznačan proces, ali on očigledno između ostalog zavisi od skupa pojava koje opisujemo tj. od domena eksperimentalnih merenja. Zato nije neobično da se sa povećanjem ukupne spoznaje prirode i proširenjem eksperimentalnog znanja osnovni fizički koncepti i njihov matematički opis razvijaju i menjaju. Naravno kao i u običnom jeziku, jezik fizike sadrži više od svog neposrednog sadržaja: sadrži interpretaciju.

Ovo poglavlje 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 potrebno još znanja. U pauzi između fizike i fizike, sistematizovaćemo matematiku: to znanje pomoći će da se bolje i jasnije razumeju bazični pojmovi i sagleda celina, a veoma često i da se pojednostavi konkretni račun. Formalizam kvantne mehanike je i sam po sebi važan. On je tako kompaktan i konceptualno zaokružen da

¹Ova rečenica je parafraza uvoda u poglavlje o formalizmu iz udžbenika J. L. Basdevanta i J. Dalibard-a, *Quantum Mechanics*, Springer 2002. Ovde je citiramo zato što je bez sumnje i tačna i relevantna: sama tema formalizma i interpretacije kvantne mehanike je mnogo dublja i šira i prevazilazi samo fiziku, i njome se nećemo baviti više nego što je u udžbenicima uobičajeno. Navedena knjiga ima divan moto, citat svetog Avgustina: ‘Believe and you will understand; faith precedes, intelligence follows’.

se neretko u udžbenicima uvodi na samom početku zadavanjem ‘postulata’, slično kao što se može uraditi u termodinamici. Mi smo se ovde opredelili za induktivni pristup, a jedan od razloga je što, kada se sa kvantne mehanike predje na kvantnu teoriju polja, aksiomatska formulacija nije dovoljna. Može se reći da sam koncept kvantovanja nije unapred potpuno fiksiran nego da zavisi od fizičkog sistema na koji se primenjuje: naravno, ideja reprezentovanja fizičkih stanja vektorima u Hilbertovom prostoru je uvek centralna. Zbog toga ćemo u nastavku češće govoriti o ‘principima kvantovanja’ nego o ‘postulatima kvantne mehanike’.

Prelaz sa Schrödinger-ove talasne mehanike na algebarsku formulaciju neophodan je između ostalog da bi se konzistentno opisali spin i izospin. U tom opisu, videćemo, opservabli spina pridružuje se 2×2 ili 3×3 matrica. Mada je odgovarajuća matematika, linearna algebra, jednostavnija od analize i funkcionalne analize, fizička intuicija vezana za nju nije klasična: zato je ovaj korak netrivialan. Algebarska formulacija je omogućila razvoj ideje o unutrašnjim stepenima slobode, jednog od osnovnih koncepata fizike elementarnih čestica. Ali na ideju da se fizičke veličine opisuju matricama Heisenberg je došao razmatrajući ne spin nego baš koordinatu i impuls.

Matrična mehanika je uvedena i detaljnije razradjena u tri rada iz 1925: Heisenberg-a, zatim Born-a i Jordan-a i konačno Born-a, Heisenberg-a i Jordan-a, i mi ćemo ukratko opisati neke od koraka u razvoju ove važne teorijske ideje². U prvom od pomenutih radova Heisenberg se, konstatujući da fizička teorija ne treba da se bavi veličinama koje se ne mogu opservirati (kao što je na primer putanja elektrona u atomu), fokusira na spektre. Još od Bohr-a bilo je poznato da se frekvence linija u spektrima atoma dobijaju kao

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n \quad (3.1)$$

i da odgovaraju prelazima elektrona sa m -tog na n -ti nivo energije. Takodje, važi rekombinacioni princip

$$\omega_{mn} + \omega_{nk} = \omega_{mk}, \quad (3.2)$$

kao i

$$\omega_{mn} = -\omega_{nm}. \quad (3.3)$$

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

$$P = \frac{4e^2}{3c^3} |\ddot{\vec{r}}|^2. \quad (3.4)$$

²G. Emch, *Mathematical and Conceptual Foundations of 20th-Century Physics*, North Holland, 2000; S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2013.

Ako analogan izraz važi i u kvantnom slučaju, treba odrediti šta u njemu predstavlja vektor položaja \vec{r} odnosno u jednoj dimenziji, koordinata x . Heisenberg-ova pretpostavka bila je da je, po analogiji sa uobičajenim Fourier-ovim razvojem u red

$$x(t) = \sum x_n e^{-i\omega_n t}, \quad (3.5)$$

gde koordinati x pridružujemo Fourier-ovu amplitudu $x \mapsto x_n$, ovde to izraz oblika

$$x \mapsto (x)_{mn} e^{-i\omega_{mn} t} \quad (3.6)$$

jer imamo dve frekvence, ω_m i ω_n . Ovde je $(x)_{mn}$ kompleksna amplituda koja karakteriše prelaz, a eksponencijalni faktor je kao i sama amplituda ‘simetričan’ po oba stanja. Uz to je Heisenberg pretpostavio, u skladu sa (3.3), da je

$$(x)_{mn}^* = (x)_{nm}. \quad (3.7)$$

Šta je u tom slučaju amplituda kvadrata, $(x^2)_{mn}$, odnosno šta odgovara izrazu $|\ddot{x}|^2$ u snazi zračenja P ? Najjednostavniji i najprirodniji način da se reprezentuje množenje koordinata, po Heisenberg-u, je

$$x^2 \mapsto (x^2)_{mn} e^{-i\omega_{mn} t} = \sum_k x_{mk} e^{-i\omega_{mk} t} x_{kn} e^{-i\omega_{kn} t} \quad (3.8)$$

odnosno

$$(x^2)_{mn} = \sum_k (x)_{mk} (x)_{kn}. \quad (3.9)$$

Mada je intuicija za ovu formulu verovatno proistekla iz osobina Fourier-ove transformacije odnosno iz izraza (2.229) za Fourier-ove koficijente proizvoda funkcija, u (3.9) je u stvari Heisenberg ponovo ‘otkrio’ matricno množenje koje je kasnije, kao poznatu matematičku operaciju prepoznao Born. Born i Jordan su naravno bili svesni neobičnosti ovog množenja jer su ‘matrice’ koje se množe beskonačne (indeksi m, n su prirodni brojevi) ali su hteli da analiziraju implikacije ove pretpostavke. Jedna od direktnih posledica je da množenje nije komutativno. Ako se, slično koordinati, i impulsu pridruži amplituda

$$p = m\dot{x} \mapsto (p)_{mn} e^{-i\omega_{mn} t}, \quad (3.10)$$

imamo

$$(p)_{mn} = -im\omega_{mn} x_{mn}. \quad (3.11)$$

Tada se za dijagonalne elemente proizvoda dobija

$$(px)_{nn} = \sum_k (p)_{nk} (x)_{kn} = -im \sum_k \omega_{nk} |(x)_{nk}|^2, \quad (3.12)$$

$$(xp)_{nn} = -im \sum_k \omega_{kn} |(x)_{nk}|^2 = im \sum_k \omega_{nk} |(x)_{nk}|^2. \quad (3.13)$$

Ove izraze su po analogiji sa klasičnim, 1925. izračunali W. Kuhn i W. Thomas i dobili rezultat

$$2m \sum_k \omega_{nk} |(x)_{nk}|^2 = \hbar, \quad (3.14)$$

odnosno

$$(xp)_{nn} - (px)_{nn} = i\hbar. \quad (3.15)$$

Pravilo (3.15) Born i Jordan su povezali sa Bohr-Sommerfeld-ovim pravilom kvantovanja, a Dirac 1926. sa Poisson-ovom zagradom izmedju kanonski konjugovanih promenljivih,

$$\{x_i, p_j\}_{PZ} = \delta_{ij}. \quad (3.16)$$

Veza izmedju matrične mehanike i talasne mehanike koju je predložio Schrödinger godinu dana kasnije, 1926, bila je predmet mnogih radova i žučnih rasprava, ali čini se da je najintuitivniji uvid imao Dirac koji je insistirao na ‘transformacionoj teoriji’ koja povezuje jedan i drugi opis kvantne mehanike. Ekvivalentnost oba pristupa konačno je dokazana 1931. Stonevon Neumann-ovom teoremom o kojoj će biti reči kasnije.

3.1 KINEMATIKA KVANTNE MEHANIKE

Gledano apstraktno, osnovni pojam koji se u fizici koristi je pojam fizičkog sistema. U kontekstu konkretnih eksperimenata ovaj pojam može se raščlaniti na bar dva, jer je u merenju koncept opservabilnih osobina sistema (rezultata merenja) nezavisan od načina na koji se sistem preparira (stanja sistema). Prvi zadatak teorijskog opisa je da ovom pojmu da operativni smisao odnosno konkretnu matematičku reprezentaciju: taj deo opisa zovemo kinematika.

Sa stanovišta eksperimenta, početno stanje sistema pre merenja može se identifikovati sa procedurom njegove preparacije. Pošto je jedna od najvažnijih osobina eksperimentalnog istraživanja ponovljivost rezultata merenja, u principu tražimo da se isto stanje može pripremiti više puta tako da isto merenje možemo više puta da izvršimo odnosno proverimo³. Zbog toga se merenja, u klasičnoj ili kvantnoj fizici, uvek vrše na većem broju identično prepariranih fizičkih objekata, odnosno na ansamblu. Drugi osnovni pojam su opservable, merljive osobine sistema: iskazi o opservablama nužno uključuju merne uređaje. Merenje daje skup svih mogućih ishoda,

³Naravno činjenica da se eksperiment ne može ponoviti i proveriti pod kontrolisanim uslovima fizičare ne sprečava da svoje teorije uspešno ekstrapoliraju: eksperimenti na primer, u astrofizici i kosmologiji se svode na merenja onoga što u svemiru, van laboratorija, postoji (preciznije, što je postojalo), ali bez obzira na to imamo teorije koje ih dovoljno tačno, kvantitativno opisuju.

izmerenih brojnih vrednosti, i kad razmatramo sve rezultate dobijene u različitim stanjima ovaj skup potpuno karakteriše konkretnu opservablu a zavisi samo od prirode fizičkog sistema. Ponovljivost odnosno ponavljanje merenja važno je između ostalog da bismo mogli da procenimo greške merenja.

Kinematika klasične mehanike opisana je faznim prostorom. Fazni prostor sistema koji ima n stepeni slobode je realni euklidski prostor \mathbb{R}^{2n} ili neki njegov deo: to je prostor fizičkih stanja, tačaka (x_i, p_i) , $i = 1, \dots, n$, zadatih vrednostima svih komponenti koordinata i impulsa sistema. Ovaj iskaz je posledica činjenice da je drugi Newton-ov zakon diferencijalna jednačina drugog reda po vremenu, pa su njena rešenja jednoznačno određena početnim vrednostima položaja i brzina. Sa druge strane, ako znamo stanje sistema tj. vrednosti (x_i, p_i) , onda možemo da izračunamo odnosno predvidimo rezultate svih merenja jer su sve klasične opservable (kinetička energija, potencijalna energija, moment impulsa itd.) funkcije položaja i impulsa. Drugim rečima, stanja fizičkog sistema i opservable koje se na njemu mere opisuju se istim matematičkim objektom, pa se mogu identifikovati. Ovakav opis za kvantnu mehaniku nije adekvatan, a osnovni razlog je neprekidnost vrednosti fizičkih opservabli koju on inherentno nosi: videli smo da se u eksperimentu, za određene opservable, dobijaju diskretne odnosno kvantovane vrednosti.

Prvi ‘princip kvantovanja’ glasi: STANJU FIZIČKOG SISTEMA PRIDRUŽUJE TALASNA FUNKCIJA ILI VEKTOR STANJA $(\psi, |\psi\rangle)$ KOJI JE ELEMENT LINEARNOG PROSTORA \mathcal{H} ⁴. Linearni ili vektorski prostor je jedna od osnovnih matematičkih struktura i uvodi se u elementarnoj geometriji da bi se opisao položaj čestice u trodimenzionom euklidskom prostoru. Da ponovimo, bez mnogo detalja, ovu definiciju. Skup vektora $\psi, \chi, \phi, \dots \in \mathcal{H}$ 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 \mathcal{H} zatvoren i za koje važi da je \mathcal{H} , Abel-ova grupa u odnosu na sabiranje, tj.

$$\begin{aligned} \text{asocijativnost,} & & \phi + (\psi + \chi) &= (\phi + \psi) + \chi \\ \text{komutativnost,} & & \phi + \psi &= \psi + \phi \\ \text{postoji nula, } 0 \in \mathcal{H} & & 0 + \psi &= \psi \\ \text{postoji inverz, } -\psi \in \mathcal{H} & & \psi + (-\psi) &= 0. \end{aligned} \tag{3.17}$$

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

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

⁴Vrlo brzo ćemo ovaj postulat i precizirati (prostor je Hilbert-ov prostor) i proširiti (stanje može da bude i statistički operator odnosno matrica gustine).

Operacija koja je važna i u euklidskoj geometriji i u kvantnoj mehanici je skalarni ili unutrašnji proizvod: ona vektorima ψ i ϕ pridružuje broj (ψ, ϕ) . Skalarni proizvod ima sledeće osobine:

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

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,

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

Za vektore za koje je $(\psi, \phi) = 0$ kažemo da su ortogonalni. Kasnije, kod dokaza relacija neodređenosti trebaće nam Schwarz-ova⁵ nejednakost:

$$(\psi, \psi)(\phi, \phi) \geq |(\psi, \phi)|^2.\tag{3.22}$$

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

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

$$\psi = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad \phi = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}\tag{3.23}$$

a skalarni proizvod u ovom prostoru obično se definiše sa

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

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

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

⁵Ili pravilnije, nejednakost Cauchy-Bunjakovskog-Schwarz-a.

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

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Ovaj bazis je ortonormiran: koeficijenti u razvoju su projekcije vektora ψ na koordinatne ose odnosno na ortove e_i ,

$$x_i = (e_i, \psi). \quad (3.27)$$

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

$$\psi = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

a skalarni proizvod je definisan sa

$$(\psi, \phi) = \psi^\dagger \phi = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i. \quad (3.29)$$

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,

$$\langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger. \quad (3.30)$$

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

$$(\psi, \phi) = \langle\psi|\phi\rangle. \quad (3.31)$$

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:

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

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; takodje, u integralu može da postoji netrivialna mera integracije, nenegativna funkcija μ :

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_a^b \psi^*(x) \phi(x) \mu(x) dx. \quad (3.33)$$

Na primer, kada se u trodimenzionom prostoru sa Descartes-ovih predje na sferne koordinate skalarni proizvod postaje

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^* \phi r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi, \quad (3.34)$$

a granični uslov na funkcije $\psi(r, \theta, \varphi)$ koji se standardno zadaje je $\psi(r, \theta, 0) = \psi(r, \theta, 2\pi)$. Videli smo da, zbog statističke interpretacije, talasna funkcija treba da bude normirana,

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (3.35)$$

Osobina da je integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx < \infty \quad (3.36)$$

konačan naziva se kvadratna integrabilnost.

Linearni prostor \mathcal{H} kvadratno-integrabilnih funkcija ili Hilbert-ov prostor je beskonačnodimenzion. Najjednostavniji način da se u to uverimo je da za bazis uzmemo skup monoma $\{x^k\}$. 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 razviti po ovom bazu – to je razvoj u Taylor-ov red,

$$\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\psi^{(k)}(0)}{k!} x^k. \quad (3.37)$$

Doduše, monomi nisu kvadratno-integrabilne funkcije i ne mogu se normirati, pa su zato u stvari izvan prostora \mathcal{H} . Sem toga nisu ni međusobno ortogonalni, no svejedno, njihovo uvođenje daje nam dimenziju \mathcal{H} . Drugi bazis po kome možemo razviti talasne funkcije je bazis ravnih talasa, $\{e^{ikx}\}$: razlaganje po ovom bazu je razvoj u Fourier-ov integral:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{ikx} dk. \quad (3.38)$$

Za razliku od monoma, ravnih talasa ima neprebrojivo mnogo: oni su ‘prebrojani’ promenljivom k koja se menja kontinualno, $k \in (-\infty, +\infty)$. Ali ni ravni talasi se ne mogu normirati. Najbolji bazis koji smo do sada imali je skup svojstvenih funkcija harmonijskog oscilatora $\psi_n(x)$, $n = 0, 1, 2, \dots$ dat u (2.215): ove funkcije su i međusobno ortogonalne i normirane.

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

$$dP = \rho dV_1 \dots dV_N = |\psi|^2 dV_1 \dots dV_N. \quad (3.39)$$

Ukupna verovatnoća da se bilo koja čestica nadje bilo gde u prostoru je jednaka jedinici, i ta normalizacija se, zbog jednačine kontinuiteta, u vremenu održava.

3.2 OPSERVABLE I MERENJA

Dakle, prvi postulat kvantne mehanike kaže da stanja sistema $|\psi\rangle$ čine vektorski prostor. Pod stanjem naravno podrazumevamo statistički ansambl identično pripremljenih sistema, jer će rezultati merenja u principu biti 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. Drugi postulat kvantovanja glasi: FIZIČKE OPSERVABLE A, B, \dots, M OPISUJU SE HERMITSKIM OPERATORIMA KOJI DELUJU U PROSTORU STANJA \mathcal{H} . MOGUĆI REZULTATI PRI MERENJU OPSERVABLE A SU NJENE SVOJSTVENE VREDNOSTI a_i , A SREDNJA VREDNOST A KOJA SE DOBIJA MERENJEM U STANJU $|\psi\rangle$ JE $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$.

Ovako zadat postulat ima već neke implikacije ali podjimo redom, opet da ukratko definišemo neophodne pojmove. Linearni operator A je preslikavanje vektorskog prostora u samog sebe

$$A|\psi\rangle = |\phi\rangle, \quad |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \quad (3.40)$$

koje je linearno

$$A(a|\psi\rangle + b|\chi\rangle) = aA|\psi\rangle + bA|\chi\rangle. \quad (3.41)$$

Skup svih operatora koji deluju u \mathcal{H} je algebra: množenje u algebri operatora je njihovo uzastopno delovanje,

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle), \quad (3.42)$$

sabiranje dato sa

$$(A + B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle, \quad (3.43)$$

a jedinica I je identično preslikavanje, $I|\psi\rangle = |\psi\rangle$. Ako postoji inverzni operator A^{-1} , $AA^{-1} = I$, kažemo da je A invertibilan. Iz osobina vektorskog prostora vidimo da je sabiranje operatora komutativno dok množenje u principu nije. Razlika

$$[A, B] = AB - BA \quad (3.44)$$

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

$$A^0 = I, \quad A^2 = AA, \quad A^3 = A^2A, \quad \dots \quad (3.45)$$

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

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} A^k. \quad (3.46)$$

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

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

Matrica A očigledno ima n^2 nezavisnih elemenata, pa je prostor kvadratnih matrica vektorski 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 $\langle l|$ ⁶,

$$E_{kl} = |k\rangle\langle l|. \quad (3.48)$$

Tada prema pravilima matičnog množenja dobijamo $n \times n$ matricu koja na svim mestima ima nule, osim na kl -mestu gde je jedinica. Proizvoljnu matricu A možemo da napišemo kao

$$A = \sum_{k,l=1}^n a_{kl} |k\rangle\langle l|. \quad (3.49)$$

U ovom bazisu se lako izvodi pravilo množenja kvadratnih matrica,

$$AB = \sum_{k,l} a_{kl} |k\rangle\langle l| \sum_{j,m} b_{jm} |j\rangle\langle m| = \sum_{k,m} \left(\sum_l a_{kl} b_{lm} \right) |k\rangle\langle m|, \quad (3.50)$$

pa imamo

$$(AB)_{km} = \sum_l a_{kl} b_{lm}. \quad (3.51)$$

Pri izvodjenju formule (3.51) koristi se činjenica da je množenje matrica bez obzira na njihov format asocijativno, kao i ortonormiranost početnog bazisa

$$\langle l|j\rangle = \delta_{lj}. \quad (3.52)$$

⁶U starijoj notaciji ovo množenje se zove dijadski proizvod.

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

$$E_{kk}|\psi\rangle = |k\rangle\langle k|\psi\rangle. \quad (3.53)$$

Sabiranjem svih matrica E_{kk} dobijamo jediničnu matricu I ,

$$I = \sum_{k=1}^n |k\rangle\langle k|. \quad (3.54)$$

Ova relacija se zove relacija kompletnosti i znači da je $\{|k\rangle\}$ bazis tj. da proizvoljno stanje $|\psi\rangle$ možemo po njemu da razložimo,

$$|\psi\rangle = I|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n |k\rangle\langle k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n c_k |k\rangle, \quad (3.55)$$

gde smo sa $c_k = \langle k|\psi\rangle$ označili koeficijente 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

$$\langle \chi, A\psi \rangle = \langle A^\dagger \chi, \psi \rangle. \quad (3.56)$$

U Dirac-ovoj notaciji ovaj izraz pišemo kao

$$\langle \chi|A\psi \rangle = \langle A^\dagger \chi|\psi \rangle = \langle \chi|A|\psi \rangle. \quad (3.57)$$

Iz definicije (3.56) lako se vidi pravilo

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (3.58)$$

U prostoru matrica adjungovanje se svodi na transponovanje i kompleksnu konjugaciju matrice $(A)_{kl} = a_{kl}$,

$$(A^\dagger)_{kl} = a_{lk}^*. \quad (3.59)$$

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

$$A^\dagger = A, \quad (3.60)$$

antihermitski operatori za koje imamo

$$A^\dagger = -A, \quad (3.61)$$

i unitarni operatori

$$U^\dagger = U^{-1}. \quad (3.62)$$

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

$$p_\alpha = \alpha \frac{d}{dx}, \quad (3.63)$$

koji je očigledno linearan. Šta je adjungovani, p_α^\dagger ? To ćemo odrediti koristeći definiciju (3.56),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \alpha \frac{d\psi(x)}{dx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} (p_\alpha^\dagger \chi(x))^* \psi(x) dx. \quad (3.64)$$

Posle parcijalne integracije leve strane dobijamo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) \alpha \frac{d\psi(x)}{dx} dx = \alpha \chi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \alpha \frac{d\chi^*(x)}{dx} \psi(x) dx. \quad (3.65)$$

Pošto su funkcije ψ i χ kvadratno integrabilne njihova vrednost u beskonačno udaljenim tačkama je nula, pa možemo da zaključimo da je

$$p_\alpha^\dagger \chi(x) = -\alpha^* \frac{d\chi}{dx}. \quad (3.66)$$

Znači, operator p_α je hermitski kada je konstanta α imaginaran broj. Zato se standardno definiše operator impulsa kao

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad (3.67)$$

a ‘kapicu’ iznad slova korišćemo da naglasimo da je u pitanju operator onda kad postoji mogućnost da ga pomešamo sa konstantom odnosno brojem.

Jedan od važnih pojmova i u linearnoj algebri i u kvantnoj mehanici je pojam svojstvenog stanja ili opštije, svojstveni problem. Svojstveni problem je jednačina

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle, \quad (3.68)$$

a njena rešenja a se 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 određeno samo pravcem vektora. To je zato što su stanja normirana, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, tako da ako $|\psi\rangle$ pomnožimo konstantom ona može biti samo fazni faktor $e^{i\alpha}$ koji 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 hermitske ili unitarne matrice⁷ je kompletan; svojstveni

⁷Zapravo ovo je osobina normalnih operatora koji su definisani uslovom $[A, A^\dagger] = 0$.

vektori su ortogonalni tako da ih možemo uzeti za bazis. Ako vektore ovog bazisa označimo sa $|k\rangle$, imamo

$$A|k\rangle = a_k|k\rangle, \quad (3.69)$$

a skup $\{a_k\}$ zove se spektar operatora A . Neke od svojstvenih vrednosti a_k mogu u principu da budu i jednake, i tada obično uvodimo dodatni ‘kvantni broj’ npr. κ koji medju sobom razlikuje vektore u jednom svojstvenom potprostoru,

$$A|k, \kappa\rangle = a_k|k, \kappa\rangle, \quad (3.70)$$

i svojstveni projektor P_k ,

$$P_k = \sum_{\kappa} |k, \kappa\rangle\langle k, \kappa|. \quad (3.71)$$

U svojstvenom bazisu matrica A je dijagonalna,

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_n \end{pmatrix}, \quad (3.72)$$

odnosno

$$A = \sum_{k, \kappa} a_k |k, \kappa\rangle\langle k, \kappa| = \sum_k a_k P_k. \quad (3.73)$$

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

$$f(A) = \sum_{k, \kappa} f(a_k) |k, \kappa\rangle\langle k, \kappa|, \quad (3.74)$$

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

$$\langle A \rangle = \langle k|A|k\rangle = a_k, \quad (3.75)$$

a srednja vrednost od A^2 je

$$\langle A^2 \rangle = \langle k|A^2|k\rangle = a_k^2. \quad (3.76)$$

Prema tome, disperzija od A u svojstvenim stanjima je nula,

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = 0 \quad (3.77)$$

odnosno kad merimo na ansamblu, merenje na svakom pojedinačnom sistemu daje isti rezultat, a_k . Ukoliko stanje nije svojstveno,

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle, \quad (3.78)$$

očekivana vrednost je

$$\langle A \rangle = \sum_k c_k^* \langle k| A \sum_l c_l |l\rangle = \sum_k |c_k|^2 a_k = \sum_k \rho_k a_k. \quad (3.79)$$

Koeficijenti u razvoju vektora $|\psi\rangle$ 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 $|k\rangle$. Ovo Born-ovo pravilo se ponekad izdvaja kao poseban, treći princip kvantovanja ili postulat o verovatnoći: **VEROVATNOĆA DA SE PRI MERENJU OPSERVABLE A NA SISTEMU KOJI JE U KVANTNOM STANJU $|\psi\rangle$ DOBIJE REZULTAT a_k JE $P(A, a_k, \psi) = \rho_k = \langle \psi|P_k|\psi \rangle$** . 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. Svojstvene vrednosti hermitskog operatora su realni brojevi, a realan broj je i jedino što se u laboratoriji može očitati kao rezultat⁸. 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 beskonačnodimenzionom prostoru u principu je dosta komplikovanije nego u konačnodimenzionom prostoru, mada se neke osnovne osobine važne za kvantnu mehaniku zadržavaju; o Hilbert-ovom prostoru govorićemo kasnije bez velike preciznosti. Jedna od važnih razlika je da, dok u n -dimenzionom prostoru spektar operatora može da ima najviše n tačaka, u beskonačnodimenzionom prostoru 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 (3.54) i (3.73) koja ćemo u narednom poglavlju napisati i diskutovati.

Karakteristični primeri 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

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (3.80)$$

⁸Zapravo, rezultati merenja su uvek racionalni brojevi jer rezultat ima konačan broj decimala.

Slično, operator položaja \hat{x} zadat je množenjem nezavisno-promenljivom x ,

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x). \quad (3.81)$$

Rekli smo, operatore odnosno opservable u kvantnoj mehanici često označavamo kapicom iznad simbola da bismo ih razlikovali od brojeva ili funkcija. Definicije (3.80) i (3.81) uskladjene su naravno sa izrazima za očekivane vrednosti koordinate i impulsa koje smo koristili u prethodnoj glavi i koje smo uveli intuitivno, na osnovu koncepata gustine verovatnoće i fluksa:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \psi^* x \psi dx, \quad (3.82)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) dx. \quad (3.83)$$

Posebno je važna vrednost komutatora koordinate i impulsa. Iz definicije dobijamo

$$[\hat{x}, \hat{p}] \psi(x) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \frac{d(x\psi)}{dx} = i\hbar \psi(x), \quad (3.84)$$

odnosno

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (3.85)$$

pošto jednakost (3.84) važi za proizvoljno stanje $\psi(x)$. Relacija (3.85) zove se Heisenberg-ova komutaciona relacija i predstavlja, videćemo kasnije, osnovu za kanonsko kvantovanje klasičnih fizičkih sistema.

3.3 ★ HILBERT-OV PROSTOR

Prikaz matematičkog formalizma kako je dat i korišćen u ovoj knjizi, i da je nešto precizniji bio bi daleko od pune matematičke strogosti. Takav pristup, dosta uobičajen u fizičkoj literaturi, bazira se na ključnom rezultatu o ekvivalentnosti matricne i talasne mehanike koji se najkonciznije vidi kroz Dirac-ovu notaciju, ali i na analogiji velikog broja osobina konačnih i beskonačnodimenzionih Hilbert-ovih prostora. S druge strane taj pristup bio je možda jedan od povoda von Neumann-u da napiše *Matematičke osnovne kvantne mehanike*⁹, knjigu veoma važnu za zasnivanje ove 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 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’.

⁹J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1955.

Verovatno je ova ocena prestroga; mi ćemo ipak posvetiti ovo poglavlje izvesnim dopunama 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, a zainteresovani čitalac bi trebalo da se upozna sa pojmovima kao što su domen operatora, neprekidnost i ograničenost.

Dakle precizno formulisan, prvi 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 beskonačnodimenzioni linearni prostor sa skalarnim proizvodom, koji je i 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 \mathcal{H} je funkcional koji vektoru pridružuje realan broj, $\|\cdot\|: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$, i ima sledeće osobine:

$$\begin{aligned} \|\psi\| &\geq 0, \quad \|\psi\| = 0 \text{ samo ako je } \psi = 0, \\ \|\psi + \phi\| &\leq \|\psi\| + \|\phi\| \quad (\text{nejednakost trougla}), \\ \|a\psi\| &= |a| \|\psi\|. \end{aligned} \tag{3.86}$$

Rekli smo da u prostoru sa skalarnim proizvodom norma može da se definiše kao

$$\|\psi\| = \langle \psi | \psi \rangle, \tag{3.87}$$

pri čemu se nejednakost trougla svodi na Schwarz-ovu nejednakost. Prostor sa normom je metrički prostor a rastojanje elemenata ψ i ϕ je

$$d(\psi, \phi) = \|\psi - \phi\|. \tag{3.88}$$

Sada možemo da definišemo potpunost. Prostor \mathcal{H} je potpun ako u njemu svaki Cauchy-jev (fundamentalni) niz konvergira, tj. ako osim elemenata, i limes svakog Cauchy-jevog niza pripada \mathcal{H} . Da se podsetimo: niz ψ_n nazivamo Cauchy-jevim ako za proizvoljno malo ϵ postoji n tako da je rastojanje $d(\psi_k, \psi_m) \leq \epsilon$ za sve članove niza počevši od n -tog, $k, m \geq n$. 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 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 \mathcal{H} koji ima prebrojiv i svuda gust podskup \mathcal{S} , tj. podskup za koji važi: za svaki broj $\epsilon > 0$ i svaki vektor $\psi \in \mathcal{H}$ postoji vektor $\chi \in \mathcal{S}$ takav da je rastojanje $d(\psi, \chi) \leq \epsilon$. Znači, stanja iz \mathcal{H} mogu se sa proizvoljnom preciznošću aproksimirati stanjima iz prebrojivog podskupa.

Ovakav međusobni odnos imaju opet skup racionalnih i skup realnih brojeva: svaki realan broj može se proizvoljno dobro aproksimirati racionalnim, a racionalni brojevi su prebrojivi. U svom udžbeniku funkcionalne analize¹⁰ S. Kurepa kaže da separabilan Hilbert-ov prostor ‘nije ni “malen” jer je beskonačnodimenzion, 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 bazu; i konačno, svaka dva separabilna Hilbert-ova prostora su izomorfna.

Slično uslovu potpunosti, uslov separabilnosti nije direktno povezan sa nekom specifičnom fizičkom osobinom i zapravo je u neku ruku zahtev da stanja imaju odredjeniju, uže definisanu strukturu a ne sasvim opštu: to po pravilu daje dodatne osobine i pojednostavljuje teorijska razmatranja. Ima međjutim slučajeva kada se iz nekog konkretnog razloga za kinematički prostor stanja uzima neseparabilan prostor: interesantan primer je ‘loop’ kvantna kosmologija čiji ćemo jedan segment opisati u zadatku kasnije. Međjutim, u važnim fizičkim slučajevima često moramo da oslabimo i bazičnije zahteve kao što je pozitivnost skalarnog proizvoda koja je direktno povezana sa statističkom interpretacijom. Kada se predje na relativističku kvantnu fiziku, zbog osobina prostora Minkovskog na prostoru stanja sistema ne može *a priori* da se zada skalarni proizvod. Kod Gupta-Bleuler-ovog kovarijantnog kvantovanja elektromagnetnog polja na primer 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. U ovom smislu smo ranije komentarisali da postulati kvantovanja nisu fiksirana nepromenljiva dogma, nego da se mogu promeniti i menjaju se zavisno od fizičkog sistema koji kvantujemo i njegovih osobina.

Uslov potpunosti Hilbert-ovog prostora, jasno je, ostavlja ravne talase i δ -funkcije van prostora fizičkih stanja, a videli smo i videćemo da su ova dva skupa funkcija važna kako za račun tako i za konceptualno zaokruženje formalizma. Da bi se δ -funkcija matematički konzistentno uključila u opis, treba uvesti pojam uopštene funkcije i dualnog prostora. Navešćemo ovde ukratko samo definiciju, a δ -funkciju ćemo kasnije uvesti kao limes neprekidnih funkcija¹¹. Razmatrajmo radi konkretnosti prostor kvadratno-integrabilnih funkcija jedne promenljive \mathcal{H} , i njegov potprostor $\mathcal{D} \in \mathcal{H}$ koji ćemo zvati prostor probnih ili test-funkcija. Uopštena funkcija ili distribucija f je funkcional definisan na prostoru probnih funkcija, odnosno preslikavanje iz

¹⁰S. Kurepa, *Funkcionalna analiza*, Školska knjiga, 1981.

¹¹V. S. Vladimirov, *Generalized Functions in Mathematical Physics*, Mir Publishers, 1979.

\mathcal{D} u brojeve \mathbb{C} . Uz to, pretpostavljamo da je funkcional linearan i neprekidan:

$$\begin{aligned} \text{funkcional :} & \quad f : \psi \mapsto (f, \psi), \quad \text{definisan } \forall \psi \in \mathcal{D}, \quad (f, \psi) \in \mathbb{C} \\ \text{linearnost :} & \quad (f, a\psi + b\phi) = a(f, \psi) + b(f, \phi) \\ \text{neprekidnost :} & \quad \psi_n \rightarrow \psi \Rightarrow (f, \psi_n) \rightarrow (f, \psi). \end{aligned} \quad (3.89)$$

Pošto se vrednost funkcionala $f[\psi]$ najčešće izražava kao integral, uobičajeno je da se za f koristi oznaka $f(x)$. U ovom kontekstu δ -funkcija $\delta(x - a)$ se definiše kao

$$\delta[\psi] = \psi(a), \quad (3.90)$$

a za probne funkcije mogu se uzeti sve neprekidne funkcije iz \mathcal{H} . Jasno, što je manji skup \mathcal{D} , to je veći skup funkcionala koji su na njemu definisani. Dva funkcionala su jednaka ako su njihove vrednosti jednake za svako $\psi \in \mathcal{D}$, a linearni prostor svih funkcionala naziva se dualni prostor od \mathcal{D} , i može se pokazati da je dualni prostor uvek potpun. Konačno, ako je prostor probnih funkcija $\mathcal{D} = \mathcal{H}$, onda je odgovarajući dualni prostor izomorfan početnom prostoru \mathcal{H} (Riesz-ova teorema).

Već smo rekli da se u Hilbert-ovom prostoru operator A može reprezentovati dejstvom na funkcije,

$$A\psi(x) = \int A(x, x')\psi(x') dx', \quad (3.91)$$

ili, za diskretan prebrojiv bazis funkcija ψ_n , beskonačnom matricom a_{nm}

$$A\psi_n = \sum_{m=0}^{\infty} a_{nm}\psi_m. \quad (3.92)$$

U prvom slučaju A je zadat funkcijom dve promenljive $A(x, x')$ koja se zove jezgro operatora ili integralni kernel. Pošto npr. u diskretnoj reprezentaciji imamo sume beskonačnih redova, jasno je da će se u beskonačnodimenzionom vektorskom prostoru u principu pojaviti problemi konvergencije i beskonačnosti. To se odmah vidi kod definicije traga i determinante: ove dve veličine imaju smisla samo kada je rezultat formalno definisane operacije konvergentan odnosno konačan.

I spektar operatora se u Hilbert-ovom prostoru definiše opštije a ne samo kao skup svojstvenih vrednosti. Spektar operatora A je skup svih brojeva a za koje je $A - aI$ singularan operator; komplementarne tačke, za koje je $A - aI$ regularan čine rezolventni skup operatora A ¹². Može se pokazati da svaki neprekidni operator ima bar jednu tačku u spektru. U opštem slučaju spektar može da ima tri tipa tačaka ili tri dela, i to su: diskretni spektar, kontinualni spektar i rezidualni spektar. Tačke diskretnog spektra

¹² $(aI - A)^{-1}$ se naziva rezolventa operatora A .

su svojstvene vrednosti operatora i njima odgovaraju svojstveni vektori, dok tačke kontinualnog spektra nemaju svojstvene vektore (u prostoru \mathcal{H}). Može se dalje pokazati da su rezidualni spektri hermitskih i unitarnih operatora prazni skupovi. Zato, ako za funkcije koje zadovoljavaju analogon svojstvene jednačine

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle, \quad (3.93)$$

za tačke kontinualnog spektra a uvedemo oznaku $|a\rangle$

$$A|a\rangle = a|a\rangle, \quad (3.94)$$

važe formule analogne sa (3.54) i (3.73):

$$A = \sum_n a_n |n\rangle\langle n| + \int a |a\rangle\langle a| da, \quad I = \sum_n |n\rangle\langle n| + \int |a\rangle\langle a| da. \quad (3.95)$$

3.4 ★ MATRICA GUSTINE

I konačno da generalizujemo još jednom prvi postulat, onaj o stanjima. Rekli smo da kvantno stanje identifikujemo sa ansamblom koji se sastoji od velikog broja pojedinačnih fizičkih sistema koji su pripremljeni na isti način. Postavlja se sledeće prirodno pitanje: možemo li da, u teorijskom opisu, ujedini rezultate merenja iste opservable izvršena na dva različita ansambla koja se sastoje od pojedinačnih sistema iste prirode (ali možda nisu u početku na isti način preparirani)? Ili: možemo li ansambl da podelimo na dva podansambla, i da odgovarajuće rezultate posmatramo kao rezultate posebnih merenja? Jasno je da se ovo praktično tj. u eksperimentu može učiniti, te da je prirodno da i u teoriji koncept ili pojam ansambla zatvorimo ili upotpunimo u odnosu na operaciju unije više podansambala ili merenja.

U cilju da se pojam ansambla kompletira, potrebno je da se uvede pojam homogenog (ireducibilnog) ansambla ili čistog stanja¹³. Homogeni kvantni ansambl je onaj čiji svaki podansambl daje iste rezultate merenja svih opservabli kao i ceo ansambl. Homogeni ansambl je čisto stanje i opisuje se talasnom funkcijom ili vektorom $|\psi\rangle$. Sa druge strane, nehomogeni ansambl ili mešano stanje je unija dva ili više homogenih ansambala (koje bismo u principu pri nekom merenju mogli da razlikujemo). Mešano stanje opisuje se matricom gustine

$$\rho = \sum_k w_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|, \quad (3.96)$$

gde su brojevi w_k statističke težine pojedinih podansambala,

$$w_k \geq 0, \quad \sum_k w_k = 1, \quad (3.97)$$

¹³Precizna i detaljna diskusija o čistim i mešanim stanjima data je u udžbeniku F. Herbuta *Kvantna mehanika za istraživače*, Univerzitet u Beogradu, 1982.

a čista stanja $|\psi_k\rangle$ koja su pomešana mogu a ne moraju biti ortogonalna. Matrica gustine ili statistički operator definiše se kao pozitivan operator traga 1. U specijalnom slučaju čistog stanja statistički operator je projektor,

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad \rho^2 = \rho, \quad (3.98)$$

dok je u ostalim slučajevima $\rho^2 < \rho$.

Formule za očekivane vrednosti i verovatnoće koje smo napisali za čisto stanje lako se uopštiti na mešana stanja. Iz postulata o opservablama i verovatnoći za verovatnoću dobijanja rezultata a_k pri merenju opservable A i za srednju vrednost imamo

$$\begin{aligned} P(A, a_k, \psi) &= \langle\psi|P_k|\psi\rangle = \text{Tr } P_k|\psi\rangle\langle\psi|, \\ \langle A \rangle &= \langle\psi|A|\psi\rangle = \text{Tr } A|\psi\rangle\langle\psi|. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Ovo lako uopštavamo na mešano stanje, pa su verovatnoće i očekivana vrednost

$$P(A, a_k, \rho) = \text{Tr } P_k \rho, \quad \langle A \rangle = \text{Tr } A \rho. \quad (3.100)$$

Vidi se da ove formule tačno odražavaju proces mešanja ili unije podansambala u ansambl, tako da na primer, ako su očekivane vrednosti A na podansamblima $\langle A \rangle_k$, očekivana vrednost na celom ansamblu je

$$\langle A \rangle = \sum_k w_k \langle A \rangle_k. \quad (3.101)$$

Možda nije na prvi pogled očigledno da li je stanje koje je linearna kombinacija ili koherentna mešavina stanja $|\psi_n\rangle$,

$$|\psi\rangle = \sum c_n |\psi_n\rangle, \quad (3.102)$$

različito od mešanog stanja odnosno nekoherentne mešavine

$$\rho = \sum |c_n|^2 |\psi_n\rangle\langle\psi_n|. \quad (3.103)$$

Matematički, razlika je očigledna

$$\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum c_n^* c_k |n\rangle\langle k| \quad (3.104)$$

ali to u nekim fizičkim razmatranjima nije ovek jasno. Ova dva stanja ne razlikuju se pri merenjima opservabli koje su kompatibilne sa ρ , tj. koje su oblika $A = \sum a_i |i\rangle\langle i|$. Medjutim, u merenju nekompatibilne opservable $B = \sum b_{ij} |i\rangle\langle j|$ ona se mogu razlikovati, jer je na primer

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_\rho &= \text{Tr } B \rho = \sum b_{nn} |c_n|^2, \\ \langle B \rangle_\psi &= \text{Tr } B |\psi\rangle\langle\psi| = \sum b_{kn} c_n c_k^*. \end{aligned} \quad (3.105)$$

3.5 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

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|. \quad (3.106)$$

Relacije neodredjenosti dokazuju se korišćenjem Schwarz-ove nejednakosti. Označimo

$$A' = A - \langle A \rangle = A - \langle \psi | A | \psi \rangle, \quad (3.107)$$

$$|\phi\rangle = A' |\psi\rangle, \quad (3.108)$$

i slično

$$B' = B - \langle B \rangle = B - \langle \psi | B | \psi \rangle, \quad |\chi\rangle = B' |\psi\rangle. \quad (3.109)$$

Iz relacije

$$\langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | A'^2 - 2A' \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 | \psi \rangle = \langle \psi | A'^2 - \langle A \rangle^2 | \psi \rangle = (\Delta A)^2 \quad (3.110)$$

i njoj analogne za $\langle \chi | \chi \rangle$ dobijamo vezu izmedju levih strana nejednakosti (3.22) i (3.106),

$$\langle \phi | \phi \rangle \langle \chi | \chi \rangle = (\Delta A)^2 (\Delta B)^2. \quad (3.111)$$

S druge strane, pošto se od A razlikuje do na realnu konstantu, A' je hermitski operator pa imamo

$$\langle \phi | \chi \rangle = \langle \psi | A' B' | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{1}{2} \{A', B'\} + \frac{1}{2} [A', B'] | \psi \rangle, \quad (3.112)$$

gde je smo sa $\{A, B\}$ označili antikomutator operatora A i B ,

$$\{A, B\} = AB + BA. \quad (3.113)$$

Koristeći da je $[A', B'] = [A, B]$, poslednju relaciju možemo da napišemo i kao

$$\langle \phi | \chi \rangle = \frac{1}{2} \langle \{A', B'\} \rangle + \frac{1}{2} \langle [A, B] \rangle. \quad (3.114)$$

Već smo rekli da su očekivane vrednosti hermitskog operatora realni, a antihermitskog imaginarni brojevi. Sa druge strane, iz osobine adjungovanja (3.58) lako se proverava da je antikomutator odnosno simetrizovani zbir dva hermitska operatora hermitski, dok je komutator antihermitski operator. Zato je (3.114) u stvari razlaganje kompleksnog broja $\langle \phi | \chi \rangle$ na njegov realni i imaginarni deo, pa imamo

$$|\langle \phi | \chi \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle \{A', B'\} \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2, \quad (3.115)$$

što dokazuje relacije neodređenosti.

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 neodređenosti $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}$ ograničen odozdo,

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.116)$$

i ovo je Heisenberg-ova relacija neodređenosti: 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 neodređenost impulsa povećava.

Relacije neodređenosti daju nam potreban uslov da dve opservable mogu da se izmere istovremeno: to je uslov da opservable komutiraju,

$$[A, B] = 0, \quad (3.117)$$

i ovakve opservable zovu se kompatibilne opservable. Iz linearne algebre znamo da se one mogu istovremeno dijagonalizovati, odnosno da imaju zajednički svojstveni bazis.

3.6 OPERATORI KOORDINATE I IMPULSA

Kao što smo već pomenuli, u prostoru talasnih funkcija $\psi(x)$ kanonsku komutacionu relaciju

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (3.118)$$

realizuju multiplikativni i diferencijalni operator

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}. \quad (3.119)$$

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 (3.118) nema konačne reprezentacije lako se vidi: ako bismo izračunali trag leve i desne strane

ove jednačine u n -dimenzionom prostoru, na levoj strani dobili bismo 0 a na desnoj $i\hbar n$, što je kontradikcija. U beskonačnodimenzionom slučaju trag i operacije pod tragom definisane su samo kad sve konvergira, što nije slučaj sa (3.118). Ono što je međutim netrivialno i veoma važno je da je reprezentacija (3.119) u osnovi jednoznačna: ovaj iskaz (naravno u svojoj preciznoj formi) zove se Stone-von Neumann-ova teorema.

Napišimo dakle svojstvenu jednačina za koordinatu

$$\hat{x}\psi_a(x) = x\psi_a(x) = a\psi_a(x). \quad (3.120)$$

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 uopštenih funkcija: to delta-funkcija $\delta(x - a)$ koja u svim tačkama ima vrednost 0 osim u $x = a$, gde je beskonačna.

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 određene vrednosti koordinate¹⁴. Posmatrajmo za $\alpha > 0$ jednoparametarsku familiju

$$\delta(x - a, \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha|k| + ik(x-a)} dk = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + (x - a)^2}. \quad (3.121)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a, \alpha) dx = 1. \quad (3.122)$$

Delta-funkcija može da se definiše kao limes

$$\delta(x - a) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \delta(x - a, \alpha), \quad (3.123)$$

a iz (3.121) možemo da odredimo i vrednost limesa,

$$\delta(x - a) = \begin{cases} 0, & x \neq a \\ \infty, & x = a \end{cases} \quad (3.124)$$

Pošto integral (3.122) ne zavisi od α , imamo i

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) dx = 1. \quad (3.125)$$

¹⁴Doduše ova stanja nisu normirana: iskaz ne važi za stanja posle normiranja.

Poslednja formula kvantifikuje na neki način kolika je singularnost δ -funkcije u tački a . Ako u (3.121) uzmemo limes $\alpha \rightarrow 0$, dobijamo Fourier-ovu transformaciju δ -funkcije

$$\delta(x - a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-a)} dx. \quad (3.126)$$

U reprezentaciji (3.123) može se takodje pokazati da važi formula koja generališe (3.122):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) \psi(x) dx = \psi(a). \quad (3.127)$$

Dokaz važi za funkcije $\psi(x)$ koje su dovoljno regularne da se redosled limesa i integracije može menjati i izvodi se razvojem u Taylor-ov red oko a .

Postoje i druge familije funkcija koje aproksimiraju δ -funkciju, a u fizici se najčešće se koriste sledeće:

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}}, \quad (3.128)$$

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin \alpha x}{\pi \alpha x^2}. \quad (3.129)$$

Formula (3.127) zapravo je identična definiciji δ -funkcije kao funkcionala odnosno elementa dualnog prostora, (3.90), i u matematički strogoj formulaciji je definicija: često se uprošćeno ali u stvari sasvim tačno kaže da se δ -funkcija koristi samo ‘pod integralom’. I dalje već smo napomenuli, dve uopštene funkcije $f(x)$ i $g(x)$ su jednake ako su ‘jednake pod integralom’, odnosno ako za svako $\psi(x)$ važi jednakost

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)\psi(x) dx. \quad (3.130)$$

Koristeći ovu osobinu može se pokazati da je

$$(x - a)\delta(x - a) = 0, \quad (3.131)$$

tj. da je rešenje svojstvene jednačine (3.120),

$$\psi_a(x) = \delta(x - a). \quad (3.132)$$

Pošto je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_a^*(x)\psi_b(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a)\delta(x - b) dx = \delta(b - a), \quad (3.133)$$

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 osobina svojstvenih funkcija kontinualnog spektra, jer, da naglasimo, svojstvene vrednosti koordinate nisu ničim ograničene već su proizvoljne tačke realne ose: spektar koordinate je 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 postoje stanja sa tačno određenim položajem. To nam govore i Heisenberg-ove relacije neodređenosti.

U Dirac-ovoj notaciji svojstveni vektor koordinate za svojstvenu vrednost a označavaćemo sa $|a\rangle$. Analogno relaciji (3.73) važi

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} a|a\rangle\langle a| da = \int_{-\infty}^{+\infty} x|x\rangle\langle x| dx \quad (3.134)$$

a sumiranje po svojstvenim vrednostima je u stvari integracija po parametru a ili x koji je kontinualan. Skup svojstvenih vektora je kompletan kao i u diskretnom slučaju (3.54),

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx, \quad (3.135)$$

tako da za svaki vektor $|\psi\rangle$ važi razvoj po bazu

$$|\psi\rangle = I|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\psi\rangle dx. \quad (3.136)$$

Koeficijenti u razvoju $\langle x|\psi\rangle$ su u stvari talasne funkcije,

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x), \quad (3.137)$$

odnosno, talasna mehanika je koordinatna reprezentacija kvantne mehanike u kojoj su sve veličine zapisane u svojstvenom bazu 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

$$-i\hbar \frac{d\chi_k}{dx} = \hbar k \chi_k. \quad (3.138)$$

Kao što smo već više puta videli, ova jednačina se lako rešava. Njena rešenja su ravni talasi

$$\chi_k(x) = C e^{ikx} = \langle x|k\rangle \quad (3.139)$$

i postoje za svaki realan broj k . 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 (3.133) normiraju se na δ -funkciju,

$$\langle q|k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_q^*(x) \psi_k(x) dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(q-k)x} dx = \delta(q-k), \quad (3.140)$$

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 (3.134-3.135) važi

$$\hat{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar k |k\rangle \langle k| dk, \quad I = \int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle \langle k| dk. \quad (3.141)$$

Proizvoljni vektor $|\psi\rangle$ možemo pisati i u impulsnoj reprezentaciji,

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle \langle k|\psi\rangle dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) |k\rangle dk, \quad (3.142)$$

gde smo koeficijente razvoja označili sa $\tilde{\psi}(k) = \langle k|\psi\rangle$. Vezu izmedju koordinatne i impulsne reprezentacije nije teško odrediti:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x| \int_{-\infty}^{+\infty} dk |k\rangle \langle k|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \tilde{\psi}(k) dk, \quad (3.143)$$

to je Fourier-ova transformacija.

3.7 ★ 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 principu korespondencije koji je u stvari naredni postulat kvantne mehanike. Princip korespondencije kaže da, KLASIČNI SISTEM KOJI OPISAN GENERALISANIM KOORDINATAMA x_i I KANONSKI KONJUGOVANIM IMPULSIMA p_i TJ. VELIČINAMA ČIJA JE POISSON-OVA ZAGRADA

$$\{x_i, p_j\}_{PZ} = \delta_{ij}, \quad (3.144)$$

SE KVANTNOJ MEHANICI OPISUJE OPERATORIMA \hat{x}_i I \hat{p}_i KOJI ZADOVOLJAVAJU HEISENBERG-OVE KOMUTACIONE RELACIJE¹⁵

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (3.145)$$

OSTALE FIZIČKE VELIČINE DOBIJAJU SE IZ ODGOVARAJUĆIH KLASIČNIH IZRAZA PRIMENOM OIZABRANOG OPERATORSKOG UREDJENJA.

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

$$\{f, g\}_{PZ} \mapsto -\frac{i}{\hbar} [\hat{f}, \hat{g}]. \quad (3.146)$$

¹⁵ Algebra definisana relacijama $[x, p] = i\hbar C$, $[x, C] = 0$, $[p, C] = 0$ zove se Heisenberg-ova algebra.

Ovaj iskaz zapravo nije sasvim tačan jer ne važi za sve funkcije f i g : može se pokazati da ne postoji preslikavanje $\widehat{}$

$$x \mapsto \hat{x}, \quad p \mapsto \hat{p}, \quad \hat{f}(x, p) \mapsto \hat{f}, \quad (3.147)$$

za koje važi

$$\widehat{\{f, g\}}_{PZ} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{f}, \hat{g}], \quad (3.148)$$

za proizvoljne funkcije kanonskih promenljivih¹⁶. Pokazaćemo međutim da se može nametnuti zahtev da jednakost (3.148) važi u vodećem redu po Planck-ovoj konstanti \hbar .

Preslikavanje na neki način ‘obrnuto’ od kvantizacije (3.147) je klasični limes $\hbar \rightarrow 0$ ¹⁷. Pokazaćemo da za proizvoljne funkcije \hat{f} i \hat{g} važi

$$[\hat{f}, \hat{g}] \mapsto i\hbar \{f, g\}_{PZ} + O(\hbar^2), \quad (3.149)$$

odnosno da klasični limes daje ne samo nulti red u kome sve veličine komutiraju, kao u klasičnoj mehanici, nego i prvi red u razvoju po \hbar . Smisao gornjeg iskaza vidi se preciznije kad se računaju komutatori. Na primer, iz relacije

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (3.150)$$

lako se pokazuje da je

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = i\hbar n x^{n-1}, \quad (3.151)$$

pa za proizvoljnu funkciju $\hat{f}(\hat{x})$ važi

$$[\hat{f}(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar \frac{d\hat{f}}{d\hat{x}}. \quad (3.152)$$

Slično, za funkciju $\hat{g}(\hat{p})$ koja zavisi samo od impulsa imamo

$$[\hat{x}, \hat{g}(\hat{p})] = i\hbar \frac{d\hat{g}}{d\hat{p}}. \quad (3.153)$$

Medjutim ako funkcije \hat{f} i \hat{g} zavise od obe kanonske promenljive, onda razvoj u Taylor-ov red nije *a priori* dobro definisan i komutator $[\hat{f}, \hat{g}]$ ne može da se izračuna pre nego što se definiše operatorsko uređenje. Može ipak da se odredi vodeći doprinos tj. član linearan po \hbar ,

$$[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{g}}{\partial \hat{p}} - \frac{\partial \hat{g}}{\partial \hat{x}} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{p}} \right) + O(\hbar^2), \quad (3.154)$$

¹⁶Nalaženje 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.

¹⁷Preciznije, klasični limes kinematike. U dinamičkom smislu klasični limes dat je Ehrenfest-ovom teoremom koju navodimo u jednom od narednih poglavlja.

a rezultat je proporcionalan Poisson-ovoj zagradi.

Računajući (3.154) 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 definišemo redosled kojim se operatori množe. Konkretno: pretpostavimo npr. da u klasičnom hamiltonijanu imamo sabirak x^2p . 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 tako da odgovara eksperimentu. 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.

Za razliku od teorije polja, mehanički sistemi odnosno sistemi sa konačnim brojem stepeni slobode imaju 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

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (3.155)$$

gde su \hat{x} i \hat{p} hermitski operatori, ekvivalentna Schrödinger-ovoj reprezentaciji

$$\hat{x} \rightarrow x, \quad \hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (3.156)$$

Dodatni uslov je da se koordinata i impuls reprezentuju u separabilnom prostoru stanja.

Dokaz Stone-von Neumann-ove teoreme izvodi se razmatranjem eksponenata od \hat{x} i \hat{p} koje je prvi put uveo Weyl¹⁸,

$$U(\sigma) = e^{-i\sigma\hat{p}}, \quad V(\tau) = e^{-i\tau\hat{x}}. \quad (3.157)$$

Ovde taj dokaz nećemo analizirati, ali pošto se Weyl-ova grupa veoma često koristi, zadržaćemo se malo na njenim osobinama i 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

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \dots \quad (3.158)$$

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 (3.158) 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

$$e^{i\sigma\hat{p}} \hat{x} e^{-i\sigma\hat{p}} = \hat{x} + \hbar\sigma. \quad (3.159)$$

¹⁸H. Weyl, The theory of groups and quantum mechanics, Dover Publications, 1931.

Moženjem sa U sleva poslednja relacija se može prepisati kao

$$[\hat{x}, U(\sigma)] = \hbar\sigma U(\sigma). \quad (3.160)$$

Sada može da se odredi i $V^{-1}UV$. Korišćenjem (3.158) i (3.160) dobija se

$$V^{-1}(\tau)U(\sigma)V(\tau) = e^{i\tau\sigma\hbar}U(\sigma), \quad (3.161)$$

odnosno

$$U(\sigma)V(\tau) = e^{i\tau\sigma\hbar}V(\tau)U(\sigma), \quad (3.162)$$

ili, ako označimo $\hat{u} = U(\sigma)$, $\hat{v} = V(\sigma)$ i $q = e^{i\tau\sigma\hbar}$,

$$\hat{u}\hat{v} = q\hat{v}\hat{u}. \quad (3.163)$$

Ova relacija definiše Weyl-ovu algebru. Interesantno je da Weyl-ova algebra (3.163), za razliku od Heisenberg-ove algebre (3.155), 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

$$\hat{v} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q^2 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q^{n-1} \end{pmatrix}, \quad \hat{u} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.164)$$

Razume se, izraze (3.164) ne možemo rešiti po \hat{x} i \hat{p} i tako dobiti konačnodimenzionu reprezentaciju Weyl-ove algebre jer logaritam nije dobro tj. jednoznačno definisan čak ni za kompleksne brojeve.

Kanonska komutaciona relacija (3.155) 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 Minkovskog. Zato je prirodno da se pretpostavi da se u zakrivljenom prostoru, ili na visokim energijama ona modifikuje. Jedna modifikacija koja sledi iz teorije struna data je sa

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar(1 + \beta\hat{p}^2), \quad (3.165)$$

gde je $\beta > 0$ dimenziona konstanta koja zadaje skalu energije na kojoj se odstupanja od standardne kvantne mehanike uočavaju. Pošto je relacija (3.165) dosta jednostavna a ima interesantne posledice, na njoj ćemo se malo zadržati. Jedna od posledica teorije u kojoj važi (3.165) je da se položaj ne može meriti proizvoljno precizno. Ako napišemo u ovom slučaju relacije neodređenosti,

$$\Delta\hat{x} \Delta\hat{p} \geq \frac{1}{2} |[\hat{x}, \hat{p}]| = i\hbar(1 + \beta\langle\hat{p}^2\rangle) = i\hbar(1 + \beta(\Delta\hat{p})^2 + \beta\langle\hat{p}\rangle^2), \quad (3.166)$$

dobijamo

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}(1 + \beta(\Delta\hat{p})^2), \quad (3.167)$$

odnosno

$$\Delta\hat{x} \geq \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{\Delta\hat{p}} + \beta\Delta\hat{p} \right). \quad (3.168)$$

Iz grafika zavisnosti $\Delta\hat{x}(\Delta\hat{p})$ Ova sličica! $y = \frac{\hbar}{2}(\frac{1}{x} + \beta x)$ lako vidi se da neodređenost $\Delta\hat{x}$ ima minimalnu vrednost za $\Delta\hat{p} = 1/\sqrt{\beta}$, odnosno da je

$$\Delta\hat{x} \geq \hbar\sqrt{\beta}. \quad (3.169)$$

Ovakva osobina poželjna je na primer u kvantnoj gravitaciji, jer principijelna nemogućnost lokalizacije može da bude rešenje problema singularnosti u centru crnih rupa. Reprerentacija algebre (3.165) na prostoru kvadratno-integrabilnih funkcija data je u radu¹⁹ i sem gore navedene ima i druge interesantne osobine.

3.8 DINAMIKA KVANTNE MEHANIKE

Prvi postulati kvantovanja zadaju kinematiku kvantne mehanike, tj. njen matematički okvir, i kao što smo videli neophodnost ovakvog opisa sledi iz eksperimenata. 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 upoznali, ali formulisaćemo je ponovo i malo opštije, i zapisati u Dirac-ovoj notaciji. Dakle dinamički postulat kvantne mehanike glasi: EVOLUCIJA STANJA FIZIČKOG SISTEMA OPISUJE SE SCHRÖDINGER-OVOM JEDNAČINOM,

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (3.170)$$

GDE JE \hat{H} HAMILTONIJAN SISTEMA DOBIJEN KVANTOVANJEM KLASIČNOG HAMILTONIJANA H .

Pošto je jednačina (3.170) linearna i važi za sva stanja $|\Psi(t)\rangle$, ona se može formalno rešiti uvodjenjem operatora evolucije $\hat{U}(t, t_0)$:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle, \quad (3.171)$$

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

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U}, \quad (3.172)$$

¹⁹A. 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].

a početni uslov za $\hat{U}(t)$ je

$$\hat{U}(0) = I. \quad (3.173)$$

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 $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$, (3.172) 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

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} U^{-1} = i\hbar \frac{d \log \hat{U}}{dt} = \hat{H} \quad (3.174)$$

i pretpostavke da $\frac{d\hat{U}}{dt}$ komutira sa \hat{U} dobijamo

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}. \quad (3.175)$$

Naravno kao što znamo, svojstvena stanja hamiltonijana (koji ne zavisi od vremena) su stacionarna, jer ako je

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (3.176)$$

imamo i

$$|n(t)\rangle = \hat{U}(t)|n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}|n\rangle. \quad (3.177)$$

Medjutim ako hamiltonijan zavisi eksplicitno od vremena, rešenje jednačine (3.172) 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 $\langle \hat{A} \rangle$ 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 veličina vezana za promenljivo spoljašnje polje. Sa druge strane, prvi i treći sabirak zamenjujemo iz Schrödinger-ove jednačine (3.170) i njoj adjungovane, pa dobijamo

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle. \quad (3.178)$$

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

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}_{PZ}, \quad (3.179)$$

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, za hamiltonijan $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ dobijamo

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle[\hat{x}, \hat{H}]\rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} \right\rangle = \left\langle \frac{\hat{p}}{m} \right\rangle, \quad (3.180)$$

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle[\hat{p}, \hat{H}]\rangle = -\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} \right\rangle. \quad (3.181)$$

Poslednje dve jednačine analogne su, opet, Hamilton-ovim jednačinama kretanja za položaj i impuls ali naravno nisu identične jer

$$f(\langle\hat{x}\rangle) \neq \langle f(\hat{x}) \rangle. \quad (3.182)$$

3.9 ★ 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, naziva se Schrödinger-ova slika: ona je prirodno proistekla iz analogije ‘talasa materije’ sa elektromagnetnim odnosno klasičnim talasima, i koja je bila osnova intuicije Schrödinger-a, de Broglie-a i drugih. Ali talasna funkcija nije direktno merljiva fizička veličina već su to na primer gustina verovatnoće nalaženja čestice, $\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ i očekivane vrednosti, recimo $\langle \hat{r}^2 \rangle = \int r^2 \rho(\vec{r}, t) dV$, koje su kvadratne po Ψ (nekad se kaže, bilinearne). Zbog toga 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; pri tome se vremensku evolucija može ‘prebaciti’ sa stanja na opservable. Naime, u Schrödinger-ovoj slici imamo

$$|\Psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle_S, \quad \hat{A}_S(t) = \hat{A}_S(0) \quad (3.183)$$

za osnovne operatore kao što su položaj, impuls itd. Označićemo početne vrednosti stanja i opservable sa

$$|\Psi(0)\rangle_S = |\Psi\rangle, \quad \hat{A}_S(0) = \hat{A}. \quad (3.184)$$

Očekivana vrednost operatora \hat{A}_S u stanju $|\Psi_S\rangle$, izračunata u Schrödinger-ovoj slici je

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \Psi(t) | \hat{A}_S | \Psi(t) \rangle_S = \langle \Psi | \hat{U}^{-1}(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \Psi \rangle. \quad (3.185)$$

Naravno, ista očekivana vrednost se dobija kad sve veličine transformišemo nekim unitarnim operatorom: izbor operatora $\hat{U}^{-1}(t)$ daje tzv. Heisenberg-ovu sliku. Ona se definiše kao

$$|\Psi(t)\rangle_H = \hat{U}^{-1}(t)|\Psi(t)\rangle_S = |\Psi\rangle, \quad \hat{A}_H(t) = \hat{U}^{-1}(t)\hat{A}\hat{U}(t). \quad (3.186)$$

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,

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_S}{dt} = \hat{H}_S|\Psi(t)\rangle_S, \quad i\hbar \frac{d\hat{A}_S}{dt} = 0, \quad (3.187)$$

jednačine kretanja u Heisenberg-ovoj slici glase

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_H}{dt} = 0, \quad i\hbar \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)]. \quad (3.188)$$

Naravno početni uslov je i ovde

$$|\Psi(0)\rangle_H = |\Psi\rangle, \quad \hat{A}_H(0) = \hat{A} \quad (3.189)$$

jer je u trenutku $t = 0$, $\hat{U}(0) = I$. Jednačina (3.188) je analogna Hamilton-ovoj formi klasičnog zakona kretanja i dobija se iz

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt}(\hat{U}^{-1}\hat{A}_S\hat{U}) &= i\hbar \left(\frac{d\hat{U}^{-1}}{dt} \hat{A}_S\hat{U} + \hat{U}^{-1}\hat{A} \frac{d\hat{U}^{-1}}{dt} \right) \\ &= -\hat{U}^{-1}\hat{H}_S\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{A}_S\hat{U} + \hat{U}^{-1}\hat{A}_S\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{H}_S\hat{U}, \end{aligned}$$

što zaključujemo iz jednačine (3.172) i njoj adjungovane. Naravno kada je sistem konzervativan, $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ pa je i

$$\hat{H}_S(t) = \hat{H}_H(t) = \hat{H}. \quad (3.190)$$

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}' ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \quad (3.191)$$

Po pravilu, $[\hat{H}_0, \hat{H}'] \neq 0$. Iz Schrödinger-ove slike u interakcionu prelazi se operatorom $\hat{U}_0(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$:

$$|\Psi(t)\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Psi(t)\rangle_S = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi\rangle, \quad \hat{A}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}.$$

Očigledno, u interakcionoj slici i stanja i opservable zavise od vremena. Diferenciranjem poslednje jednačine možemo da dobijemo odgovarajuće zakone promene:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{H}'_I(t)|\Psi(t)\rangle_I, \quad i\hbar \frac{d\hat{A}_I(t)}{dt} = [\hat{A}_I(t), \hat{H}_{0,I}(t)]. \quad (3.192)$$

Stanja evoluiraju po interakcionom delu hamiltonijana, a opservable po slobodnom. Ovo je važno jer omogućava da se interagujuća polja kvantuju na isti način kao slobodna polja.

3.10 OPERATORI KREACIJE I ANIHILACIJE

Deo 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-ovog prostora, primenjuje se i na kvantovanje polja ali i u teoriji reprezentacija Lie-jevih grupa.

Svojstveni problem hamiltonijana $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ može se rešiti algebarskom analizom osobina ovog operatora. Uvedimo (bezdimenzioni) operator anihilacije

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} = \hat{\xi} + i\hat{\eta} \quad (3.193)$$

Operator \hat{a} očigledno nije hermitski; njegov adjungovani \hat{a}^\dagger zove se operator kreacije,

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} = \hat{\xi} - i\hat{\eta} \quad (3.194)$$

Proizvod

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}, \quad (3.195)$$

tzv. broj ekscitacija ili operator broja čestica, je hermitski i nenegativan operator. Lako se proverava da važi komutaciona relacija

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad (3.196)$$

kao i

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger. \quad (3.197)$$

Sem toga, hamiltonijan oscilatora se može izraziti preko \hat{a} , \hat{a}^\dagger :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar\omega (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right), \quad (3.198)$$

tako da je rešavanje svojstvenog problema od \hat{H} ekvivalentno nalaženju svojstvenih stanja i vrednosti od \hat{N} .

Označimo svojstvene vektore operatora \hat{N} sa $|n\rangle$,

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \quad (3.199)$$

Ovim u stvari pretpostavljamo da postoje svojstveni vektori, odnosno vektori koji se mogu normirati, ili još preciznije da \hat{N} ima bar jedno stanje diskretnog spektra. Pošto je \hat{N} nenegativan operator, brojevi n su pozitivni ili nula. Za konstrukciju je ključna sledeća opservacija: pored $|n\rangle$, i svaki vektor $|\varphi\rangle = \hat{a}^\dagger|n\rangle$ je svojstveni vektor od \hat{N} . To se vidi iz sledećeg niza jednakosti

$$\hat{N}|\varphi\rangle = \hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1)|n\rangle = (n + 1)|\varphi\rangle, \quad (3.200)$$

pa zaključujemo da je $|\varphi\rangle$ svojstveni vektor za svojstvenu vrednost $n + 1$,

$$|\varphi\rangle = C |n + 1\rangle. \quad (3.201)$$

Medjutim delovanje operatora kreacije može da promeni dužinu vektora. Ako je $|n\rangle$ normiran, kvadrat dužine vektora $|\varphi\rangle$ dat je sa

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|n\rangle = n + 1. \quad (3.202)$$

Odavde vidimo da je koeficijent proporcionalnosti $C = \sqrt{n + 1}$, tako da

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle. \quad (3.203)$$

Slično se može pokazati da operator anihilacije deluje kao

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle. \quad (3.204)$$

Operator kreacije \hat{a}^\dagger podiže svojstvenu vrednost od \hat{N} (i broj kvanata, $\hbar\omega$) za jedan, a operator anihilacije \hat{a} je smanjuje za jedan. Prema tome, važi i

$$\hat{a}^k|n\rangle = \sqrt{n(n - 1) \dots (n - k + 1)}|n - k\rangle. \quad (3.205)$$

Ovom konstrukcijom dobili smo da, polazeći od jedne svojstvene vrednosti n i svojstvenog vektora $|n\rangle$ dobijamo, primenom \hat{a}^\dagger i \hat{a} , čitav niz vrednosti $n + k$ i $n - k$ za svaki ceo broj (koraka) k . Ali, to istovremeno znači da spektar sadrži i negativne svojstvene vrednosti, jer k može biti proizvoljno veliko! Drugim rečima, naša konstrukcija je kontradiktorna jer videli smo da su zbog pozitivnosti operatora \hat{N} sve njegove svojstvene vrednosti nenegativna. Kontradikcija postoji uvek osim u slučaju kada se među svojstvenim vrednostima nalazi 0. Tada delovanje operatora anihilacije daje

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad (3.206)$$

jer je $\sqrt{0} = 0$, i time se deo niza svojstvenih vektora ispod 0 prekida. Ako medjutim krenemo od nekog necelog broja, na primer $n = 0.2$, ne dobijamo uslov prekidanja niza: relacija (3.204) tada glasi

$$\hat{a}|0.2\rangle = \sqrt{0.2}| - 0.8\rangle, \quad (3.207)$$

i dobijamo, kontradiktorno, svojstveni vektor $| - 0.8\rangle$ koji ima negativnu svojstvenu vrednost (ili negativan kvadrat norme). Dakle, samo u slučaju kada je skup svojstvenih vektora upravo $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle \dots\}$, navedeno rešenje svojstvenog problema ima smisla. Svojstvene vrednosti od \hat{N} su celi pozitivni brojevi ili 0. Zahtev pozitivnosti \hat{N} u ovom izvodjenju zapravo je ekvivalentan zahtevu normalizabilnosti rešenja kada smo rešavali diferencijalnu jednačinu za harmonijski oscilator.

Ovim smo istovremeno rešili i svojstveni problem hamiltonijana harmonijskog oscilatora i dobili njegov spektar,

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (3.208)$$

Osnovno stanje tj. stanje najniže energije $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad (3.209)$$

naziva se vakuum. Talasna funkcija osnovnog stanja, $\langle x|0\rangle = \psi_0(x)$, može se odrediti i iz uslova za vakuum,

$$\hat{a}\psi_0 = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} \right) \psi_0(x) = 0. \quad (3.210)$$

Lako se proverava da je rešenje ove jednačine, koja je prvog reda, Gauss-ov talasni paket (2.26). Iz talasne funkcije osnovnog stanja delovanjem operatora \hat{a}^\dagger mogu se odrediti talasne funkcije ostalih pobudjenog stanja, odnosno svi svojstveni vektori.

Mada operator anihilacije \hat{a} nije hermitski, njegov svojstveni problem

$$\hat{a}|z\rangle = (\hat{\xi} + i\hat{\eta})|z\rangle = z|z\rangle, \quad (3.211)$$

ima rešenje za proizvoljno kompleksno z : ta rešenja nazivaju se koherentna stanja i, lako je proveriti, data su Gauss-ovim paketima:

$$\langle x|z\rangle = c e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}zx} = c e^{-\xi^2 + 2\xi z} \quad (3.212)$$

gde je c konstanta normiranja,

$$|c|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{(z+z^*)^2}{2}}. \quad (3.213)$$

Možda najvažnija osobina koherentnih stanja je da su ona ‘skoro klasična’, tj. da je u ovim stanjima proizvod neodređenosti $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \hbar/2$, minimalan. Svojstveni bazis od \hat{a} , $\{|z\rangle\}$, je normiran ali i kontinualan: razume se, stanja nisu medjusobno ortogonalna. Važna osobina skupa koherentnih stanja je da je ovaj bazis ‘prekompletan’ (na engleskom, ‘overcomplete’), tj. da do na faktor daje razlaganje jedinice

$$I = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \int dz dz^* |z\rangle\langle z|. \quad (3.214)$$

Druga važna formula je razvoj koherentnih stanja po bazisu $\{|n\rangle\}$,

$$|z\rangle = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (3.215)$$

3.11 ZADACI

1 Pokazati da je $\hat{U}\psi(x) = \psi(x+a)$ unitaran operator.

2★ Pokazati da je Sturm-Liouville-ova jednačina

$$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + (\lambda - q(x))y = 0 \quad (3.216)$$

svojtveni problem hermitskog operatora.

3★ Kinematički prostor stanja ‘loop’-kvantne gravitacije je prostor kvadratno integrabilnih funkcija jedne promenljive, ali definisan na prostoru koji se zove ‘Bohr-ova kompaktifikacija realne ose’²⁰. Ova kompaktifikacija definisana je sledećom promenom skalarnog proizvoda

$$\langle \psi | \phi \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \int_{-L}^L \psi^*(x) \phi(x) dx. \quad (3.217)$$

Pokazati da su za ovakav skalarni proizvod ravni talasi ortonormiran bazis, $\langle p_i | p_j \rangle = \delta_{ij}$. Pošto ravnih talasa ima kontinualno mnogo, prostor nije separabilan. Interesantno je da ovaj kinematički prostor jednačina kretanja (Wheeler-de Witt-ova jednačina) deli na razdvojene sektore pa je dinamički prostor stanja (svemira u ovom slučaju) običan Hilbert-ov prostor.

4 Pokazati da za δ -funkciju važi:

$$\text{a) } \delta'(x) = -\delta'(-x), \quad \text{b) } \delta(bx) = \frac{\delta(x)}{|b|},$$

$$\text{c) } \int_b^c \delta(x-a) dx = \theta(c-a)\theta(a-b), \text{ gde je } \theta(x-a) = \begin{cases} 1, & x > a \\ 0, & x < a \end{cases},$$

$$\text{d) } \theta'(x-a) = \delta(x-a).$$

5 Pokazati da se definiciona formula za δ -funkciju svodi na razlaganje jedinice:

$$\langle x | \psi \rangle = \int \langle x | y \rangle \langle y | \psi \rangle dy. \quad (3.218)$$

6 Pokazati da su

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}}, \quad (3.219)$$

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin \alpha x}{\pi \alpha x^2}. \quad (3.220)$$

aproksimacije δ -funkcije, tj. da za njih važe osobine analogne (3.122,3.6,3.127).

7★ Pokazati da je

$$S(i(ap + bx + cC)) = \begin{pmatrix} 0 & a & c \\ 0 & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.221)$$

²⁰Po Haroldu Bohr-u; pogledati npr. u radu A. Ashtekar, S. Fairhurst and J. L. Willis, *Quantum gravity, shadow states, and quantum mechanics*, Class. Quant. Grav. **20** (2003) 1031 [gr-qc/0207106].

verna reprezentacija Heisenberg-ove algebre.

8. ★ Moyal-ov proizvod

9. Napisati relacije (3.203) i (3.204) u koordinatnoj reprezentaciji i pokazati da one daju rekurentne relacije između Hermité-ovih polinoma.

10. Odrediti operatore kreacije i anihilacije u Heisenberg-ovoj slici, $\hat{a}(t)$, $\hat{a}^\dagger(t)$, a onda i $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$. Odrediti komutatore $[\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2)]$, $[\hat{x}(t_1), \hat{p}(t_2)]$ u različitim trenucima vremena.

11 ★ Odrediti, za koherentna stanja $|z_1\rangle$ i $|z_2\rangle$, skalarni proizvod $\langle z_1|z_2\rangle$, kao i $\langle z|\hat{x}|z\rangle$, $\langle z|\hat{p}|z\rangle$.

$$|\langle z_1|z_2\rangle|^2 = \frac{m\omega}{2\hbar} e^{-|z_1-z_2|^2} \text{ (prov!): } \langle z|\hat{x}|z\rangle = \text{Re}(z), \quad \langle z|\hat{p}|z\rangle = \text{Im}(z).$$

GLAVA 4

TRODIMENZIONINI SISTEMI

U ovoj kratkoj glavi uvešćemo još jednu važnu fizičku opservablu, moment impulsa, i odrediti osobine kretanja elektrona u Coulomb-ovom potencijalu i homogenom magnetnom polju.

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. Moment impulsa definiše se, kao i u klasičnoj mehanici, izrazom $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, odnosno

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x. \quad (4.1)$$

Prvo možemo da primetimo da su komponente operatora momenta impulsa dobro tj. jednoznačno definisane gornjim izrazom jer raznoimene koordinate i impulsi komutiraju,

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (4.2)$$

pa problem operatorskog uredjenja ne postoji. Koristeći potpuno antisimetrični tenzor u tri dimenzije (tenzor Levi-Civita) ϵ_{ijk} koji je antisimetričan pri izmeni svaka dva indeksa, i $\epsilon_{123} = 1$, vektorski proizvod može da se izrazi kao

$$L_i = \epsilon_{ijk}x_jp_k. \quad (4.3)$$

Ovde se, kao i ranije, koristi sumaciona konvencija: po svakom ponovljenom indeksu se podrazumeva sumiranje po svim njegovim vrednostima, tj. od 1 do 3.

Komponente momenta impulsa medjusobno ne komutiraju: lako se može proveriti da je

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad (4.4)$$

i opštije,

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (4.5)$$

Pošto je \vec{L} proizvod koordinate i impulsa, on ima dimenzije dejstva odnosno Planck-ove konstante \hbar . Sve komponente momenta impulsa komutiraju sa \vec{L}^2 ,

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_i L_i. \quad (4.6)$$

Ove komutacione relacije znače da se moment impulsa kao vektor odnosno sve tri njegove komponente ne mogu istovremeno tačno izmeriti. Maksimalna informacija o momentu impulsa koja se može dobiti u kvantnomehaničkim merenjima je vrednost njegovog kvadrata L^2 i jedne od projekcija, na primer L_z . Osim komponenti L_i često se koriste operatori

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y, \quad L_- = (L_+)^{\dagger} \quad (4.7)$$

za koje važi

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z. \quad (4.8)$$

Izražen preko L_{\pm} i L_z , kvadrat momenta impulsa je

$$\vec{L}^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z. \quad (4.9)$$

Sad ćemo rešiti, u koordinatnoj reprezentaciji, zajedničku svojstvenu jednačinu za L^2 i L_z . Pošto moment impulsa, videćemo a i znamo iz klasične mehanike, generiše rotacije, najjednostavnije je da ga reprezentujemo u sfernim koordinatama. Veza izmedju Descartes-ovih koordinata (x, y, z) i sfernih koordinata (r, θ, φ) je

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta, \quad (4.10)$$

odnosno

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, \quad \varphi = \arctan \frac{y}{x}, \quad (4.11)$$

pri čemu njihove vrednosti pripadaju intervalima $x, y, z \in (-\infty, +\infty)$, odnosno $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi)$, $\varphi \in [0, 2\pi)$. Da bi se odredio oblik operatora momenta impulsa

$$L_i = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \partial_k \quad (4.12)$$

treba izvršiti smenu promenljivih. Iz

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (4.13)$$

i izraza za koordinate (4.10) dobijamo

$$\begin{aligned}
 L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\
 L_x &= i\hbar \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\
 L_y &= -i\hbar \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\
 L_{\pm} &= \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

kao i

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \tag{4.15}$$

Vidimo da komponente \vec{L} ne zavise od radijalne koordinate r . Prema tome pri rešavanju zajedničkog svojstvenog problema

$$\begin{aligned}
 L^2 \psi(r, \theta, \varphi) &= a\hbar^2 \psi(r, \theta, \varphi) \\
 L_z \psi(r, \theta, \varphi) &= b\hbar \psi(r, \theta, \varphi),
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

možemo odmah razdvojiti promenljive,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) f(\theta, \varphi). \tag{4.17}$$

Pri tome gornje jednačine postaju

$$\hbar^2 R \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right) = a\hbar^2 R f \tag{4.18}$$

$$-i\hbar R \frac{\partial f}{\partial \varphi} = b\hbar R f, \tag{4.19}$$

pa se odmah vidi da funkciju $R(r)$ možemo da "skratimo" odnosno da ona ne može biti određena iz sistema jednačina (4.18-4.19). Takođe, promenljive θ i φ mogu da se razdvoje. Pretpostavljajući da je

$$f(\theta, \varphi) = T(\theta) F(\varphi), \tag{4.20}$$

jednačina (4.19) se svodi na

$$-i\hbar \frac{dF}{d\varphi} = b\hbar F, \tag{4.21}$$

i ima rešenje

$$F(\varphi) = e^{ib\varphi}. \tag{4.22}$$

Iz zahteva da je vrednost funkcije $F(\varphi)$ odnosno talasne funkcije $\psi(r, \theta, \varphi)$ ista za $\varphi = 0$ i $\varphi = 2\pi$ odnosno da je talasna funkcija jednoznačno definisana u xz -ravni, dobijamo da b mora biti *ceo broj*, $b = m$. Znači vrednosti L_z , pa samim tim i svake projekcije momenta impulsa (jer izbor z -ose je samo izbor koordinatnog sistema) su kvantovane.

Pošto su sve promenljive u talasnoj funkciji razdvojene,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)T(\theta)F(\varphi), \quad (4.23)$$

normiranje se može vršiti po svakoj koordinati zasebno. Uslov

$$\int \psi^* \psi dV = 1 \quad (4.24)$$

ispunićemo fiksiranjem

$$\int_0^\infty R^* R r^2 dr = 1, \quad \int_0^\pi T^* T \sin \theta d\theta = 1, \quad \int_0^{2\pi} F^* F d\varphi = 1. \quad (4.25)$$

Prema tome, normirane svojstvene funkcije operatora L_z su

$$F_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (4.26)$$

Zamenjujući funkcije $F_m(\varphi)$ u jednačinu (4.18) dobijamo diferencijalnu jednačinu za $T(\theta)$:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{dT}{d\theta} \right) + \left(a - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) T = 0. \quad (4.27)$$

Ova jednačina zavisi od obe svojstvene vrednosti, a i $b = m$, i može se prevesti u polinomijalni oblik uvođenjem smene

$$\xi = \cos \theta, \quad \frac{d}{d\xi} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta}. \quad (4.28)$$

Dobijamo jednačinu

$$\frac{d}{d\xi} \left((1 - \xi^2) \frac{dT}{d\xi} \right) + \left(a - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) T = 0. \quad (4.29)$$

Za $m = 0$ ovo je Legendre-ova jednačina

$$(\xi^2 - 1)T'' + 2\xi T' - aT = 0, \quad (4.30)$$

koja za $a = l(l + 1)$ ima fizička rešenja – Legendre-ove polinome $P_l(\xi)$:

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} ((\xi^2 - 1)^l). \quad (4.31)$$

Broj l je ceo odnosno pozitivan broj ili nula, a $P_l(\xi)$, iz (4.31), parni ili neparni polinom stepena l ,

$$P_l(-\xi) = (-1)^l P_l(\xi). \quad (4.32)$$

Legendre-ovi polinomi su ortonormirani

$$\int_{-1}^1 P_l(\xi) P_k(\xi) d\xi = \frac{2}{2l+1} \delta_{lk}. \quad (4.33)$$

Za $m \neq 0$ fizička rešenja jednačine (4.29) takodje postoje: to su pridružene Legendre-ove funkcije,

$$P_l^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi), \quad (4.34)$$

odnosno

$$P_l^m(\cos \theta) = (\sin \theta)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{d(\cos \theta)^{|m|}} P_l(\cos \theta). \quad (4.35)$$

Iz ove definicije vidimo da je $m \leq l$; P_l^m naravno nisu polinomi. Relacije ortonormiranosti za pridružene Legendre-ove funkcije glase

$$\int_0^\pi P_k^m(\cos \theta) P_l^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \delta_{kl}. \quad (4.36)$$

Ukupno, rešenja jednačina (4.18-4.19) su

$$f_{m,l}(\theta, \varphi) = T_{m,l}(\theta) F_m(\varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle, \quad (4.37)$$

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 :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (4.38)$$

Sferni harmonici su ortonormirani,

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (4.39)$$

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 .

$$\begin{aligned}
l = 0 : \quad Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
l = 1 : \quad Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\
& Y_1^{\pm 1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \\
l = 2 : \quad Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\
& Y_2^{\pm 1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \\
& Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}
\end{aligned} \tag{4.40}$$

Polarni dijagrami

4.2 ČESTICA U SFERNO-SIMETRIČNOM POTENCIJALU

Sad ćemo preći na rešavanje stacionarne Schrödinger-ove jednačine za česticu u sferno-simetričnom potencijalu. Njen hamiltonijan je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(r), \tag{4.41}$$

a potencijalna energija U zavisi samo od radijalnog rastojanja $r = |\vec{r}|$. Pri ovom kretanju moment impulsa čestice, kao i u klasičnoj mehanici, se održava. U kvantnoj mehanici, videćemo u sledećoj glavi, to znači da je $[H, L_i] = 0$, iz čega sledi da se hamiltonijan može dijagonalizovati istovremeno sa L^2 i L_z . Ovo se takodje vidi iz oblika laplasijana u sfernim koordinatama,

$$\Delta\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\sin \theta \psi) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}, \tag{4.42}$$

iz koga možemo dobiti za operator kinetičke energije,

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right). \tag{4.43}$$

Znači, Schrödinger-ova jednačina za kretanje čestice u sferno-simetričnom potencijalu glasi

$$\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{L^2}{2mr^2} \psi + U\psi = E\psi. \tag{4.44}$$

Očigledno se u ovoj jednačini promenljive mogu razdvojiti a ugaoni deo su sferni harmonici,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (4.45)$$

Smenom ψ u (4.44) dobija se radijalna jednačina, odnosno jednačina za radijalni deo talasne funkcije, $R(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U \right) R = ER \quad (4.46)$$

ili, ako umesto R uvedemo funkciju, $u(r) = rR(r)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U \right) u = Eu. \quad (4.47)$$

Iz (4.47) se vidi da se rešavanje Schrödinger-ove jednačune u centralno-simetričnom potencijalu svodi na jednodimenzioni problem: jednačina (4.47) ima oblik Schrödinger-ove jednačine za česticu koja se kreće u efektivnom potencijalu

$$U_{eff} = U + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}. \quad (4.48)$$

Sličan rezultat imali smo i u klasičnoj mehanici. Drugi član u efektivnom potencijalu, centrifugalna barijera, potiče od momenta impulsa. Normalizacija radijalne funkcije daje

$$\int_0^\infty R^* R r^2 dr = \int_0^\infty u^* u dr = 1. \quad (4.49)$$

4.3 ATOM VODONIKA

Vodonikov atom sastoji se od elektrona i protona; njihova interakcija je opisana elektrostatičkim Coulomb-ovim potencijalom, tako da je hamiltonijan sistema dat sa

$$H = \frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_p^2}{2m_p} + \frac{q_e q_p}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|}. \quad (4.50)$$

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 opravdano pretpostaviti da proton miruje,

$$\vec{r}_p = 0, \quad \vec{r}_e - \vec{r}_p = \vec{r}, \quad T_p = 0 \quad (4.51)$$

iako strogo gledano ove jednačine u kvantnoj mehanici nemaju smisla zbog relacija neodređenosti. U stvari, problem dva tela se i u kvantnoj, kao i u klasičnoj mehanici, može svesti na problem jedne čestice ako se posmatra u sistemu centra mase.

Uvedimo naime vektore položaja centra mase sistema i relativne čestice,

$$\begin{aligned}\vec{r}_{CM} = \vec{R} &= \frac{m_e \vec{r}_e + m_p \vec{r}_p}{m_e + m_p}, & m_{CM} = M &= m_e + m_p \\ \vec{r}_{rel} = \vec{r} &= \vec{r}_e - \vec{r}_p, & m_{rel} = m &= \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}\end{aligned}\quad (4.52)$$

U lagranžijanu

$$L = \frac{1}{2} m_e \dot{\vec{r}}_e^2 + \frac{1}{2} m_p \dot{\vec{r}}_p^2 - U(\vec{r}_e - \vec{r}_p) \quad (4.53)$$

lako možemo da predjemo na promjenljive \vec{r} i \vec{R} a zatim da nadjemo odgovarajuće impulse \vec{p} i \vec{P} . Dobija se da je

$$\vec{P} = M \dot{\vec{R}}, \quad \vec{p} = m \dot{\vec{r}}. \quad (4.54)$$

Položaj i impuls centra mase i relativne čestice su nezavisne kanonske varijable pa su njihove Poisson-ove zagrade, odnosno u kvantnoj mehanici komutatori, dati sa

$$\begin{aligned}[x_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij}, & [x_i, x_j] &= 0, & [p_i, p_j] &= 0, \\ [X_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij}, & [X_i, X_j] &= 0, & [P_i, P_j] &= 0, \\ [x_i, P_j] &= 0, & [X_i, p_j] &= 0, & [x_i, X_j] &= 0, & [p_i, P_j] &= 0.\end{aligned}\quad (4.55)$$

Hamiltonijan ukupnog sistema je zbir hamiltonijana dva neinteragujuća pod-sistema,

$$H = H_{CM} + H_{rel} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (4.56)$$

i zato se njihova kretanja mogu posmatrati i rešavati nezavisno. Za sistem elektron-proton je

$$\begin{aligned}m_{CM} = M &\approx m_p, & m_{rel} = m &\approx m_e \\ \vec{r}_{CM} = \vec{R} &\approx \vec{r}_p, & \vec{r}_{rel} = \vec{r} &\approx \vec{r}_e\end{aligned}\quad (4.57)$$

pa se zato elektron može identifikovati sa relativnom česticom.

Tako se naš zadatak odredjivanja vezanih stanja protona i elektrona i njihovih energija svodi na rešavanje Schrödinger-ove jednačine i odredjivanje vezanih stanja elektrona u statičkom Coulomb-ovom potencijalu,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (4.58)$$

Ovde smo kao što je dosta uobičajeno, napisali potencijal elektrona u elektrostatičkom polju jezgra naelektrisanja $-Ze$, tj. u vodoniku sličnom atomu atomskog broja Z . Radijalna jednačina (4.47) u ovom slučaju glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \left(-\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u = Eu. \quad (4.59)$$

Prvo ćemo ispitati asimptotski oblik funkcije $u(r)$ tj. njeno ponašanje u dve granične tačke, $r = \infty$ i $r = 0$. U beskonačnosti efektivni potencijal teži nuli pa je asimptotski

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' = Eu. \quad (4.60)$$

Za $E > 0$ asimptotska rešenja su ravni talasi, odnosno elektron je slobodan. Takva rešenja zapravo opisuju rasejanje elektrona na protonu, a ne vezana stanja elektrona i protona odnosno atom vodonika. Nas interesuje slučaj $E < 0$: uzimamo rešenje koje u beskonačnosti opada,

$$u(r) \sim e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}r}, \quad r \rightarrow \infty. \quad (4.61)$$

U drugoj graničnoj tački, $r = 0$, najveći član uz u u jednačini (4.59) je centrifugalni pa rešenja zadovoljavaju

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}u = 0, \quad (4.62)$$

odnosno

$$r^2 u'' = l(l+1)u. \quad (4.63)$$

Znači, u koordinatnom početku

$$u(r) \sim r^{l+1}, \quad r \rightarrow 0. \quad (4.64)$$

Ovakvo ponašanje obezbeđuje da je gustina verovatnoće,

$$|\psi|^2 = \frac{|u|^2 |Y_l^m|^2}{r^2} \quad (4.65)$$

regularna u koordinatnom početku za sve vrednosti l . Dakle, pretpostavićemo da je rešenje oblika

$$u(r) = e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}r} v(r) = e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}r} \sum_{l+1}^{\infty} a_n r^n. \quad (4.66)$$

Iz (4.66) i (4.59) dobijamo jednačinu za $v(r)$:

$$v'' - 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}v' - \frac{l(l+1)}{r^2}v + \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \frac{v}{r} = 0, \quad (4.67)$$

a iz nje, izjednačavanjem koeficijenata uz iste stepene r^n , rekurentnu relaciju za koeficijente a_n ,

$$(n(n+1) - l(l+1))a_{n+1} = \left(2n\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} - \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \right) a_n. \quad (4.68)$$

Za $n \rightarrow \infty$, odnosno u oblasti $r \rightarrow \infty$, poslednja relacija se svodi približno na

$$a_{n+1} = \frac{2}{n+1} \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} a_n \quad (4.69)$$

tj.

$$a_{n+1} = \frac{1}{(n+1)!} \left(2 \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \right)^n a_0. \quad (4.70)$$

Ovakav razvoj u red ima funkcija

$$v(r) = e^{2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r}, \quad (4.71)$$

a odgovarajuća $u(r)$ se asimptotski ponaša kao $e^{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r}$: eksponencijalno raste. Prema tome, rešenje (4.66) može biti fizičko samo ako se $\sum a_k r^k$ svodi na polinom, tj. ako se svi koeficijenti u razvoju a_k anuliraju počevši od određene vrednosti indeksa, $n+1$:

$$a_{n+1} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad n \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{mZe^2}{\hbar^2}, \quad (4.72)$$

odnosno za vrednosti energije

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (4.73)$$

Za svako $n > l \geq 0$ imamo po jedno takvo rešenje, odnosno jednu funkciju $v_{nl}(r)$. Energija odgovarajućih stanja je diskretna, kvantovana brojem n . Iako u jednačini (4.67) kvantni broj momenta impulsa l figuriše eksplicitno, svojstvene energije od njega ne zavise. Ova degeneracija energije je slučajna i postoji samo kod potencijala oblika $V(r) \sim r^{-1}$ i $V(r) \sim r^2$. Svojstvene funkcije v_{nl} naravno zavise i od n i od l . One se mogu izraziti preko Laguerre-ovih i pridruženih Laguerre-ovih polinoma koji se definišu kao

$$L_n(\xi) = e^\xi \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi} \xi^n), \quad L_n^k(\xi) = (-1)^k \frac{d^k}{d\xi^k} L_{n+k}(\xi). \quad (4.74)$$

Ukupno, vezanja stanja elektrona u atomu vodonika opisana su talasnim funkcijama

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (4.75)$$

gde je radijalni deo talasne funkcije

$$R_{nl}(r) = e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right). \quad (4.76)$$

Konstanta a_0 naziva se Bohr-ov radijus i daje dimenzije H-atoma,

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}. \quad (4.77)$$

Energija osnovnog stanja je

$$E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV}. \quad (4.78)$$

Vrednosti ove dve konstante odredjuju karakteristične skale dužine i energije u atomskoj fizici.

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 , jer

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l 1 = \sum_{l=0}^{n-1} 2l+1 = n(n-1) + n = n^2. \quad (4.79)$$

Napisaćemo talasne funkcije osnovnog i prvog pobudjenog stanja elektrona. Imamo

$$\begin{aligned} \psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} && 1s \\ \psi_{200} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} && 2s \\ \psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos \theta && 2p \\ \psi_{21\pm 1} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} && 2p \end{aligned} \quad (4.80)$$

U spektroskopskim oznakama, s -stanja označavaju vrednosti $l = 0$ kvantnog broja ugaonog momenta, p -stanja imaju $l = 1$, d -stanja $l = 2$ i tako dalje.

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 statičkom električnom polju, $\vec{E} = -\text{grad } \Phi$, dat je preko elektrostatičkog potencijala Φ ,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + e\Phi(\vec{r}) + U(\vec{r}), \quad (4.81)$$

gde je $U(\vec{r})$ potencijalna energija ostalih polja koja deluju na česticu. U opštem slučaju hamiltonijan čestice u spoljašnjem elektromagnetnom polju dobija se iz hamiltonijana

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (4.82)$$

metodom *minimalne zamene*:

$$H \rightarrow H - e\Phi, \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}, \quad (4.83)$$

gde su $\Phi(t, \vec{r})$ i $\vec{A}(t, \vec{r})$ skalarni i vektorski potencijal elektromagnetnog polja; jačine polja date su sa

$$\vec{E} = -\text{grad } \Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A}. \quad (4.84)$$

Prema tome, hamiltonijan čestice u elektromagnetnom polju je

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\Phi + U. \quad (4.85)$$

U kinetičkom članu ovog hamiltonijana problem uredjenja impulsa \vec{p} i koordinata koje figurišu u vektorskom potencijalu \vec{A} rešen je preko simetričnog uredjenja,

$$(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 = \vec{p}^2 - \frac{e}{c}(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2. \quad (4.86)$$

Možemo još da primetimo i da, ako je vektorski potencijal zadat u Coulomb-ovom gejdžu, $\text{div } \vec{A} = 0$, izraz za hamiltonijan je jednoznačan jer je

$$p_i A_i = A_i p_i + [p_i, A_i] = A_i p_i - i\hbar \text{div } \vec{A}. \quad (4.87)$$

Prema tome, Schrödinger-ova jednačina za česticu u elektromagnetnom polju glasi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c}\vec{A})^2 \Psi + e\Phi \Psi + U \Psi. \quad (4.88)$$

Izvedimo gustinu i fluks verovatnoće u ovom slučaju. Kompleksnom konjugacijom iz (4.88) dobijamo

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{1}{2m}(i\hbar \nabla - \frac{e}{c}\vec{A})^2 \Psi^* + e\Phi \Psi^* + U \Psi^*, \quad (4.89)$$

pa se ponavljanjem postupka od ranije dobija jednačina kontinuiteta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0, \quad (4.90)$$

gde je

$$\rho = \Psi^* \Psi, \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e}{mc}\vec{A} \Psi^* \Psi. \quad (4.91)$$

Fluks verovatnoće za česticu u elektromagnetnom polju se menja.

Izvešćemo hamiltonijane za naelektrisanu česticu u slučajevima najjednostavnijih konfiguracija elektromagnetnog polja. *Statičko, homogeno električno polje* $\vec{E} = \text{const}$ može se opisati potencijalima

$$\Phi = -\vec{E} \cdot \vec{r}, \quad \vec{A} = 0. \quad (4.92)$$

Znači hamiltonijan koji opisuje kretanje naelektrisane čestice je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - e\vec{E} \cdot \vec{r} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{d} \cdot \vec{E}, \quad (4.93)$$

a u drugom članu prepoznamo potencijalnu energiju električnog dipola dipolnog momenta $\vec{d} = e\vec{r}$. Ovaj izraz za potencijalnu energiju je vodeći odnosno najveći i kada električno polje nije striktno homogeno već je slabo nehomogeno i često se primenjuje, a ta aproksimacija zove se dipolna aproksimacija.

Naći ćemo i približan, analogan izraz za hamiltonijan elektrona u *statičkom homogenom magnetnom polju* $\vec{B} = \text{const}$. Lako se vidi da je jedan od mogućih izbora za potencijale

$$\Phi = 0, \quad \vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}. \quad (4.94)$$

Energija interakcije sa magnetnm poljem je obično mala, i u tipičnim situacijama manja od energije interakcije sa električnim poljem: zato ćemo u gornjem izrazu zadržati samo linearan član po \vec{B} . Imamo

$$H = \frac{1}{2m} (p_i + \frac{e}{2c} \epsilon_{ijk} r_j B_k)^2 \approx \frac{p_i p_i}{2m} + \frac{e}{2mc} \epsilon_{ijk} p_i x_j B_k, \quad (4.95)$$

tj.

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} \vec{L} \times \vec{B} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (4.96)$$

gde je magnetni dipolni moment $\vec{\mu}$ elektrona koji potiče od njegovog “kružnog kretanja” tj. orbitnog ugaonog momenta,

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L} = -\mu_B \vec{L}, \quad (4.97)$$

a konstanta μ_B naziva se Bohr-ov magneton,

$$\mu_B = \frac{|e| \hbar}{2mc}. \quad (4.98)$$

Analogan sa (4.97) je klasični izraz za magnetni dipolni moment tankog kružnog prstena poluprečnika R kroz koji protiče električna struja jačine $I = -e/T = -ev/2\pi R$ (T je period kružnog kretanja elektrona kroz prsten),

$$\mu = I \pi R^2 = -\frac{e}{2m} L. \quad (4.99)$$

4.5 ★ LANDAU-OV PROBLEM

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 gejdž fiksiramo kao $\vec{A} = xB\vec{e}_y$, hamiltonijan elektrona postaje

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2m} (p_y - \frac{eB}{c} x)^2 + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (4.100)$$

Videćemo u sledećoj glavi da je gradijentna simetrija elektromagnetizma simetrija i Schrödinger-ove jednačine, pa zato gradijentni uslov možemo da biramo tako da rešavanje jednačine maksimalno pojednostavimo. Stacionarna Schrödinger-ova jednačina glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + i \frac{\hbar e B}{mc} x \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{e^2 B^2}{2mc^2} x^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = E \psi. \quad (4.101)$$

Ova jednačina se može rešiti razdvajanjem promenljivih. Ako pretpostavimo da je

$$\psi(x, y, z) = F(x, y)Z(z), \quad (4.102)$$

razdvajanjem promenljivih xy i z dobijamo dve jednačine

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z}{dz^2} &= E_z Z, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + i \frac{\hbar e B}{mc} x \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{e^2 B^2}{2mc^2} x^2 F &= (E - E_z) F. \end{aligned} \quad (4.103)$$

Rešenje za $Z(z)$ je ravan talas,

$$Z(z) = e^{ik_z z}, \quad k_z^2 = \frac{2mE_z}{\hbar^2}. \quad (4.104)$$

Analizirajući drugu jednačinu vidimo da ona ima partikularna rešenja oblika

$$F(x, y) = e^{ik_y y} X(x); \quad (4.105)$$

ubacivanjem ovog anzaca ona se svodi na

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{1}{2m} (\hbar k_y - \frac{eB}{c} x)^2 X = (E - E_z) X, \quad (4.106)$$

odnosno, posle smene

$$\tilde{x} = x - \frac{c\hbar}{eB} k_y \quad (4.107)$$

na jednačinu za harmonijski oscilator

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2} m \omega_L^2 \tilde{x}^2 X = (E - E_z) X. \quad (4.108)$$

ω_L je Larmor-ova frekvencija,

$$\omega_L = \frac{eB}{mc}. \quad (4.109)$$

Prema tome preostale nepoznate funkcije $X(x)$ su svojstvene funkcije harmonijskog oscilatora mase m i frekvence ω_L . Ukupna energija čestice E je zbir energije ravnog talasa duž z -ose i oscilatora,

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_L, \quad (4.110)$$

a energija kretanja u xy -ravni normalnoj na magnetno polje je kvantovana. Odgovarajuće talasne funkcije su

$$\psi_{k_z, n}(x, y, z) = \frac{A_n}{2\pi} e^{ik_z z + ik_y y} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad (4.111)$$

gde je

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_L}{\hbar}} \left(x - \frac{c\hbar}{eB} k_y \right) \quad (4.112)$$

a konstante A_n date su u (??).

4.6 DODATAK

4.6.1 NABLA U SFERNIM I CILINDRIČNIM KOORDINATAMA

f je skalarna funkcija, \vec{F} je vektorska funkcija

$$\begin{aligned} \nabla f &= \frac{\partial f}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z \\ &= \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi \\ &= \frac{\partial f}{\partial \rho} \vec{e}_\rho + \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{F} &= \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 F_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta F_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi} \\ &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho F_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{F} &= \left(\frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z} \right) \vec{e}_x + \left(\frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x} \right) \vec{e}_y + \left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \right) \vec{e}_z \\ &= \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta F_\varphi) - \frac{\partial F_\theta}{\partial \varphi} \right) \vec{e}_r + \frac{1}{r} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial F_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial r} (r F_\varphi) \right) \vec{e}_\theta + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r F_\theta) - \frac{\partial F_r}{\partial \theta} \right) \vec{e}_\varphi \\ &= \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial F_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial F_\varphi}{\partial z} \right) \vec{e}_\rho + \left(\frac{\partial F_\rho}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial \rho} \right) \vec{e}_\varphi + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} (\rho F_\varphi) - \frac{\partial F_\rho}{\partial \varphi} \right) \vec{e}_z \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \\
&= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}
\end{aligned}$$

4.6.2 SFERNI HARMONICI

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (4.113)$$

Ako su \vec{r}_1 i \vec{r}_2 dva radijus-vektora koji su pod uglom γ , važi

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \gamma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos \gamma) \quad (4.114)$$

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1) Y_l^m(\theta_2, \varphi_2) \quad (4.115)$$

4.7 ZADACI

1. Izvesti (4.15) 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!

2. Dobiti eksplicitno funkciju Y_l^l iz uslova $L_+ |l, l\rangle = 0$, prikazujući L_+ u koordinatnoj reprezentaciji i uzimajući da je $Y_l^l = T(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi}$.

3. Pokazati, u koordinatnoj reprezentaciji, da je $[H, L_i] = 0$: npr, $[H, L_x] = 0$.

4. Atom vodonika u paraboličkim koordinatama

5. Pokazati da u klasičnoj mehanici hamiltonijan (4.85) opisuje kretanje naelektrisane čestice u elektromagnetnom polju: napisati Hamilton-ove jednačine, odrediti vezu između kanonskih impulsa p_i i kinematičkih impulsa $m\dot{x}_i$, i konačno, odrediti sile koje deluju na naelektrisanu česticu.

GLAVA 5

SIMETRIJE

Mada bi po logici smenjivanja matematičkih i fizičkih poglavlja, a i po naslovu, sadržaj ove glave trebalo da bude pretežno matematički, nije tako. Naslov je tu zbog svoje kratkoće; u ovoj glavi uvode se neki od fundamentalnih pojmova koji su u fiziku ušli sa kvantnom mehanikom, između ostalih, spin i identičnost čestica.

Moglo bi se reći da smo u razumevanju simetrije sa kvantnom mehanikom (kao u kompjuterskoj igrici) prešli na novi nivo. I u klasičnoj fizici simetrija je veoma važna jer njeno poznavanje uvek pojednostavljuje rešavanje fizičkog problema. Ali u kvantnoj mehanici shvatili smo da simetrija može da bude prisutna i kad nije reprezentovana na očigledan način, ili matematički preciznije, u vernoj reprezentaciji. Teorija ugaonog momenta na primer predstavlja istorijski veoma važan deo kvantne mehanike, i dala je veliki doprinos objašnjenju spektara kroz selekciona pravila; ali apstrakcija ili uopštenje ugaonog momenta i na polucele reprezentacije dovelo je (ili je moglo dovesti) do teorijske predikcije spina $1/2$ koji se detektuje u eksperimentu. Slično je, nešto kasnije, ideja o postojanju simetrije koja se zove konjugacija naboja dovela Dirac-a do predikcije postojanja pozitrona. I pojam unutrašnje simetrije faktički je potekao iz kvantne mehanike: on je omogućio da se napravi klasifikacija elementarnih čestica i odredi njihova struktura i bez poznavanja detalja dinamike. Navedimo dalje gradijentne simetrije koje su u današnjoj fizici ključne za razumevanje i opis fundamentalnih interakcija u prirodi.

Kada govorimo o simetrijama ili o simetriji, podrazumevamo u stvari dva pojma. I u fizici i u svakodnevnom govoru simetrija podrazumeva *invarijantnost* nekog objekta (na primer umetničke slike ili gradjevine, živog bića, kristala ali i operatora ili dejstva) na određenu transformaciju ili skup transformacija. Smatramo da objekti koji poseduju simetriju imaju posebnu estetsku vrednost, i u fizici. U fizici se koristi i drugi pojam koji se odnosi na fizičke zakone i jednačine koje ih opisuju: *kovarijantnost*. Kovarijantnost obično znači da fizički zakoni “izgledaju isto” u različitim koordinatnim ili

referentnim sistemima, i daje nam grupu simetrija određenog zakona fizike (koja je, razume se, nadjena i proverena u eksperimentu). Na primer, drugi Newton-ov zakon “ne menja” se pri rotacijama i translacijama, odnosno pri ovim transformacijama leva i desna strana jednačine (1.1) menjaju se na isti način, uskladjeno ili ko-varijantno: kao vektori. To znači da drugi Newton-ov zakon važi bez obzira kako usmerimo lenjire i gde postavimo (koordinatni početak) naše laboratorije. Jednačina (1.1) ne menja se zapravo ni pri Galilei-jevim transformacijama, pa drugi Newton-ov zakon važi odnosno izgleda isto u svim inercijalnim sistemima. Slično je i sa Maxwell-ovim jednačinama. Njihova kovarijantnost na Lorentz-ove transformacije može se videti i iz jednačina (1.36-1.39), ali postaje manifestna kada se uvedu kovarijantne veličine, četvorovektori i tenzori: vektorski potencijal A_μ , struja j_μ i tenzor jačine polja $F_{\mu\nu}$. Maxwell-ove jednačine se tada zapisuju kao

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = j^\nu, \quad (5.1)$$

ili u Lorentz-ovom gejdžu $\partial_\mu A^\mu = 0$, kao

$$\square A^\nu = j^\nu, \quad \square = \partial_\mu \partial^\mu. \quad (5.2)$$

Važno je naglasiti da iako same fizičke veličine (na primer vektor položaja, potencijal elektromagnetnog polja) nisu invarijantne na transformacije simetrije fizičkog zakona, njihova promena pri prelazu iz jednog u drugi referentni ili koordinatni sistem je dobro definisana. Zbog toga kad rešavamo fizički problem referentni sistem možemo da fiksiramo onako kako nam je najpogodnije: rešenje uvek umemo da “prebacimo” u proizvoljni drugi sistem.

U ovoj glavi razmatraćemo oba aspekta simetrije: invarijantnost fizičkih veličina i kovarijantnost Schrödinger-ove jednačine: za oba pojma treba prvo da definišemo šta su to transformacije simetrije.

5.1 SIMETRIJE I ZAKONI ODRŽANJA

Poseban značaj simetrija se u fizici vidi kroz Noether-inu teoremu koja kaže: svakom parametru neprekidne grupe simetrija dejstva fizičkog sistema odgovara jedna održana veličina, jedan integral kretanja. Integrali ili konstante kretanja su u klasičnoj fizici one veličine koje se ne menjaju sa vremenom. Dinamički uslovi da neka veličina ne zavisi od vremena mogu se formulisati i u Lagrange-ovom i u Hamilton-ovom formalizmu. U Lagrange-evom formalizmu konstante kretanja postoje kada imamo ciklične koordinate odnosno koordinate od kojih lagranžijan ne zavisi eksplicitno. Ako je x_i ciklična koordinata, iz jednačina kretanja dobijamo

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0, \quad (5.3)$$

pa se odgovarajući generalisani impuls $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}$ održava u vremenu. U ovom slučaju vidi se da je Lagranžijan $L(x_i, \dot{x}_i, t)$ invarijantan na uopštenu translaciju

$$x_i \rightarrow x_i + a, \quad \dot{x}_i \rightarrow \dot{x}_i, \quad (5.4)$$

pa je na ovu transformaciju invarijantno i dejstvo, (1.4). U Hamilton-ovom formalizmu opservabla A (za koju ćemo, prirodno, pretpostaviti da ne zavisi eksplicitno od vremena) je konstanta kretanja ako je njena Poisson-ova zagrada sa hamiltonijanom nula,

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}_{PZ} = 0. \quad (5.5)$$

U kvantnoj mehanici integrali kretanja mogu se definisati na sličan način: to su one opservable čije se očekivane vrednosti ne menjaju u toku vremena. Iz Ehrenfest-ove teoreme (3.178) onda zaključujemo da ovakve opservable moraju da komutiraju sa hamiltonijanom. Dakle, uslov

$$[A, H] = 0 \quad (5.6)$$

je definicija integrala kretanja u kvantnoj mehanici. Iz ove definicije se vidi da su svojstvena stanja konstanti kretanja stacionarna, tj. ako je $A|a\rangle = a|a\rangle$, onda je i

$$A|a, t\rangle = A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|a\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} A|a\rangle = a e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|a\rangle = a|a, t\rangle. \quad (5.7)$$

Kvantni brojevi integrala kretanja su dobri za opis fizičkog sistema jer se njihova vrednost ne menja u toku vremena.

Da bismo precizno definisali simetrije, počecemo sa definicijom prostorno-vremenskih transformacija. U opštem slučaju to su preslikavanja

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}'(\vec{r}, t; a_i), \quad t \rightarrow t'(\vec{r}, t; a_i) \quad (5.8)$$

prostornih i vremenske koordinate, recimo položaja materijalne tačke. Ova preslikavanja u principu mogu da zavise od realnih parametara a_i što je naznačeno u jednačini (5.8). U fizici nas zanimaju transformacije u odnosu na koje su fizički zakoni, ili dejstvo i lagranžijan, invarijantni. Te transformacije možemo da shvatimo kao da one deluju na sve tačke prostora ili objekte u njemu, ali možda češće, zamišljamo da ne transformišemo objekte nego koordinatni (ili referentni) sistem. U svakom slučaju intuitivno, ne želimo da menjamo osobine samog prostora i zato se po pravilu razmatraju *izometrije*, odnosno transformacije koje održavaju rastojanja i uglove. Skup transformacija kasnije ćemo proširiti i apstrahovati, ne ograničavajući se pretpostavkom da se različiti razmatrani (koordinatni) sistemi mogu zaista realizovati u laboratoriji.

Transformacije prostora uvek imaju matematičku strukturu *grupe*: grupu ćemo označavati sa G a njene elemente sa g_i ili g_a . Elementi grupe imaju

osobine koje intuitivno očekujemo od “prelaza” iz jednog u drugi koordinatni ili inercijalni sistem: zatvorenost, postojanje jediničnog i inverznog elementa. Definicija grupe i neke osobine date su u dodatku. Broj elemenata u grupi može biti konačan ili beskonačan: u fizici je veoma važan slučaj kada elementi grupe pripadaju nekoj mnogostrukosti, odnosno kada se mogu parametrizovati realnim brojevima a_i , $i = 1, 2, \dots, n$ koji uzimaju vrednosti u nekom delu prostora \mathbb{R}^n . Za primenu najvažnija osobina Lie-jevih grupa je da se njihovi elementi mogu prikazati u eksponencijalnom obliku

$$g_a = e^{-i \sum a_i T_i}, \quad (5.9)$$

gde su a_i parametri, a T_i su generatori grupe.

Važan pojam u teoriji grupa i u primenama u fizici je *reprezentacija* grupe, $U(g)$. Reprezentacija je preslikavanje koje čuva strukturu grupe odnosno reprezentuje zakon množenja,

$$U(g_1)U(g_2) = U(g_1 g_2); \quad (5.10)$$

najčešće se razmatraju linearne reprezentacije. Veza (5.9) izmedju generatora i elemenata grupe važi i u reprezentaciji,

$$U(g_a) = e^{-i \sum a_i \tau_i}, \quad (5.11)$$

gde su sada u eksponentu umesto generatora T_i njihove reprezentacije τ_i . U ovom kontekstu osnovna definicija grupe zadata njenim delovanjem u prostoru (ili kod matricnih grupa, osobinama matrica) često se naziva *verna reprezentacija*. U kvantnoj mehanici, videćemo, zbog statističke interpretacije vektora stanja, $U(g_a)$ su po pravilu unitarni operatori, što znači da su generatori τ_i hermitski, odnosno, fizičke opservable.

Sada možemo da se vratimo na vezu izmedju simetrija i zakona održanja. Pretpostavimo da je određen konkretni fizički sistem invarijantan na Lie-jevu grupu simetrije koja je opisana, u kvantnomehantičkoj reprezentaciji, operatorima $U(g_a)$. Karakteristika fizičkog sistema je hamiltonijan, pa invarijantnost sistema znači da se pri transformacijama simetrije njegov hamiltonijan ne menja,

$$U^{-1}(g_a)H U(g_a) = H, \quad H U(g_a) = U(g_a)H. \quad (5.12)$$

Pošto su $U(g_a)$ generisani generatorima τ_i , poslednji uslov je ekvivalentan sa

$$[H, \tau_i] = 0. \quad (5.13)$$

Prema tome, grupa G je simetrija sistema ako svi njeni generatori komutiraju sa hamiltonijanom: generatori simetrije su konstante kretanja. Ovo je zapravo kvantnomehantička verzija Noether-ine teoreme.

U fizici postojanje simetrije često objašnjava degeneraciju svojstvenih vrednosti energije. Pošto generatori simetrije τ_i komutiraju sa H , oni ne

menjaju vrednost energije. τ_i međutim mogu da promene stanje sistema, odnosno da prebace jedan svojstveni vektor energije u drugi (koji ima istu svojstvenu vrednost). Zapravo, istu vrednost energije mora da ima ceo “multiplet stanja”: pojam multipleta razjasnićemo na primerima kasnije.

5.2 PROSTORNE TRANSFORMACIJE

Navešćemo nekoliko primera transformacija prostora koje su važne jer ne menjaju rastojanja između tačaka, pa možemo da kažemo da predstavljaju prelaz iz jednog koordinatnog sistema u drugi. U matematici ove transformacije nazivaju se izometrije. Odmah je jasno da kada zadamo transformacije vektora položaja čestice \vec{r} i vremena t , u klasičnoj mehanici znamo kako se transformišu impuls čestice a onda i sve druge fizičke varijable.

Prvi primer je *prostorna inverzija* odnosno refleksija sve tri ose, P . Transformacija je definisana sa

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}, \quad t \rightarrow t' = t. \quad (5.14)$$

Očigledno, kad dva puta primenimo inverziju prostora dobijamo identično preslikavanje: $P^2 = 1$, odnosno $P^{-1} = P$. Grupa transformacija je dvočlana $G = \{1, P\}$. Ako označimo

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

inverzija prostora se može reprezentovati matricom,

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (5.16)$$

Lako se vidi da pri inverziji prostora

$$\vec{p} \rightarrow -\vec{p}, \quad \vec{L} \rightarrow \vec{L}. \quad (5.17)$$

Prostorne translacije su definisane vektorom translacije \vec{a} :

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}, \quad t \rightarrow t' = t. \quad (5.18)$$

Očigledno, pri ovoj transformaciji $\vec{p} \rightarrow \vec{p}$. Grupa translacija je Lie-jeva grupa, odnosno ima kontinualno mnogo elemenata koji su parametrizovani pomoću tri nezavisna parametra a_x , a_y , i a_z . Lako se, dalje, vidi da je

$$g_{\vec{a}} g_{\vec{b}} = g_{\vec{a}+\vec{b}}, \quad g_{\vec{a}}^{-1} = g_{-\vec{a}}, \quad (5.19)$$

pa je ova grupa je komutativna.

Da bismo videli kako se vektor položaja transformiše pri *rotacijama*, pretpostavimo da se rotacija vektora \vec{r} vrši oko z -ose za ugao α , pri čemu \vec{r} prelazi u \vec{r}' . Tome odgovara slika: rotacije

Sa slike se vidi da se komponente vektora \vec{r}

$$\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z = \rho \cos \varphi \vec{e}_x + \rho \sin \varphi \vec{e}_y + z\vec{e}_z \quad (5.20)$$

transformišu u

$$\vec{r}' = x'\vec{e}_x + y'\vec{e}_y + z'\vec{e}_z = \rho \cos(\varphi + \alpha)\vec{e}_x + \rho \sin(\varphi + \alpha)\vec{e}_y + z\vec{e}_z. \quad (5.21)$$

Iz ovih jednačina se dobija zakon transformacije

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R(\alpha, \vec{e}_z) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (5.22)$$

$R(\alpha, \vec{e}_z)$ je matrica rotacije za ugao α oko z -ose. Može se pokazati da svaka rotacija može da se zapiše kao realna 3×3 matrica, kao i da važe relacije $\det R = 1$, $R^T R = I$: poslednji uslov sledi iz osobine rotacija da ne menjaju dužinu vektora.

Jednačina (5.22) može lako da se uopšti kada su u pitanju infinitezimalno male rotacije $\vec{\epsilon}$ oko proizvoljne ose \vec{n} , $\vec{\epsilon} = \epsilon \vec{n}$. Tada imamo

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{\epsilon} \times \vec{r}, \quad (5.23)$$

odnosno

$$x_i \rightarrow x'_i = x_i + \epsilon \epsilon_{ijk} n_j x_k. \quad (5.24)$$

Na isti način se pri rotacijama transformišu svi ostali vektori trodimenzionog prostora: ova osobina je zapravo definicija pojma “vektor”. Za impuls na primer

$$p'_i = p_i + \epsilon \epsilon_{ijk} n_j p_k, \quad (5.25)$$

i iz poslednje dve relacije možemo da očitamo matricu koja opisuje generator rotacije oko ose \vec{n} u vernoj reprezentaciji:

$$(T_{\vec{n}})_{ik} = i \epsilon_{ijk} n_j. \quad (5.26)$$

Grupa rotacija troparametarska Lie-jeva grupa.

Rotacije i translacije zajedno čine širu grupu transformacija trodimenzionog euklidskog prostora, tzv. Galilei-jevu grupu,

$$\vec{r}' = R\vec{r} + \vec{a}, \quad t' = t. \quad (5.27)$$

I elementi ove grupe mogu se prikazati kao matrice, u ovom slučaju 4×4 :

$$\begin{pmatrix} \vec{r}' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & \vec{a} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

Kao što smo već rekli, u klasičnoj mehanici sve opservable su funkcije \vec{r} i \vec{p} , tako da zadavanje transformacije vektora položaja i vremena indukuje zakon promene svih fizičkih veličina. Ali u klasičnoj teoriji polja imamo druge varijable: fizička polja. Transformacije klasičnih polja pri translacijama i rotacijama zadate su na skoro očigledan, u svakom slučaju veoma intuitivan način. Ako imamo skalarno polje, na primer polje temperature $T(\vec{r}, t)$, pri prelazu iz jednog u drugi koordinatni sistem funkcija polja se transformiše kao

$$T'(\vec{r}', t') = T(\vec{r}, t), \quad T'(\vec{r}, t) = T(R^{-1}(\vec{r} - \vec{a}), t). \quad (5.29)$$

Ova formula znači da je izmerena brojna vrednost temperature u određenoj tački ista bez obzira da li je prikazujemo u starom ili u novom koordinatnom sistemu. Ako naše fizičko polje nije skalarno nego vektorsko, kao na primer jačina električnog polja $\vec{E}(\vec{r}, t)$, onda se pri rotaciji koordinatnog sistema njegove komponente dodatno promene, kao komponente svakog drugog vektora. Zakon transformacije u tom slučaju glasi

$$\vec{E}'(\vec{r}', t') = R \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (5.30)$$

gde je R matrica rotacije. Može proveriti da jednačine (5.29) i (5.30) zaista zadaju reprezentacije Galilei-jeve grupe.

5.3 SIMETRIJE U KVANTNOJ MEHANICI

U kvantnoj mehanici stanja fizičkog sistema $|\psi\rangle$ su vektori, ali naravno ne u trodimenzionalnom realnom prostoru nego u prostoru stanja \mathcal{H} . Pri transformaciji koordinata g stanje $|\psi\rangle$ se menja; prirodno je pretpostaviti da je odgovarajuća transformacija opisana linearnim operatorom, s obzirom da je ceo kvantnomehanički opis linearan,

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = U(g)|\psi\rangle. \quad (5.31)$$

Uz to zahtevamo da $|\psi'\rangle$ bude fizičko stanje, odnosno vektor jedinične dužine kao i $|\psi\rangle$. To znači da su $U(g)$ unitarni operatori,

$$U(g)U^\dagger(g) = I, \quad (5.32)$$

i naravno da čine reprezentaciju odgovarajuće grupe transformacija,

$$U(g_1)U(g_2) = U(g_1g_2). \quad (5.33)$$

U stvari, kvantnomehanički opis daje nešto više slobode. Iz činjenice da su opservabilne veličine, kao što su gustina i fluks verovatnoće ili očekivane vrednosti, bilinearne (kvadratne) po talasnoj funkciji, sledi da se transformacije prostora mogu reprezentovati i kao antiunitarni (unitarni i antilinearni) operatori za koje važi

$$U(a|\psi\rangle + b|\chi\rangle) = a^*U|\psi\rangle + b^*U|\chi\rangle. \quad (5.34)$$

Osim toga, reprezentacija ne mora biti prava nego može biti i *projektivna*, odnosno reprezentacija “do na fazni faktor”:

$$U(g_1)U(g_2) = e^{i\omega_{12}} U(g_1g_2). \quad (5.35)$$

Ovo je sadržaj Wigner-ove teoreme o simetrijama. Delovanje operatora $U(g)$ može se, kao i u slučaju dinamike, sa vektora stanja “prebaciti” na opservable. Drugim rečima, možemo uzeti da su pri transformacijama simetrije stanja invarijantna a da se opservable menjaju,

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = |\psi\rangle, \quad A \rightarrow A' = U^{-1}(g)AU(g). \quad (5.36)$$

Kada smo utvrdili opšte osobine reprezentacija, sledeći korak je da ih odredimo, odnosno nadjemo konkretne izraze za inverziju prostora, translacije i rotacije. Videćemo kasnije da smo time zapravo dokazali kovarijantnost Schrödinger-ove jednačine na navedene transformacije. U principu možemo da postupimo na dva načina: jedna mogućnost je da, na osnovu analogije između talasne funkcije i klasičnog polja (koja je bila u osnovi Schrödinger-ove intuicije), pretpostavimo da se pri translacijama i rotacijama talasna funkcija $\psi(\vec{r}, t)$ transformiše kao skalarno polje¹. Druga mogućnost je da posmatramo delovanje simetrije na operatore položaja i impulsa i zahtevamo da se oni transformišu na isti način kao i odgovarajuće klasične veličine. Za najjednostavnije transformacije oba ova pristupa, videćemo, svode se na isto.

Prvo ćemo proanalizirati *inverziju prostora*; operator koji reprezentuje ovu transformaciju označićemo sa Π . Ako pretpostavimo da se talasna funkcija ponaša kao skalarno polje, imamo

$$\Pi\psi(\vec{r}) = \psi(P^{-1}\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \quad (5.37)$$

jer je inverziju prostora $P^2 = I$, odnosno $P^{-1} = P$. Jasno, i za Π važi $\Pi^2 = I$,

$$\Pi^2\psi(\vec{r}) = \Pi\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r}). \quad (5.38)$$

Svojtvene vrednosti operatora Π , koji je i unitaran i hermitski, su ± 1 . Svojtvene funkcije

$$\Pi\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) = \pm\psi(\vec{r}) \quad (5.39)$$

su parne ili neparne funkcije, i zato se inverzija prostora zove još i *parnost*.

Možemo da proverimo kako ovako definisana inverzija prostora Π deluje na operator koordinate. Jednačina (5.37) zapravo znači

$$\langle \vec{r} | \Pi | \psi \rangle = \langle -\vec{r} | \psi \rangle \quad (5.40)$$

za svako stanje $|\psi\rangle$, odnosno

$$\Pi | \vec{r} \rangle = | -\vec{r} \rangle. \quad (5.41)$$

¹Ova pretpostavka u stvari nije uvek tačna, važi samo kada čestica ima spin nula.

Prema tome,

$$\Pi \hat{r} \Pi |\vec{r}\rangle = \Pi \hat{r} |-\vec{r}\rangle = -\Pi \vec{r} |-\vec{r}\rangle = -\vec{r} |\vec{r}\rangle, \quad (5.42)$$

(u ovoj jednačini smo pisali kapicu nad operatorom \hat{r} da bismo ga razlikovali od njegove svojstvene vrednosti \vec{r}), pa imamo

$$\Pi \hat{r} \Pi = -\hat{r}. \quad (5.43)$$

Razmotrimo kako se u kvantnoj mehanici reprezentuju *translacije*. Videli smo da translacije čine troparametarsku Lie-jevu grupu. Označićemo

$$U(\vec{a}) = e^{-ia_i\tau_i}, \quad (5.44)$$

gde su τ_i grupni generatori u datoj reprezentaciji; naravno, $U(-\vec{a}) = U^{-1}(\vec{a})$. Odredićemo τ_i pretpostavljajući da se talasna funkcija pri translacijama transformiše kao

$$U(\vec{a}) \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a}). \quad (5.45)$$

Generatori grupe opisuju transformacije u okolini jedinice, i zato ćemo razviti poslednju jednačinu u red po infinitezimalno malim parametrima $a_i = \epsilon_i$. U linearnoj aproksimaciji imamo

$$\begin{aligned} U(\vec{\epsilon}) \psi(\vec{r}) &= e^{-i\epsilon_i\tau_i} \psi(\vec{r}) = (1 - \epsilon_i\tau_i)\psi(\vec{r}) + \dots \\ \psi(\vec{r} - \vec{\epsilon}) &= \psi(\vec{r}) + \frac{\partial\psi}{\partial x^i} (-\epsilon_i) + \dots \end{aligned} \quad (5.46)$$

Izjednačavanjem linearnih članova dobijamo

$$-i\epsilon_i\tau_i \psi = -\epsilon_i \frac{\partial\psi}{\partial x_i}, \quad (5.47)$$

pa pošto su parametri ϵ_i nezavisni a funkcija ψ proizvoljna dobijamo da su generatori translacije impulsi,

$$\tau_i = -i \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\hat{p}_i}{\hbar}. \quad (5.48)$$

Slično kao i kod parnosti može se pokazati da je

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a}\vec{p}} |\vec{r}\rangle = |\vec{r} - \vec{a}\rangle. \quad (5.49)$$

U slučaju sistema od N čestica talasna funkcija zavisi od koordinata svih čestica, $\psi = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. Pri translaciji za vektor \vec{a} ova talasna funkcija menja se kao

$$U(\vec{a}) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = e^{-i\epsilon_i\tau_i} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_1 - \vec{a}, \dots, \vec{r}_N - \vec{a}). \quad (5.50)$$

Postupkom sličnim prethodnom dobija se da je u ovom slučaju generator translacija ukupni impuls,

$$\hbar\vec{\tau} = \vec{P} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i. \quad (5.51)$$

Sada možemo da odredimo delovanje operatora translacije (5.44) na položaj i impuls čestice. Primenjujući Baker-Campbell-Hausdorff-ovu formulu (3.158) lako se vidi da je

$$U(-\vec{a}) \vec{r} U(\vec{a}) = \vec{r} + \vec{a}, \quad (5.52)$$

$$U(-\vec{a}) \vec{p} U(\vec{a}) = \vec{p}, \quad (5.53)$$

kao što i treba da bude. Logika prethodnog izvodjenja može da se preokrene i tada daje drugi pristup kvantovanju koji se ne bazira na Hamilton-ovom formalizmu kanonskih promenljivih nego na simetrijama i zove Weyl-ovo kvantovanje. Znamo naime da je u klasičnoj mehanici impuls generator translacija. U Weyl-ovom pristupu impulsom ćemo proglasiti onu veličinu koja u kvantnoj verziji teorije generiše translacije, odnosno koja je rešenje jednačina (5.52-5.53). Rešavanjem ovog sistema dobijamo da generatori translacija τ_i treba da zadovoljavaju relacije

$$[\tau_i, x_j] = -i\delta_{ij}, \quad (5.54)$$

odnosno, dobijamo kanonske komutacione relacije.

Jedna od najvažnijih primena grupe translacija je u fizici čvrstog stanja. Elektroni u kristalu kreću se, kao što smo već koristili u razmatranju pojednostavljenog jednodimenzionog Kronig-Penney modela, u efektivnom elektrostatičkom potencijalu koji je periodičan. Periodičnost kristalne rešetke u tri dimenzije opisuje se pomoću tri vektora rešetke \vec{a}_j koji grade osnovnu ćeliju. Zbog toga je efektivni potencijal, a time i hamiltonijan elektrona, invarijantan na translacije za proizvoljan vektor \vec{R} oblika

$$\vec{R} = \sum n_j \vec{a}_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}. \quad (5.55)$$

Očigledno, ove translacije čine diskretnu podgrupu grupe svih translacija u prostoru; njene elemente u kvantnomehaničkoj reprezentaciji označićemo sa $U(\vec{R})$.

Važi *Bloch-ova teorema* koja kaže: svojstvene funkcije energije elektrona u kristalu, $\psi(\vec{r})$, mogu se izraziti kao proizvod ravnog talasa i periodične funkcije $\phi(\vec{r})$,

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}), \quad \phi(\vec{r} + \vec{R}) = \phi(\vec{r}). \quad (5.56)$$

Pošto smo detaljno analizirali osobine translacija, ovu teoremu možemo i da dokažemo. Sa jedne strane delovanje translacije na (bilo koju) talasnu funkciju dato je sa

$$U(\vec{R})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{R}). \quad (5.57)$$

Sa druge strane, ako je hamiltonijan invarijantan na translacije

$$U^{-1}(\vec{R}) H U(\vec{R}) = H, \quad (5.58)$$

znači da on komutira sa svim $U(\vec{R})$, pa se ceo skup operatora $\{H, U(\vec{R})\}$ može istovremeno dijagonalizovati. Uzmimo jedno od ovih zajedničkih svojstvenih stanja, $\psi(\vec{r})$:

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad U(\vec{R})\psi(\vec{r}) = u(\vec{R})\psi(\vec{r}). \quad (5.59)$$

Pošto su operatori $U(\vec{R})$ unitarni, njihove svojstvene vrednosti $u(\vec{R})$ su brojevi modula jedan; sem toga, lako se vidi da važi

$$u(\vec{R}_1)u(\vec{R}_2) = u(\vec{R}_1 + \vec{R}_2). \quad (5.60)$$

Prema tome imamo

$$u(\vec{R}) = u(\vec{a}_1)^{n_1} u(\vec{a}_2)^{n_2} u(\vec{a}_3)^{n_3} = e^{-2\pi i \xi_i n_i}, \quad (5.61)$$

gde smo označili $u(\vec{a}_i) = e^{-2\pi i \xi_i}$. Uvodjenjem vektora inverzne rešetke \vec{b}_i relacijom $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$, izraz (5.61) može da se prepíše kao

$$u(\vec{R}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}}, \quad \text{za } \vec{k} = \xi_i \vec{b}_i. \quad (5.62)$$

Kombinujući formule (5.57) i (5.62) imamo

$$\psi(\vec{r} - \vec{R}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{r})} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r}), \quad (5.63)$$

odnosno funkcija

$$\phi(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{R})} \psi(\vec{r} - \vec{R}) \quad (5.64)$$

je periodična.

Da vidimo, konačno, kako se u kvantnoj mehanici reprezentuju *rotacije*. Rotacija oko z -ose za ugao α na talasnu funkciju $\psi(\vec{r})$ deluje kao

$$U(R(\alpha, \vec{e}_z)) \psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}(\alpha, \vec{e}_z)\vec{r}), \quad (5.65)$$

gde je

$$R(\alpha, \vec{e}_z) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.66)$$

Hoćemo da nadjemo generatore rotacije, u ovom slučaju, generator rotacije oko z -ose, τ_z . Njega ćemo naći kao i ranije, iz infinitezimalno male rotacije, $\alpha = \epsilon$,

$$R(\epsilon, \vec{e}_z) = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 - i\epsilon T_z \quad (5.67)$$

ili možemo da koristimo jednačinu (5.26) koja daje sve generatore, pa i $(T_3)_{ik} = i\epsilon_{ijk}$. Imamo dalje

$$R^{-1}(\epsilon, \vec{e}_z) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = R(-\epsilon, \vec{e}_z) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + \epsilon y \\ -\epsilon x + y \\ z \end{pmatrix}. \quad (5.68)$$

Prema tome, iz izraza za male rotacije

$$\psi(R^{-1}(\epsilon, \vec{e}_z)\vec{r}) = \psi(x + \epsilon y, -\epsilon x + y, z) = \psi(x, y, z) + \epsilon \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right). \quad (5.69)$$

i definicije generatora

$$U(R(\epsilon, \vec{e}_z)) \psi(x, y, z) = (1 - i\epsilon\tau_z) \psi(x, y, z), \quad (5.70)$$

dobijamo

$$\tau_z \psi = iy \frac{\partial \psi}{\partial x} - ix \frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{L_z}{\hbar} \psi. \quad (5.71)$$

Ovaj rezultat se lako uopstava. Ako označimo $\epsilon_i = \epsilon n_i$, imamo

$$\psi(R(\epsilon, -\vec{n})\vec{r}) = \psi(x_i - \epsilon_{ijk}\epsilon_j x_k) = \psi(x_i) - \epsilon_{ijk}\epsilon_j x_k \partial_i \psi, \quad (5.72)$$

i sa druge strane,

$$U(R(\epsilon, \vec{n})) \psi = (I - i\epsilon_j \tau_j) \psi. \quad (5.73)$$

Upoređivanjem linearnih članova dobijamo

$$\tau_j = i\epsilon_{ijk} x_k \partial_i = \frac{L_j}{\hbar}, \quad (5.74)$$

tako da se opšta rotacija oko ose \vec{n} za ugao α može zapisati kao

$$U(R(\alpha, \vec{n})) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \vec{L}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha_i L_i}, \quad (5.75)$$

gde je $\alpha_i = \alpha n_i$.

U kvantnomehantičkoj reprezentaciji infinitezimalna transformacija je proporcionalna komutatoru sa generatorom. Zato, kao što se lako može proveriti, osobina da su opservable \vec{r} , \vec{p} i \vec{L} vektori znači da je

$$[L_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} x_k, \quad [L_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} p_k, \quad [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} L_k. \quad (5.76)$$

Sa druge strane r^2 , p^2 i L^2 su skalari pa je

$$[L_i, r^2] = 0, \quad [L_i, p^2] = 0, \quad [L_i, L^2] = 0. \quad (5.77)$$

5.4 UGAONI MOMENT

Problem određivanja svojstvenih vrednosti i svojstvenih stanja momenta impulsa može se rešiti, kao i u slučaju harmonijskog oscilatora, čisto algebarski. Kao i ranije rešavaćemo zajednički svojstveni problem od L^2 i L_z . Već smo definisali operatore

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y, \quad L_- = (L_+)^{\dagger}. \quad (5.78)$$

Lako se vidi da važe relacije

$$\begin{aligned} [L^2, L_{\pm}] &= 0, \\ [L_z, L_{\pm}] &= \pm \hbar L_{\pm}, \\ [L_+, L_-] &= 2\hbar L_z, \end{aligned} \quad (5.79)$$

a izražen preko L_{\pm} i L_z , kvadrat momenta impulsa je

$$\vec{L}^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z. \quad (5.80)$$

Pošto je dimenzija momenta impulsa $[L_z] = [\hbar]$, označićemo svojstvene vrednosti L_z i L^2 sa $b\hbar$ i $a\hbar^2$. Pretpostavićemo da postoji (bar jedan) zajednički svojstveni vektor koji odgovara ovim svojstvenim vrednostima, $|a, b\rangle$:

$$L^2|a, b\rangle = a\hbar^2|a, b\rangle, \quad L_z|a, b\rangle = b\hbar|a, b\rangle; \quad (5.81)$$

sem toga pretpostavljamo i da je ovaj vektor normiran, $\langle a, b|a, b\rangle = 1$. Naravno, L^2 je pozitivan operator pa je $a \geq 0$. da operator “podizanja” L_+ povećava vrednost b za 1 pokazaćemo na sledeći način. Ako označimo $|\chi\rangle = L_+|a, b\rangle$, imamo

$$\begin{aligned} L^2|\chi\rangle &= L^2L_+|a, b\rangle = L_+L^2|a, b\rangle = a\hbar^2|\chi\rangle, \\ L_z|\chi\rangle &= L_zL_+|a, b\rangle = (L_+L_z + \hbar L_z)|a, b\rangle = (b+1)\hbar|\chi\rangle. \end{aligned} \quad (5.82)$$

To znači da je i vektor $|\chi\rangle$ zajednički svojstveni vektor za L^2 i L_z , i da je

$$|\chi\rangle \sim |a, b+1\rangle. \quad (5.83)$$

Izračunajmo njegovu normu:

$$\langle \chi|\chi\rangle = \langle a, b|L_-L_+|a, b\rangle = \langle a, b|L^2 - L_z^2 - \hbar L_z|a, b\rangle = (a^2 - b^2 - b)\hbar^2. \quad (5.84)$$

Dakle, možemo da zaključimo

$$L_+|a, b\rangle = \hbar \sqrt{a^2 - b(b+1)} |a, b+1\rangle. \quad (5.85)$$

pri čemu smo fiksirali i fazni faktor. Primitimo, da bi kvadrat norme bio pozitivan mora da važi

$$a^2 \geq b(b+1). \quad (5.86)$$

Slično, za $|\chi\rangle = L_-|a, b\rangle$ dobija se

$$L_-|a, b\rangle = \hbar \sqrt{a^2 - b(b-1)} |a, b-1\rangle \quad (5.87)$$

i

$$a^2 \geq b(b-1). \quad (5.88)$$

Znači, $a^2 \geq b^2$ odnosno apsolutna vrednost od b je ograničena odozgo, za fiksirano a . Medjutim s druge strane, pri svakom delovanju L_+ na svojstveni vektore vrednost b se poveća za 1, tako da se uzastopnim delovanjem operatora L_+ vrednost b može proizvoljno povećati, što je kontradikcija. Odnosno, uvek je kontradikcija osim kad postoji vrednost b_{max} za koju je

$$L_+|a, b_{max}\rangle = 0, \quad (5.89)$$

pa se daljim delovanjem operatora L_+ stalno dobija nula. Za ovu vrednost onda važi

$$a^2 = b_{max}(b_{max} + 1). \quad (5.90)$$

Slično, i delovanje L_- treba da se prekine na nekoj vrednosti b_{min} . Analogno dobijamo

$$a^2 = b_{min}(b_{min} - 1), \quad (5.91)$$

odnosno

$$b_{max}(b_{max} + 1) = b_{min}(b_{min} - 1) \quad (5.92)$$

to jest

$$(b_{max} + b_{min})(b_{max} - b_{min} + 1) = 0. \quad (5.93)$$

Rešenje ove jednačine je

$$b_{max} = -b_{min} = l. \quad (5.94)$$

Pošto je broj koraka izmedju najnižeg stanja $|a, b_{min}\rangle$ i najvišeg stanja $|a, b_{max}\rangle$ za fiksirano a jednak $b_{max} - b_{min} = 2l$, sledi da je $2l$ prirodan broj ili nula. Znači, l je ceo ili poluceo broj.

Dobijeni bazis svojstvenih stanja momenta impulsa označava sa

$$|a, b\rangle = |l, m\rangle, \quad (5.95)$$

i zove standardni bazis. Pri tome, $m_{min} = -l \leq m \leq m_{max} = l$; imamo $2l+1$ vrednosti kvantnog broja m . Svojstvene vrednosti momenta impulsa su kvantovane, diskretne. Skup svojstvenih stanja $|l, m\rangle$ koja imaju fiksiranu vrednost l zove se multiplet, i ovaj skup odnosno odgovarajući potprostor je zatvoren na delovanje svih L_i, L_{\pm} . Drugim rečima, potprostor za fiksirano l , $\{|l, m\rangle, m = -l, \dots, l\}$ je ireducibilan i predstavlja linearni prostor u kome deluje ireducibilna reprezentacija grupe rotacija $SO(3)$.

$$L_+|l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m-1\rangle \quad (5.96)$$

$$L_-|l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|l, m-1\rangle \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}|l, m\rangle \quad (5.97)$$

Ireducibilne reprezentacije su konačnodimenzionalne a operatori L_i su u njima prikazani kvadratnim $(2l+1) \times (2l+1)$ matricama. Skup sfernih harmonika $Y_l^m(\theta, \varphi)$ s druge strane je beskonačnodimenzionalan: ta reprezentacija je zbir svih ireducibilnih reprezentacija za celobrojne vrednosti l .

5.5 SPIN 1/2

Rešavajući svojstvene jednačine za orbitni ugaoni moment dobili smo sferne harmonike $Y_l^m(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$ koji imaju celobrojne vrednosti l i m ; sa druge strane, iz opšte teorije ugaonog momenta odnosno algebarskim rešavanjem istog problema dobili smo da vrednosti l i m u principu mogu da budu i polucele. Da li zaista čitav niz stanja koja su matematički dozvoljena nije realizovan u prirodi? Da ovo nije slučaj otkrili su Stern i Gerlach u eksperimentu u kome snop elektrona odnosno atoma prolazi kroz nehomogeno magnetno polje.

Dominantni član koji opisuje energiju interakcije elektrona sa slabim magnetnim poljem i u slučaju nehomogenog polja je $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Razmotrimo evoluciju snopa elektrona koji se inicijalno kretao duž x -ose kada udje u nehomogeno magnetno polje, $\vec{B} = B(\vec{r}) \vec{e}_z$. Hamiltonijan elektrona je

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \mu_B L_z B(\vec{r}). \quad (5.98)$$

Promena z -komponente impulsa, p_z , može se odrediti koristeći jednačine kretanja u Heisenberg-ovoj slici ili iz Ehrenfest-ove teoreme:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\langle p_z \rangle}{dt} &= \langle [p_z, H] \rangle = \mu_B \langle L_z [p_z, B] \rangle \\ &= -i\hbar \mu_B \langle L_z \frac{\partial B}{\partial z} \rangle. \end{aligned} \quad (5.99)$$

Ako pretpostavimo na primer da je gradijent $\frac{\partial B}{\partial z} = \text{const}$, dobijamo

$$\frac{d\langle p_z \rangle}{dt} = -\mu_B \frac{\partial B}{\partial z} \langle L_z \rangle. \quad (5.100)$$

Znači ako je snop pre ulaska u magnetno polje bio u stanju sa određenom vrednošću L_z , pri prolasku kroz magnetno polje on skreće u pravcu nehomogenosti polja a proporcionalno $\langle L_z \rangle$. Ako su u snopu na ulazu bila pomešana stanja sa različitim vrednostima magnetnog kvantnog broja, pri prolasku kroz magnetno polje snop će se razdvojiti na onoliko delova koliko je bilo vrednosti L_z .

Eksperimentalnu situaciju analognu gore opisanoj ostvarili su Stern i Gerlach u eksperimentu iz 1922. Oni su merili vrednosti momenta impulsa,

odnosno magnetnog dipolnog momenta, atoma srebra pri prolasku kroz nehomogeno magnetno polje. Srebro ima omotač koji se sastoji od 47 elektrona, pri čemu je ukupni ugaoni moment prvih 46 elektrona nula tako da je moment impulsa atoma jednak momentu impulsa poslednjeg (5s) elektrona. U principu i ne znajući detalje strukture, očekivali bismo da se inicijalni snop razdvaja na neparan broj snopova, $2l + 1$. U eksperimentu, snop se razdvaja na dva dela! Sličan eksperiment sa vodonikovim atomima u osnovnom stanju ponovili su 1927. Phipps i Taylor, sa istim rezultatom. Umesto da prolazi nepromenjen kroz magnetno polje pošto je u stanju sa $l = 0$, snop se cepao na dva. Pri tome je utvrđeno i da odgovarajući magnetni moment, zbog svog reda veličine, potiče od elektrona.

Jedino objašnjenje ovakvog ponašanja je da elektron, osim orbitnog, ima unutrašnji moment impulsa, *spin*; vrednosti ovog ugaonog momenta su polucele. Vrednost $s = 1/2$ dobija se iz činjenice da se početni snop cepa na dva: $2s + 1 = 2$. U skladu s tim, magnetni kvantni broj $m_s = \pm 1/2$. 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 foton, Higgs-ov bozon). Kao što se u Stern-Gerlach-ovom eksperimentu vidi i spin ima magnetni dipolni moment,

$$\vec{\mu} = g \frac{e}{2mc} \vec{s} = -g\mu_B \vec{s} \quad (5.101)$$

jer interaguje sa magnetnim poljem. Faktor proporcionalnosti g zove se žiromagnetni odnos; za elektron, $g = 2.0022$. Formule analogne (5.101) važe za proton i neutron (uz zamenu $m \rightarrow m_p$ odnosno $\mu_B \rightarrow \mu_N$: $\mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_p c}$ se zove nuklearni magneton), pri čemu su žiromagnetni odnosi protona i neutrona razlomljeni, $g_p = 5.59$ i $g_n = -3.83$.

Analizirajmo detaljnije spinska stanja elektrona. Kao što smo videli, projekcija spina na z -osu s_z ima dve moguće vrednosti, $m_s = \pm 1/2$; vrednost kvadrata spina s^2 je $3/4$. Znači prostor stanja spina je dvodimenzion a spinska stanja možemo prikazati kao vektore-kolone od dva elementa. Svojevremena stanja pisaćemo kao

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.102)$$

Da vidimo kako se u ovom prostoru reprezentuju operatori spina. Očigledno,

$$s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad s^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.103)$$

s_{\pm} možemo naći iz njihovog delovanja na vektore bazisa. Iz formule

$$L_+ |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle$$

vidimo da je

$$s_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0, \quad s_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle. \quad (5.104)$$

Ako s_+ predstavimo pomoću matrice

$$s_+ = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad (5.105)$$

gornje jednakosti mogu se prepisati kao

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.106)$$

i iz njih dobijamo

$$s_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_- = (s_+)^\dagger = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.107)$$

i

$$s_x = \frac{1}{2}(s_+ + s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2i}(s_+ - s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.108)$$

Matrice σ_i

$$s_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad (5.109)$$

nazivaju se Pauli-jeve matrice.

Relacija koja karakteriše algebru Pauli-jevih matrica je

$$\sigma_i \sigma_k = \delta_{ik} + i\epsilon_{ikl} \sigma_l. \quad (5.110)$$

Projekcija spina na osu $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z) = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ data je matricom $\sigma_{\vec{n}}$:

$$s_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}, \quad \sigma_{\vec{n}} = \begin{pmatrix} n_z & n_- \\ n_+ & -n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (5.111)$$

čiji je kvadrat, kao i kod ostalih Pauli-jevih matrica, jednak I , pa su joj svojstvene vrednosti ± 1 .

Kako u svom udžbeniku kaže Sakurai², spin 1/2 i opštije sistemi sa dva stepena slobode su najmanje klasični, maksimalno kvantni sistemi i često se uzimaju kao primer da bi se ilustrovali tipični kvantni efekti. Možda još češće od spinskih stanja fermiona analiziraju se stanja polarizacije fotona: matematički opis je isti. Mada je, videli smo u početku ovog poglavlja, spin vezan sa orbitnim kretanjem čestice, postoje situacije u kojima se on može razmatrati, u formalizmu, nezavisno. U nastavku ćemo analizirati problem analogan Larmor-ovoj precesiji, precesiju spina u homogenom magnetnom polju.

²J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1994.

Zanima nas kako evoluiraju sistem koji ima spin $1/2$ u magnetnom polju $\vec{B} = B\vec{e}_z$, $B = \text{const}$: videli smo da je hamiltonijan koji opisuje njegovo kretanje

$$H = 2\mu_B \vec{s} \cdot \vec{B} = \omega s_z, \quad \omega = \frac{|e|B}{mc}. \quad (5.112)$$

Oдавde lako zaključujemo da su svojstvena stanja hamiltonijana zapravo svojstvena stanja z -projekcije spina, a svojstvene energije jednake $\pm\hbar\omega/2$. Proanalizirajmo vremensku evoluciju ovog sistema. Evolucionni operator

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = e^{-\frac{i\omega s_z t}{\hbar}} \quad (5.113)$$

proporcionalan je operatoru rotacije oko z -ose za ugao $\alpha = \omega t$. $U(t)$ se, korišćenjem osobine $\sigma_z^2 = I$, može izračunati eksplicitno,

$$e^{-\frac{i\alpha s_z}{\hbar}} = e^{-\frac{i\alpha \sigma_z}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{-i\alpha \sigma_z}{2}\right)^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{-i\alpha \sigma_z}{2}\right)^{2n+1}. \quad (5.114)$$

Pošto je

$$\sigma_z^{2n} = I, \quad \sigma_z^{2n+1} = \sigma_z, \quad (5.115)$$

dobijamo

$$e^{-\frac{i\alpha s_z}{\hbar}} = \cos \frac{\alpha}{2} I - i \sin \frac{\alpha}{2} \sigma_z = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}; \quad (5.116)$$

doduše ovo se vidi i direktno iz (3.65). Dobijena formula daje važnu karakteristiku spinske reprezentacije: rotacija za ugao 2π nije jedinična transformacija nego važi

$$U\left(\frac{2\pi}{\omega}\right) = -I. \quad (5.117)$$

Drugim rečima, period promene stanja sistema u magnetnom polju je

$$T = \frac{4\pi}{\omega}. \quad (5.118)$$

Sa druge strane ako izračunamo kako evoluiraju operatori spina, na primer $s_x(t)$, dobijamo

$$s_x(t) = U^{-1}(t) s_x U(t) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} = \cos \omega t s_x - \sin \omega t s_y, \quad (5.119)$$

$$\langle s_x(t) \rangle = \cos \omega t \langle s_x \rangle - \sin \omega t \langle s_y \rangle. \quad (5.120)$$

Prema tome, period precesije spina kao opservable je dvostruko manji,

$$T_{\vec{s}} = \frac{2\pi}{\omega}. \quad (5.121)$$

Na nivou očekivanih vrednosti ovu razliku je lakše razumeti: za vreme $2\pi/\omega$ stanja se promene za faktor (-1) , $|\chi\rangle \rightarrow -|\chi\rangle$, dok očekivane vrednosti $\langle\chi|\vec{s}|\chi\rangle$ ostaju iste jer je $(-1)^2 = 1$.

Precesija spina u magnetnom polju daje mogućnost eksperimentalne provere činjenice da se, kod fermiona, tek rotacija za ugao 4π svodi na jediničnu transformaciju. U eksperimentima koje su 1975. izveli nezavisno H. Rauch i S. A. Werner, ulazni snop neutrona podeli se na dva snopa od kojih jedan prolazi kroz magnetno polje a drugi ne. Snopovi se posle opet spajaju i detektuje se njihova interferencija. Iz naše prethodne analize je jasno da će fazna razlika zavistiti od jačine polja B i vremena koje drugi snop provede u magnetnom polju. Variranjem parametara i analizom interferencione slike dobija se da je period promene talasne funkcije zaista (5.118), ili rečima teorije grupa, da je reprezentacija $s = 1/2$ dvoznačna.

5.6 ★ PROSTOR STANJA ELEKTRONA

Stern-Gerlach-ov i ostali eksperimenti pokazuju da elektron, osim položaja, impulsa, energije, orbitnog momenta impulsa, karakteriše i jedna dodatna osobina nezavisna od prostornih promenljivih: spin. Ovakve osobine nazivaju se unutrašnji stepeni slobode. Naravno, spin se manifestuje kroz interakciju sa magnetnim poljem i tako utiče na prostorno kretanje elektrona. Nezavisnost spina od prostornih osobina znači da u talasnu funkciju elektrona treba da dodamo informaciju o spinu, odnosno kvantne brojeve koji ga opisuju,

$$\Psi(s, \vec{r}) = \langle s, \vec{r} | \Psi \rangle, \quad (5.122)$$

kao i da se merenje spina može izvršiti istovremeno sa merenjem prostornih opservabli. Matematički, nezavisnost se iskazuje kroz činjenicu da je prostor stanja elektrona tenzorski proizvod orbitnog i spinskog prostora,

$$|s, \vec{r}\rangle = |s\rangle \otimes |\vec{r}\rangle. \quad (5.123)$$

Tenzorski proizvod smo već koristili pri prelasku sa jednodimenzionog na trodimenzioni prostor. Analogno sa (5.123) imamo zapravo

$$|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle. \quad (5.124)$$

Osnovna razlika je što je u slučaju spina, “spinski prostor” prostor brojnih kolona od dva elementa, dok je prostor stanja jednodimenzione čestice \mathcal{H} obrazovan (razapet) bazisom svojstvenih vektora koordinate $|x\rangle$, pa je beskonačnodimenzion. Dodavanje stepeni slobode uvek se u kvantnoj mehanici realizuje tenzorskim proizvodom. Za elektron je tzv. nekorelisani bazis dat sa

$$\Psi(+, \vec{r}) = |+\rangle \otimes \psi_+(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi(-, \vec{r}) = |-\rangle \otimes \psi_-(\vec{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}.$$

Proizvoljno stanje, koje nema oštru vrednost spina s_z je

$$\Psi(s, \vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (5.125)$$

ova dvokomponentna talasna funkcija naziva se *spinor*. Naravno, prostor stanja elektrona je “dvostruko veći” od prostora stanja čestice bez spina pa je u kompletnom opisu na primer, degeneracija n -tog nivoa energije vodonikovog atoma zapravo $2n^2$, jer svako od n^2 orbitnih stanja $|n, l, m\rangle$ može imati dve projekcije spina na z -osu, $\pm 1/2$. Zato je prava oznaka svojstvenih funkcija elektrona u atomu vodonika $|n, l, m, m_s\rangle$. U mnogim fizičkim problemima spin se dekupluje od prostornih stepeni slobode pa sa dovoljnom tačnošću uticaj spina možemo da zanemarimo; ili pak da evoluciju spinskih stepeni slobode posmatramo nezavisno od prostornih.

5.7 SABIRANJE UGAONIH MOMENATA

Videli smo da je u slučaju više čestica ukupni impuls sistema,

$$\vec{P} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \quad (5.126)$$

opservabla koja generiše translacije. Isto je i sa momentom impulsa. Razmotrimo na primer kako se pri rotacijama menja talasna funkcija elektrona odnosno spinor

$$|\Psi\rangle = |\chi\rangle \otimes |\psi\rangle, \quad \Psi(s, \vec{r}) = \chi(s) \otimes \psi(\vec{r}). \quad (5.127)$$

Stanje (5.127) je nekorelisano: predstavlja proizvod spinskog i prostornog stanja. Ako izvršimo rotaciju za ugao α oko ose \vec{n} imamo

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha n_i s_i} |\chi\rangle \otimes e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha n_i L_i} |\psi\rangle, \quad (5.128)$$

odnosno

$$\Psi(s, \vec{r}) \rightarrow \Psi'(s, \vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha s \vec{n}} \chi \psi(R^{-1}(\alpha, \vec{n}) \vec{r}). \quad (5.129)$$

Identično se transformiše i proizvoljni spinor. Posmatrajući infinitezimalnu rotaciju dobijamo da je generisana operatorom

$$\vec{j} = \vec{s} + \vec{L} \quad (5.130)$$

ili preciznije, poštujući notaciju tenzorskog proizvoda,

$$\vec{j} = \vec{s} \otimes I + I \otimes \vec{L}. \quad (5.131)$$

Kao što smo već rekli, spin i orbitni ugaoni moment su nezavisne opservable koje se mogu meriti istovremeno, i komutiraju. U slučaju N čestica ukupni moment impulsa je

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^N \vec{j}_i. \quad (5.132)$$

Razmotrićemo primer sabiranja spinskog i orbitnog ugaonog momenta detaljnije. Jedan od mogućih bazisa koji se mogu koristiti za opis ukupnog ugaonog momenta elektrona je nekorelisani bazis, koji ima dobro definisane vrednosti i spina i orbitnog ugaonog momenta. Ovo je naravno moguće jer

$$[s_i, L_j] = 0, \quad (5.133)$$

pa ima smisla da ova stanja označimo kao $|s, m_s, l, m\rangle$, odnosno

$$\begin{aligned} \langle \theta, \varphi | \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, l, m \rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes Y_l^m = \begin{pmatrix} Y_l^m \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \langle \theta, \varphi | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, l, m \rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes Y_l^{m'} = \begin{pmatrix} 0 \\ Y_l^{m'} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Medjutim, nas u principu zanimaju svojstvene vrednosti ukupnog momenta impulsa, odnosno zajedničke svojstvene vrednosti od opservabli j^2 i j_z . Pošto je

$$\vec{j}^2 = (\vec{s} + \vec{L})^2 = s^2 + L^2 + 2(s_x L_x + s_y L_y + s_z L_z), \quad (5.134)$$

lako se vidi da važi

$$[j^2, L^2] = 0, \quad [j^2, s^2] = 0, \quad (5.135)$$

kao i

$$[j_z, L^2] = 0, \quad [j_z, s^2] = 0 \quad (5.136)$$

jer su s^2 i L^2 skalari pa komutiraju sa ukupnim momentom impulsa \vec{j} . Zato kao osnovni skup stanja možemo da izaberemo $|j, m_j, s, l\rangle$.

Da bismo odredili ova stanja, prvo da vidimo eksplicitno kako operatori j_z i j^2 izgledaju. Imamo

$$\begin{aligned} j_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes L_z + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes I = \begin{pmatrix} L_z + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & L_z - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}, \\ j^2 &= s^2 + L^2 + 2\vec{s} \cdot \vec{L} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes I + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes L^2 \\ &+ \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes L_x + \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes L_y + \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes L_z \\ &= \begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L_- \\ \hbar L_+ & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.137)$$

Treba da rešimo jednačine

$$\begin{aligned} j_z \Psi_{jm_j l} &= \hbar m_j \Psi_{jm_j l} \\ j^2 \Psi_{jm_j l} &= \hbar^2 j(j+1) \Psi_{jm_j l}. \end{aligned} \quad (5.138)$$

Pretpostavimo da je rešenje $\Psi_{jm_j l}$ oblika

$$\Psi_{jm_j l} = \begin{pmatrix} \alpha Y_l^m \\ \beta Y_l^{m'} \end{pmatrix}. \quad (5.139)$$

Svojstvena jednačina za j_z daje

$$m_j = m + \frac{1}{2} = m' - \frac{1}{2}, \quad (5.140)$$

odnosno $m = m_j - \frac{1}{2}$, $m' = m_j + \frac{1}{2}$, $m' = m + 1$ i

$$\Psi_{jm_j l} = \begin{pmatrix} \alpha Y_l^{m_j - \frac{1}{2}} \\ \beta Y_l^{m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (5.141)$$

Uvodjenjem poslednjeg izraza, svojstvena jednačina za j^2 postaje

$$\begin{pmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + m & \sqrt{l(l+1) - (m+1)m} \\ \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} & l(l+1) + \frac{3}{4} - (m+1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha Y_l^m \\ \beta Y_l^{m+1} \end{pmatrix} = j(j+1) \begin{pmatrix} \alpha Y_l^m \\ \beta Y_l^{m+1} \end{pmatrix}$$

Rešavanjem svojstvene jednačine za j^2 dobićemo vrednosti konstanti α i β tj. njihov odnos, kao i moguće vrednosti kvantnog broja j . Označavajući $\lambda = j(j+1)$ za λ imamo

$$\begin{vmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + m - \lambda & \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \\ \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} & l(l+1) + \frac{3}{4} - (m+1) - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (5.142)$$

Vrednost ove determinante ne zavisi od m , kao što se vidi sredjivanjem prethodnog izraza:

$$\lambda^2 - 2\lambda(l + \frac{1}{2})^2 + (l + \frac{1}{2})^4 - (l + \frac{1}{2})^2 = 0, \quad (5.143)$$

odnosno

$$\lambda_{1,2} = (l + \frac{1}{2})^2 \pm (l + \frac{1}{2}) = l^2 - \frac{1}{4}, \quad l^2 + 2l + \frac{3}{4}. \quad (5.144)$$

Imamo dve moguće svojstvene vrednosti za j : $j = l + \frac{1}{2}$ i $j = l - \frac{1}{2}$. Vrednosti koeficijenata α i β nalaze se iz svojstvene jednačine, npr. u slučaju $j = l - \frac{1}{2}$ imamo

$$(l + m + 1)\alpha = -\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\beta, \quad \alpha = -\sqrt{\frac{j - m_j + 1}{j + m_j + 1}}\beta \quad (5.145)$$

i normiranja na jedinicu.

Najjednostavniji slučaj slaganja ugaonih momenata je sabiranje dva spina $s = 1/2$:

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \quad (5.146)$$

ovim se dobija na primer ukupni spin sistema dva elektrona. Kao što smo rekli,

$$[s_{1i}, s_{2j}] = 0, \quad (5.147)$$

odnosno spinovi različitih čestica međusobno komutiraju, a komponente ukupnog spina zadovoljavaju

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k. \quad (5.148)$$

Kao i u prethodnom primeru imamo

$$\vec{S}^2 = \vec{s}_1^2 + \vec{s}_2^2 + 2\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2, \quad (5.149)$$

gde je

$$\vec{s}_1 = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \otimes I, \quad \vec{s}_2 = \frac{\hbar}{2} I \otimes \vec{\sigma}. \quad (5.150)$$

Tenzorskim množenjem se dobija, na primer

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$S_{1z}S_{2z} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.151)$$

$$\vec{S}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

i tako dalje. Bazis u kome su ove matrice napisane je takodje proizvod,

$$|++\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |+-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|-+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |--\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Na osnovu izraza (5.151) vidimo da je S_z u zadatom bazisu već dijagonalna matrica sa svojstvenim vrednostima $\hbar, 0, -\hbar$; S^2 , međutim nije. Doduše, svojstveni vektori su joj $|++\rangle$ i $|--\rangle$, 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 $|+-\rangle$ i $|-+\rangle$. Svojstvene vrednosti ove matrice su $2\hbar^2$ i 0 , a odgovarajući svojstveni vektori su

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (5.152)$$

Da zaključimo: sistem od dva elektrona ima četiri spinska stanja:

$$\begin{aligned} \text{triplet, } S = 1 : & \quad |++\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad |--\rangle \\ \text{singlet, } S = 0 : & \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle). \end{aligned} \quad (5.153)$$

I konačno, da kažemo nešto o slaganju ugaonih momenata u opštem slučaju. Pretpostavimo da imamo dva ugaona momenta \vec{L}_1 i \vec{L}_2 , odnosno dve ireducibilne reprezentacije karakterisane sa l_1 i l_2 . Podsistemi su nezavisni,

$$[L_{1i}, L_{2j}] = 0. \quad (5.154)$$

Njihov zbir je ukupni ugaoni moment sistema,

$$\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \quad J^2 = L_1^2 + L_2^2 + 2\vec{L}_1 \cdot \vec{L}_2 \quad (5.155)$$

a prostor stanja, tenzorski proizvod sa bazisom

$$|l_1, m_1, l_2, m_2\rangle = |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle. \quad (5.156)$$

Sa druge strane, već smo videli da bazis možemo birati drugačije: istovremenom dijagonalizacijom J^2, J_z, L_1^2 i L_2^2 . Videli smo takodje na primerima da u ovom slučaju vrednost ukupnog ugaonog momenta j nije jednoznačno određena nego da može da ima više vrednosti. Opšte pravilo je da j ima sve vrednosti

$$j = l_1 + l_2, \dots, |l_1 - l_2| \quad (5.157)$$

po jedan put. Ovo odgovara vektorskom dijagramu slaganja ugaonih momenata:

slika a matematički, reč je o tome kako se tenzorski proizvod dve ireducibilne reprezentacije grupe $SO(3)$ razlaže na direktni zbir ireducibilnih reprezentacija. Koeficijenti u razvoju jednog bazisa po drugom

$$|j, m_j, l_1, l_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2, j m_j} |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle \quad (5.158)$$

zovu se Clebsch-Gordan-ovi (CG) koeficijenti,

$$C_{m_1 m_2, j m_j} = \langle l_1, m_1, l_2, m_2 | j, m_j, l_1, l_2 \rangle. \quad (5.159)$$

Skiciraćemo kako se dokazuje gornji iskaz (5.157) i određuju Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti. Polazimo od bazisa (5.156) koji je proizvod stanja sa definisanim ugaonim momentom podsistema 1 i 2. Iz činjenica da je

$$J_z = L_{1z} + L_{2z}, \quad [L_{1z}, L_{2z}] = 0, \quad (5.160)$$

zaključujemo da ova stanja imaju i oštru vrednost ukupnog J_z ,

$$J_z |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle. \quad (5.161)$$

J_z je dijagonalno u bazisu (5.156), te je operator koji još treba da dijagonalizujemo kvadrat, J^2 . Vrednosti CG koeficijenata proporcionalne su prema tome sa Kronecker-ovom deltom,

$$\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | j, m_j, l_1, l_2 \rangle \sim \delta_{m_j, m_1 + m_2}. \quad (5.162)$$

Slično kao i J_z , možemo definisati i operatore podizanja i spuštanja,

$$J_+ = J_x + iJ_y = L_{1+} \otimes I + I \otimes L_{2+}, \quad (5.163)$$

i $J_- = (L_+)^{\dagger}$. U bazisu (5.156) ima $(2l_1 + 1) \times (2l_2 + 1)$ vektora,

$$m_1 = -l_1, \dots, l_1, \quad m_2 = -l_2, \dots, l_2 \quad (5.164)$$

pa su prema tome moguće vrednosti kvantnog broja m_j date sa

$$m_j = m_1 + m_2 = -l_1 - l_2, \dots, l_1 + l_2. \quad (5.165)$$

Minimalnu i maksimalnu vrednost, $m_j = -l_1 - l_2$ i $m_j = l_1 + l_2$ ima samo po jedan vektor, $|l_1, -l_1, l_2, -l_2\rangle$ i $|l_1, l_1, l_2, l_2\rangle$. Od najvišeg vektora $|l_1, l_1, l_2, l_2\rangle$ do najnižeg, $|l_1, -l_1, l_2, -l_2\rangle$ možemo da stignemo delovanjem operatora J_- , što nam daje ceo multiplet ugaonog momenta sa $j = l_1 + l_2$, dimenzije $2(l_1 + l_2) + 1$. Dalje, linearne nezavisne vektora koji imaju vrednost $m_j = l_1 + l_2 - 1$ ima tačno dva: to su $|l_1, l_1 - 1, l_2, l_2\rangle$ i $|l_1, l_1, l_2, l_2 - 1\rangle$. Kada u ovom dvodimenzionom potprostoru za jedan od bazisnih vektora uzmemo

$$|j = l_1 + l_2, m_j = l_1 + l_2 - 1, l_1, l_2\rangle \sim J_- |l_1, l_1, l_2, l_2\rangle, \quad (5.166)$$

drugi bazisni vektor, ortogonalan na (5.166), odgovara vrednosti $j = l_1 + l_2 - 1$ jer ima projekciju $m_j = l_1 + l_2 - 1$: on predstavlja gornji ili najviši vektor multipleta $l_1 + l_2 - 1$. Delovanjem sa J_- iz ovog vektora dobijamo i ceo multiplet odnosno svih $2(l_1 + l_2 - 1) + 1$ vektora koji mu pripadaju. Ovaj postupak možemo da produžimo dalje, a njegovo bitno svojstvo je da uvek

dobijamo cele multiplete momenta impulsa J . Broj koraka k koji možemo da napravimo dok ne iscrpimo ceo $(2l_1 + 1) \times (2l_2 + 1)$ -dimenzioni prostor može da se odredi iz jednačine

$$2(l_1 + l_2) + 1 + \dots + 2(l_1 + l_2 - k) + 1 = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1). \quad (5.167)$$

Imamo

$$\sum_{i=0}^k 2(l_1 + l_2 - i) + k + 1 = (2l_1 + 2l_2 - k + 1)(k + 1), \quad (5.168)$$

pa rešavanjem jednačine dobijamo broj koraka k ,

$$k = l_1 + l_2 \pm |l_1 - l_2|. \quad (5.169)$$

Ovom k odgovara minimalna vrednost momenta impulsa,

$$j = l_1 + l_2 - k = |l_1 - l_2|. \quad (5.170)$$

5.8 ★ IZOSPIN

Videli smo da u prirodi i u umetnosti pojam simetrije podrazumeva ponavljanje odnosno invarijantnost nekih osobina: u kvantnomehničkom sistemu degeneracija nivoa energije ukazuje na simetriju. Veoma važan korak za uvođenje i razvoj pojma *unutrašnje simetrije* učinjen je 1932. godine kada je Chadwick eksperimentalno otkrio neutron, treću česticu koja sa elektronom i protonom gradi atom. Eksperimentalno izmerena masa neutrona ja do na 0.1% jednaka masi protona:

	masa	spin	naelektrisanje
proton	939.565 MeV	1/2	-e
neutron	938.272 MeV	1/2	0

Protoni i neutroni grade jezgro: redni broj atoma Z jednak je broju protona odnosno naelektrisanju jezgra $-Ze$, a atomski broj A proporcionalan je ukupnoj masi jezgra, $A = Z + N$, gde je N broj neutrona u jezgru.

Nekoliko meseci posle otkrića neutrona Heisenberg je predložio da približnu jednakost masa protona i neutrona treba interpretirati kao simetriju: proton i neutron su zapravo dva stanja iste čestice – nukleona, slično kao što su $|+\rangle$ i $|-\rangle$ dva spinska stanja elektrona. Ovu novu simetriju, po analogiji sa spinom, Wigner je 1935. nazvao *izospin* (izobarski spin). Za razliku od spina koji je unutrašnji stepen slobode odnosno inherentna osobina čestice, ali se manifestuje pri rotacijama spoljašnjeg, trodimenzionog prostora, izospinske transformacije nisu relirane sa prostornim transformacijama. One medju sobom transformišu komponente talasne funkcije ostavljajući koordinate i vreme nepromenjenim, i zato predstavljanju unutrašnju

simetriju. Zbog mnogih teorijskih ili matematičkih sličnosti pretpostavljeno je u početku da je grupa simetrije izospina Lie-jeva grupa $SU(2)$, a da su proton i neutron stanja najmanjeg netrivialnog multipleta ove grupe – dubleta,

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_p(s, \vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_n(s, \vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (5.171)$$

ili ako pišemo samo deo talasne funkcije u izospinskom prostoru,

$$|p\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.172)$$

Izospin, kao i ugaoni moment, ima tri komponente, tri opservable T_i , sa

$$[T_i, T_j] = i\epsilon_{ijk}T_k, \quad T^2 = T_i T_i. \quad (5.173)$$

Proton i neutron su svojstvena stanja treće komponente izospina T_3 , $t_3 = \pm 1/2$. Opservable izospina su za proton i neutron date σ -matricama (istorijski, τ -matricama),

$$T_i = \frac{1}{2} \sigma_i. \quad (5.174)$$

Razlika izmedju protona i neutrona može se izraziti i pomoću naelektrisanja Q : važi formula

$$Q = \left(\frac{A}{2} + T_3\right) |e|, \quad (5.175)$$

gde je A broj nukleona: $A = 1$ u oba stanja, $|p\rangle$ i $|n\rangle$.

Hipoteza izospina odnosno postojanja unutrašnjih simetrija ima ogroman konceptualni značaj u fizici elementarnih čestica, kao i mnogobrojne posledice. Mi ćemo neke od njih pomenuti ukratko. Pre svega, jasno je da iskaz da su proton i neutron “stanja iste čestice” nije u potpunosti tačan ni precizan u istom smislu u kom važi za dva spinska stanja elektrona. Ali sa druge strane, $|p\rangle$ i $|n\rangle$ su “skoro isti”, i kao što u magnetnom polju možemo da razlikujemo stanja $|+\rangle$ i $|-\rangle$, tako električno polje pravi razliku izmedju $|p\rangle$ i $|n\rangle$. Drugim rečima, izospinska simetrija nije simetrija svih sila kojima nukleoni interaguju, već samo jakih (nuklearnih) interakcija. Elektromagnetna interakcija narušava izospinsku simetriju jer zavisi od naelektrisanja Q odnosno T_3 , pa zato ne komutira sa svim komponentama izospina T_i . Ali pošto je jaka interakcija na malim rastojanjima (reda veličine jezgra, 10^{-15} m) mnogo jača od elektromagnetne, izospin je približno očuvan. Iz osobina operatora ugaonog momenta znamo da se u sistemu više čestica vrednost opservable T_3 sabira: t_3 je aditivan kvantni broj.

Pošto nuklearne interakcije imaju izospinsku simetriju, hamiltonijan koji ih opisuje može da zavisi samo od T^2 . Obično se analizira interakcija oblika

$$H = I \otimes f(r) + T^2 \otimes g(r). \quad (5.176)$$

Izospinska simetrija ima mnoge manifestacije u nuklearnoj fizici. Najjednostavnije vezano stanje dva nukleona je deutron koji se sastoji od protona i neutrona,

$$A_d = 2, \quad Q_d = |e| \quad \Rightarrow \quad t_3 = 0. \quad (5.177)$$

Prema tome, osnovno stanje deuteronu je izospinski singlet $t = 0$ i ono ima ukupni spin $s = 1$. Sva stanja izospinskog tripleta dva nukleona, uključujući prvo pobudjeno stanje deuteronu, $(|pn\rangle - |np\rangle)/\sqrt{2}$, $|pp\rangle$ i $|nn\rangle$ su nestabilna.

Sledeći važan primer su jezgra vodonika H^3 ($Z = 1, N = 2$) i helijuma He^3 ($Z = 2, N = 1$). Ona u osnovnom stanju ($s = 1/2$) imaju skoro jednake energije, i relativno jednostavno možemo da vidimo da predstavljaju dublet u odnosu na izospin jer

$$A_{\text{H}^3, \text{He}^3} = 3, \quad Q_{\text{H}^3, \text{He}^3} = |e|, 2|e| \quad (5.178)$$

pa iz (5.175) sledi

$$(t_3)_{\text{H}^3, \text{He}^3} = \mp \frac{1}{2}. \quad (5.179)$$

Slično je i sa drugim *ogledalskim* jezgrima koja se razlikuju zamenom $Z \leftrightarrow N$. Uzmimo na primer osnovna stanja jezgara bora B^{12} ($Z = 5, N = 7$) i azota N^{12} ($Z = 7, N = 5$) koja imaju spin $s = 1$. Dobijamo da je

$$(t_3)_{\text{B}^{12}, \text{N}^{12}} = (5, 7) - 6 = \mp 1. \quad (5.180)$$

Postoji i treće stanje ovog izospinskog tripleta sa $t_3 = 0$ koje ima skoro istu vrednost energije: to je prvo pobudjeno stanje jezgra ugljenika C^{12} ($Z = 6, N = 6$). Ovo stanje takodje ima spin $s = 1$, dok osnovno stanje jezgra ugljenika ima spin $s = 0$.

Osim nukleona i jezgara, izospin je osobina i drugih teških čestica koje interaguju jakim interakcijim – hadrona. Najlakše čestice koje jako interaguju su pioni tj. triplet π -mezona:

	masa	spin	naelektrisanje	t_3
π^+	139.6 MeV	0	-e	1
π^0	135.0 MeV	0	0	0
π^-	139.6 MeV	0	e	-1

Iz formule (5.175) lako se vidi da je za ovaj multiplet vrednost izospina $t = 1$, jer je $A = 0$. Stanja piona u izospinskom prostoru mogu da se identifikuju kao

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -|\pi^+\rangle, \quad |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\pi^0\rangle, \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\pi^-\rangle.$$

Drugi karakteristični izospinski multipllet je multipllet Δ -bariona, za koji je $t = 3/2$:³

	masa	spin	naelektrisanje	t_3
Δ^{++}	$1232 \pm 2 \text{ MeV}$	$3/2$	$-2e$	$3/2$
Δ^+	$1232 \pm 2 \text{ MeV}$	$3/2$	$-e$	$1/2$
Δ^0	$1232 \pm 2 \text{ MeV}$	$3/2$	0	$-1/2$
Δ^-	$1232 \pm 2 \text{ MeV}$	$3/2$	e	$-3/2$

Izospinska simetrija nam pomaže da nadujemo relativne širine raspada (“branching ratios”) za određene sudare i raspade čiji je mehanizam jaka interakcija. U ovakvim računima važnu ulogu igraju Wigner-Eckart-ova teorema i Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti. Pretpostavimo naime da želimo da odredimo verovatnoću raspada, ili prelaza iz početnog stanja sistema $|\Psi(0)\rangle = |\psi\rangle$ u stanje $|\chi\rangle$ u kasnijem trenutku t . Ova verovatnoća je određena projekcijom

$$\langle\chi|\Psi(t)\rangle = \langle\chi|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi\rangle, \quad (5.181)$$

odnosno matričnim elementom operatora evolucije

$$U(0, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}, \quad S = U(-\infty, \infty), \quad (5.182)$$

koji se, ako gledamo evoluciju od minus i plus beskonačnosti, naziva S -matrica (od engleske reči “scattering”, sudar).⁴ Pretpostavimo sada da je hamiltonijan invarijantan na izospinske transformacije, tj. da je oblika (5.176) i zavisi samo od T^2 : H je izoskalar. Ako su stanja $|\chi\rangle$ i $|\psi\rangle$ oblika

$$|\chi\rangle = |t', t'_3\rangle, \quad |\psi\rangle = |t, t_3\rangle \quad (5.183)$$

lako se vidi da je

$$\langle\chi|S|\psi\rangle = \delta_{tt'} \delta_{t_3t'_3} \bar{S}_t. \quad (5.184)$$

Ovo je *Wigner-Eckart*-ova teorema u specijalnom slučaju skalarnog operatora S , a \bar{S}_t zove se redukovani matrični element. Wigner-Eckart-ovu teoremu ćemo koristiti i kasnije da bismo objasnili selekciona pravila u emisijom i apsorpcionim spektrima atoma. U slučaju raspada i rasejanja, izraz (5.184) nam daje koji su raspadi zabranjeni (oni za koje je $\langle\chi|S|\psi\rangle = 0$), a sem toga, i relativne odnose verovatnoća kada upoređujemo procese za koje je redukovani matrični element \bar{S}_t jednak. Pokažimo ovo na par primera.

Jednostavni eksperimentalni dokaz izospinske invarijantnosti je proces

$$d + d \rightarrow \text{He}^4 + \pi^0. \quad (5.185)$$

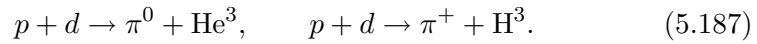
³Tabele sa navedenim vrednostima preuzete su iz udžbenika W. Greiner, B. Müller, *Quantum Mechanics, Symmetries*, Springer 1994, čiji je veliki deo posvećen unutrašnjim simetrijama.

⁴Ova definicija, videćemo kasnije u glavi o teoriji sudara, nije sasvim precizna.

Sa stanovišta zakona održanja naelektrisanja ovaj proces je dozvoljen; t_3 je takodje, za levu i desnu stranu ove reakcije jednako jer je jezgro helijuma izosinglet. Medjutim, ono što je u procesu narušeno je ukupni izospin t : oba deuteronu kao i He^4 su singleti, dok je pion π^0 deo tripleta pa ima $t = 1$. Zaista, u eksperimentu je ovaj proces veoma potisnut: ima efikasni presek $\sim 10^{-32}\text{cm}^2$, za šest redova veličine manji od tipičnih nuklearnih efikasnih preseka. Proces se realizuje preko elektromagnetne interakcije,



Kao drugi primer navešćemo sudar protona i deuteronu u kome se stvaraju pioni. Moguća su dva kanala za ovaj proces,



Već smo uveli sve potrebne talasne funkcije koje opisuju ove čestice tj. njihov izospinski deo. Deuteron je singlet; proton, He^3 i H^3 pripadaju dubletu, dok su pioni u izospinskom tripletu:

$$\begin{aligned} |d\rangle &= |0, 0\rangle & |p\rangle &= |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\text{He}^3\rangle &= |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle & |\text{H}^3\rangle &= |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |\pi^0\rangle &= |1, 0\rangle & |\pi^+\rangle &= -|1, 1\rangle. \end{aligned} \quad (5.188)$$

U ovom procesu je, vidimo na levoj strani, $t = 1/2$ i $t_3 = 1/2$; zato su kao rezultati raspada po Wigner-Eckart-ovoj teoremi moguća samo ona konačna stanja koja imaju iste vrednosti. Prvom kanalu raspada odgovara stanje

$$|\pi^0\rangle \otimes |\text{He}^3\rangle = |1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.189)$$

a drugom

$$-|\pi^+\rangle \otimes |\text{H}^3\rangle = |1, 1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.190)$$

Da bismo odredili vrednosti izospina u ovim stanjima, možemo da izračunamo

operatore izospina. Imamo

$$T_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

kao i

$$T_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Znači, multiplet izospina $t = 3/2$, tj. stanja koja su u ovom procesu zabranjena selekcionim pravilima, obrazovana su vektorima

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad T_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad T_-^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sqrt{2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Izospinski multiplet $t_3 = 1/2$, odnosno stanja koja se mogu realizovati u zatom sudaru, su ortogonalna na prethodna,

$$\begin{pmatrix} 0 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2} |\pi^+\rangle \otimes |H^3\rangle + |\pi^0\rangle \otimes |He^3\rangle, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.191)$$

Prvo stanje u (5.191) je ono koje tražimo, sa $t = 1/2$ i $t_3 = 1/2$, i predstavlja linearnu kombinaciju stanja koja odgovaraju traženim kanalima raspada. Vidimo da je relativna širina raspada u ova dva kanala, odnos verovatnoća

$$\frac{\sigma(p + d \rightarrow \pi^+ + H^3)}{\sigma(p + d \rightarrow \pi^0 + He^3)} = \frac{(\sqrt{2})^2}{1} = 2. \quad (5.192)$$

Ovaj rezultat se sa tačnošću od 10% vidi u eksperimentu.

5.9 ★ SO(4) I SIMETRIJE H-ATOMA

Analizirajući spektar energije i svojstvene funkcije sferno-simetričnih potencijala dobili smo radijalnu jednačinu (4.47) čije rešavanje daje moguće vrednosti energije ovakvih sistema. Kako jednačina zavisi od kvantnog broja momenta impulsa l , energije vezanih stanja će u principu zavisiti od l i kvantnog broja energije n , E_{nl} . Ovo odražava činjenicu da u sistemu imamo rotacionu simetriju,

$$[L_i, H] = 0, \quad (5.193)$$

pa celi multiplieti momenta impulsa $|l, m\rangle$ za fiksiranu vrednost l imaju istu energiju, odnosno spektar je degenerisan.

Medjutim, specijalno kod vodonikovog atoma energije ne zavise od l : imamo dodatnu degeneraciju spektra, koja se nekada zove i "slučajna". Uzrok ove degeneracije je postojanje dodatne simetrije hamiltonijana elektrona u Coulomb-ovom potencijalu, odnosno dodatnih opservabli koje su konstante kretanja. Veličina koja je održana bila je poznata još u vreme početaka klasične mehanike i zove se Laplace-Runge-Lenz-ov vektor. U kvantnoj mehanici njegove komponente su

$$A_i = \frac{1}{2m} \epsilon_{ijk} (p_j L_k + L_k p_j) - Ze^2 \frac{x_i}{r}, \quad (5.194)$$

u odnosu na klasični izraz u prvom članu proizvod p_j i L_k simetrizovan. Iste godine kada i Schrödinger, 1926, Pauli je odredio spektar energije elektrona u vodonikovom atomu čisto algebarski, koristeći njegovu dodatnu simetriju. I mi ćemo kratko proći kroz ovo izvodjenje.

Na osnovu definicije (5.194) mogu se lako pokazati dve osobine Laplace-Runge-Lenz-ovog vektora:

$$[A_i, H] = 0, \quad \vec{L} \cdot \vec{A} = 0. \quad (5.195)$$

Pošto su A_i , kao i L_i , konstante kretanja, one generišu dopunsku simetriju H-atoma. Da bismo odredili ukupnu simetriju treba da nadujemo odgovarajuću algebru tj. sve komutatore. Već znamo

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k, \quad (5.196)$$

a pošto je \vec{A} vektor, imamo i

$$[L_i, A_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} A_k. \quad (5.197)$$

Ostaje da se odredi komutator $[A_i, A_j]$; računom se dobija

$$[A_i, A_j] = -i\hbar \frac{2H}{m} \epsilon_{ijk} L_k. \quad (5.198)$$

Očigledno, ako levu stranu ove jednačine podelimo sa H , na desnoj strani će ostati komponente momenta impulsa L_i , generatori podalgebre rotacija. Uvodjenjem

$$A'_i = \frac{A_i}{\sqrt{-\frac{2H}{m}}} \quad (5.199)$$

u slučaju stanja *diskretnog spektra* odnosno negativnih svojstvenih vrednosti energije $E < 0$, iz (5.198) dobijamo

$$[A'_i, A'_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (5.200)$$

Za kontinualni deo spektra $E > 0$, ako definišemo

$$A'_i = \frac{A_i}{\sqrt{\frac{2H}{m}}} \quad (5.201)$$

imamo

$$[A'_i, A'_j] = -i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (5.202)$$

To znači da je u slučaju diskretnog spektra grupa simetrije $SO(4)$, a za kontinualni deo spektra, $SO(1, 3)$. Važi takodje

$$A^2 = Z^2 e^4 + \frac{2H}{m} (L^2 + \hbar^2). \quad (5.203)$$

Zadržaćemo se na stanjima diskretnog spektra. Grupa $SO(4)$ je direktni proizvod $SO(4) = SO(3) \otimes SO(3)$, a (medjusobno komutirajući) generatori faktor-grupa izražavaju se kao

$$M_i = \frac{1}{2} (L_i + A'_i), \quad N_i = \frac{1}{2} (L_i - A'_i), \quad [M_i, N_j] = 0. \quad (5.204)$$

Osim toga, u našem slučaju zbog $L_i A_i = 0$ imamo

$$4M^2 = 4N^2 = L^2 + A'^2 = L^2 - \frac{m}{2H} A^2. \quad (5.205)$$

Ireducibilne reprezentacije grupe $SO(4)$ se, u opštem slučaju, mogu prebrojati odnosno označiti kvantnim brojevima od M^2 i N^2 , (j_1, j_2) . Medjutim u reprezentacijama koje imamo kod H-atoma zbog (5.205) je $j_1 = j_2 = j$. Znači, svojstvena stanja možemo označiti sa $|j, m, j, m'\rangle$. Delujućim operatorom $4M^2$ na ovo stanje, iz (5.205) imamo

$$4\hbar^2 j(j+1) |j, m, j, m'\rangle = \left(L^2 - \frac{m}{2H} (Z^2 e^4 + \frac{2H}{m} (L^2 + \hbar^2)) \right) |j, m, j, m'\rangle,$$

odnosno

$$H |j, m, j, m'\rangle = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(2j+1)^2} |j, m, j, m'\rangle. \quad (5.206)$$

Ovde razume se prepoznajemo da je kvantni broj energije $n = 2j + 1$, a degeneracija nivoa $n^2 = (2j + 1)^2$.

5.10 IDENTIČNE ČESTICE

Identične čestice su one čestice kojima su sve unutrašnje karakteristike kao što su masa, spin, izospin, iste. Ipak u klasičnoj mehanici “čestice ne gube svoju individualnost”,⁵ tj. u principu mogu da se razlikuju: na primer kada opisujemo kretanje bilijskih kugli, svaku možemo da obojimo različitom bojom. U stvari, klasične čestice možemo da razlikujemo po trajektoriji, odnosno po položaju i brzini u određenom trenutku vremena. Za razliku od toga u kvantnoj mehanici trajektorija čestice se ne može odrediti jer važe relacije neodređenosti. Zato važi POSTULAT NERAZLIČIVOSTI, koji kaže da se IDENTIČNE ČESTICE NE MOGU NIKAKVIM MERENJEM RAZLIKOVATI. Ovaj postulat je dodatni, poslednji od postulata kvantne mehanike i da bismo ga preciznije formulisali treba da vidimo kako se on matematički izražava.

Označimo vektor stanja sistema N identičnih čestica sa

$$|1, \dots, k, \dots, l, \dots, N\rangle. \quad (5.207)$$

Ova oznaka je neprecizna jer u stvari samo prebrojava čestice po nekom unapred utvrđenom redosledu. Medjutim iz nje se vidi da, ako važi princip nerazličivosti, ovo stanje ne treba da se razlikuje od stanja koje se dobija proizvoljnom permutacijom čestica: odgovarajuća grupa simetrije je grupa permutacija N objekata, S_N . Najjednostavniji elementi ove grupe su transpozicije, koje predstavljaju zamenu dve čestice. Označimo sa P_{kl} zamenu čestice k i čestice l :

$$P_{kl} |1, \dots, k, \dots, l, \dots, N\rangle = |1, \dots, l, \dots, k, \dots, N\rangle. \quad (5.208)$$

Broj transpozicija u grupi S_N je $N(N-1)/2$, dok je ukupan broj permutacija $N!$; proizvoljnu permutaciju označavamo sa P . Očigledno, kad dva puta primenimo P_{kl} dobijamo početni raspored: $P_{kl}^2 = I$. Svaka permutacija se može razložiti na transpozicije ali ovo razlaganje nije jedinstveno; medjutim, parnost broja transpozicija je u svim razlaganjima ista. Ovaj broj definiše parnost permutacije P , $(-1)^P$.

Dinamički, da bi postulat identičnosti važio hamiltonijan sistema identičnih čestica mora da komutira sa svim permutacijama,

$$[P_{kl}, H] = 0, \quad P_{kl} H P_{kl} = H. \quad (5.209)$$

Hamiltonijan ne sme da se menja pri izmeni dve identične čestice, a operatori koji zadovoljavaju (5.209) zovu se simetrični operatori. Ako se ograničimo na dvočestične interakcije, hamiltonijan sistema identičnih čestica je oblika

$$H = \sum_k \frac{p_k^2}{2m} + \sum_k U(\vec{r}_k, s_k) + \sum_{kl} V(|\vec{r}_k - \vec{r}_l|) + \sum_{kl} \alpha \vec{s}_k \cdot \vec{s}_l + \dots \quad (5.210)$$

⁵L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* Addison-Wesley, 1958.

Medjutim postulat o nerazličivosti čestica definisan je na nivou koji prethodi dinamici, na kinematičkom nivou, te govori o osobinama prostora stanja identičnih čestica. Ima više načina da se implementira nerazličivost. Jedan je da podjemo od prostora stanja N različitih čestica, $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \mathcal{H}$, pa da nerazličivost nametnemo kao dodatni uslov. Drugi način je da prostor konstruišemo tako da su čestice nerazličive automatski odnosno po konstrukciji: takav prostor stanja naziva se *Fock-ov prostor* a postupak *druga kvantizacija*. Fock-ov prostor se koristi u kvantnoj teoriji polja jer, po konstrukciji, sadrži stanja koja mogu imati proizvoljan broj čestica (odnosno ekscitacija polja). Mi ćemo se zadržati na prvom pristupu, u skladu sa idejom da je u (nerelativističkoj) kvantnoj mehanici broj čestica fiksiran. Označimo sa

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_N, s_N) \quad (5.211)$$

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 njih. Operator izmene čestica k i l može se reprezentovati delovanjem na talasnu funkciju tako što menja mesto argumentima \vec{r}_k, s_k i \vec{r}_l, s_l :

$$P_{kl} \Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots) = \Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots).$$

Očigledno, P_{kl} je unitaran i $P_{kl}^2 = I$: to znači da su svojstvene vrednosti operatora izmene ± 1 . Princip nerazličivosti kaže da se stanja kod kojih su dve idenične čestice zamenjene merenjima ne mogu da razlikovati: drugim rečima, fizička stanja sistema identičnih čestica su svojstvena stanja operatora izmene P_{kl} ,

$$P_{kl} \Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots) = \pm \Psi(\vec{r}_1, s_1; \dots \vec{r}_k, s_k; \dots \vec{r}_l, s_l; \dots).$$

Pri tome, čestice iste vrste moraju da imaju istu vrednost faktora ± 1 , jer u suprotnom linearna kombinacija dva stanja ne bi bila dozvoljeno tj. fizičko stanje. Promena znaka talasne funkcije vezana za celobrojnost spina. Kod čestica celobrojnog spina, *bozona*, $P_{kl} \Psi_b = \Psi_b$, a kod *fermiona* odnosno čestica polucelog spina važi $P_{kl} \Psi_f = -\Psi_f$. Ovo svojstvo je u kvantnoj mehanici fenomenološka osobina, a zapravo je posledica specijalne teorije relativnosti i može se izvesti u kvantnoj teoriji polja.

Dakle, princip nerazličivosti kaže da sva stanja sistema više identičnih čestica pripadaju jednom (istom) od dva svojstvena potprostora operatora P_{kl} , što matematički znači da se tenzorski proizvod jednočestičnih prostora $\prod_{\otimes} \mathcal{H}$ projektuje na jedan od svoja dva potprostora koji opisuju fizički dozvoljena stanja. Relativno jednostavno se definišu projektori na ove potprostore, odnosno operatori koji simetrizuju ili antisimetrizuju talasnu funkciju: oni su dati su izrazima

$$S = \frac{1}{N!} \sum_P P, \quad A = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^p P. \quad (5.212)$$

S i A međusobno ortogonalni projektori što se lako može pokazati korišćenjem činjenice da je parnost proizvoda permutacija, zbir proizvod njihovih parnosti,

$$P'' = PP' \Rightarrow (-1)^{p''} = (-1)^{p+p'}, \quad (5.213)$$

kao i da permutacije čine grupu.

Proanalizirajmo uvedene pojmove u najjednostavnijem slučaju dve čestice koje su u stanjima ψ i φ . Ako su čestice različite, stanje kompozitnog sistema može biti opisano talasnom funkcijom $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2)$; međutim ako su čestice identične, Ψ nije fizičko stanje jer se menja pri delovanju operatora izmene,

$$P_{12}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = P_{12}\psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2)\varphi(\vec{r}_1). \quad (5.214)$$

Zapravo, zavisno od toga da li su čestice bozoni ili fermioni imamo dve mogućnosti da opišemo ovaj sistem

$$\Psi_b(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2)\varphi(\vec{r}_1)), \quad (5.215)$$

ili

$$\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2)\varphi(\vec{r}_1)). \quad (5.216)$$

Konstanta normiranja je $1/\sqrt{2}$ kada su funkcije ψ i φ međusobno ortogonalne. Gornji izrazi mogu se dobiti iz početne talasne funkcije $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ delovanjem operatora simetrizacije S odnosno antisimetrizacije A :

$$S = \frac{1}{2}(I + P_{12}), \quad A = \frac{1}{2}(I - P_{12}). \quad (5.217)$$

Lako se vidi se da se u opštem slučaju fermionska talasna funkcija, pošto je antisimetrična, može napisati kao determinanta (*Slater-ova determinanta*)

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (5.218)$$

Isto tako jasno je da, ako su dva od stanja ψ_1, \dots, ψ_N ista, fermionska talasna funkcija je identički jednaka nuli. Ovo se naziva *Pauli-jev princip isključenja*: dva identična fermiona ne mogu biti u istom kvantnom stanju.

Fizički efekti principa nerazličivosti brojni i važni. U nekim slučajevima čisto kinematički efekti simetrizacije ili antisimetrizacije talasne funkcije mogu se interpretirati kao dinamika: tada govorimo o *izmenskoj interakciji*. Kao prvi primer izmenske interakcije razmotrićemo stanja dve čestice bez spina. Uzmimo da su, zbog jednostavnosti, čestice u stanjima opisanim talasnim funkcijama ψ i φ koje su međusobno ortogonalne, normirane i,

na primer parne. Izračunajmo verovatnoću da su obe čestice lokalizovane u potprostoru $z > 0$. Ako su čestice različite, videli smo, njihova talasna funkcija je

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1) \varphi(\vec{r}_2), \quad (5.219)$$

pa je tražena verovatnoća

$$\int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} |\Psi|^2 dV_1 dV_2 = \int_{z_1 > 0} |\psi|^2 dV_1 \int_{z_2 > 0} |\varphi|^2 dV_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4},$$

zbog osobine parnosti talasnih funkcija. Ako su čestice bozoni, njihova talasna funkcija je

$$\Psi_b(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) + \varphi(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_2)). \quad (5.220)$$

Zato se za traženu verovatnoću dobija

$$\int_{z_1 > 0} \int_{z_2 > 0} |\Psi_b|^2 dV_1 dV_2 = \frac{1}{4} + S^*S, \quad (5.221)$$

gde je S integral izmene,

$$S = \int_{z > 0} \psi^*(\vec{r})\varphi(\vec{r})dV. \quad (5.222)$$

Lako se vidi da je u slučaju fermionske talasne funkcije

$$\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) - \varphi(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_2)) \quad (5.223)$$

rezultat $\frac{1}{4} - S^*S$. Znači dobili smo verovatnoća da se dva identična bozona odnosno čestice koje imaju simetričnu talasnu funkciju lokalizuju u istom delu prostora veća je nego kada su čestice različite; u slučaju antisimetrične talasne funkcije, verovatnoća je manja: kao da se bozoni efektivno privlače a fermioni efektivno odbijaju. Razume se, ovo nije posledica nikakve realne interakcije ni interakcionog hamiltonijana: efekat je čisto kinematički. Iz formula koje smo dobili možemo i da zaključimo da su efekti simetrizacije i antisimetrizacije talasne funkcije praktično zanemarljivi ako je integral preklapanja mali, na primer ako su čestice veoma daleko: tada se postulat o identičnim česticama za većinu praktičnih računa može zanemariti.

Kao drugi primer izmenske interakcije navešćemo sistem dva elektrona. Ako su elektroni van magnetnog polja i kreću se nerelativistički, odgovarajući hamiltonijan i Schrödinger-ova jednačina ne zavise od spina pa su svojstvene funkcije energije proizvodi spinske i orbitne talasne funkcije,

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1; \vec{r}_2, s_2) = \chi(s_1, s_2) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (5.224)$$

Operator izmene deluje nezavisno na χ i ψ pa svaka od ovih funkcija mora biti svojstvena za P_{12} . Pošto su u pitanju dva elektrona, to znači da ako je spinska funkcija antisimetrična, orbitna je simetrična i obrnuto. Najniže svojstvene funkcije energije su oblika

$$\psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes |s = 0, m_s = 0\rangle, \quad (5.225)$$

$$\psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes |s = 1, m_s = 0, \pm 1\rangle \quad (5.226)$$

gde su ψ_p i ψ_n simetrična i antisimetrična funkcija, jer je spinsko stanje $|s = 0, m_s = 0\rangle$ antisimetrično a stanja $|s = 1, m_s\rangle$ su simetrična. Tako da mada spin ne figuriše eksplicitno u hamiltonijanu, vrednosti energije od njega zavise posredno, preko antisimetrizacije ukupne talasne funkcije. Na osnovu ovih zaključaka možemo da analiziramo svojstvena stanja atoma helijuma, koji ima dva elektrona. Pretpostavljajući da je jezgro nepokretno, njegov hamiltonijan je

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (5.227)$$

gde je $Z = 2$. Ako u prvoj aproksimaciji zanemarimo elektrostatičku interakciju elektrona, vidimo da je hamiltonijan zbir dva nezavisna hamiltonijana za elektrone u vodoniku-sličnom atomu čija svojstvena stanja možemo da označimo sa $|nlm\rangle \otimes |m_s\rangle$. Na osnovu prethodne diskusije o identičnim elektronima dobijamo da je osnovno stanje nedegenerisano, opisano talasnom funkcijom

$$|100\rangle_1 \otimes |100\rangle_2 \otimes |s = 0, m_s = 0\rangle, \quad (5.228)$$

jer se prostorni deo talasne funkcije može samo simetrizovati, pošto su osnovna stanja identična. Ima 16 stanja koja odgovaraju, aproksimativno gledano, sledećem, prvom pobudjenom nivou energije; to su

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|100\rangle_1 \otimes |2lm\rangle_2 + |2lm\rangle_1 \otimes |100\rangle_2 \right) \otimes |s = 0, m_s = 0\rangle,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|100\rangle_1 \otimes |2lm\rangle_2 - |2lm\rangle_1 \otimes |100\rangle_2 \right) \otimes |s = 1, m_s = 0, \pm 1\rangle.$$

Stanja helijuma u kojima je ukupni elektronski spin $s = 0$ nazivaju se parahelijum, a ona sa $s = 1$, ortohelijum. Uračunavanjem dodatne potencijalne energije interakcije dva elektrona V_{12} , na primer perturbativnim računom, dobija se da stanja ortohelijuma imaju nižu energiju od stanja parahelijuma, pa je prvi pobudjeni nivo zapravo razdvojen na četiri.

Istorijski prva i izuzetno važna primena Pauli-jevog principa bilo je objašnjenje periodnog sistema elemenata. Videli smo da stanja elektrona u Coulomb-ovom polju jezgra zavise od kvantnih brojeva $|nlm_l m_s\rangle$ a energija, pošto je potencijal oblika $1/r$, zavisi samo od n . Degeneracija po energiji je

prema tome $2n^2$, a stanja, po rastućoj vrednosti energije u vodoniku sličnim atomima obeležavamo kao

$$\begin{array}{l} 1s \\ 2s \ 2p \\ 3s \ 3p \ 3d \\ 4s \ 4p \ 4d \ 4f \\ \dots \end{array}$$

U najgrubljim crtama, ova šema energetske nivoa i Pauli-jev princip objašnjavaju periodni sistem elemenata. Pošto su elektroni fermioni, dva elektrona ne mogu da budu u istom stanju pa se pri “gradjenju” atoma sve višeg atomskog broja redom popunjavaju viši energetske nivoi. Energetski nepovoljnije konfiguracije odnosno najstabilniji su atomi koji imaju popunjene cele *ljuske*, tj. sva stanja za fiksiran vrednost energije E_n . Sa druge strane, hemijske osobine atoma opisane su u najvećoj meri stanjima elektrona najviše energije koji su po pravilu “spolja”, tj. imaju najveće očekivane vrednosti radijusa $\langle r \rangle$ i najmanje energije vezivanja, i zbog toga oni dominantno interaguju sa drugim atomima ili jonima.

Znači, vrednosti n definišu periode u periodnom sistemu. U prvoj periodu su vodonik i helijum. Osim He, elementi koji imaju popunjene ljuske su ostali *inertni gasovi*: Ne, Ar, Kr, Xe. Elementi koji imaju po 1 ili 2 elektrona viška u odnosu na popunjene ljuske su metali jer lako “gube” elektrone. Prvu grupu u periodnom sistemu čine *alkalni metali*, Li, Na, K, Rb, Cs, a drugu, *alkalne zemlje*, Be, Mg, Ca, Str itd. Elementi koji imaju manjak od 1 elektrona takodje su veoma reaktivni ali nemetali – to su *halogeni elementi*, F, Cl, Br, I.

Iz malo detaljnijeg pregleda treće periode vidimo da pravi redosled stanja energije u atomima nije isti kao onaj dat gore za vodonikov atom. U višeelektronskom atomu osim interakcije sa jezgrom elektroni interaguju i međusobno, i to elektronsko odbijanje nije zanemarljivo. U najjednostavnijoj, jednočestičnoj (Hartree-jevoj) aproksimaciji ono se može predstaviti kao efektivni ekranirajući elektrostatički potencijal koji je zbirni potencijal jezgra i “oblaka” svih ostalih elektrona. Možemo uzeti Yukawa-in potencijal

$$U'(r) = -\frac{Ze}{r} e^{-\alpha r}, \quad \text{ili} \quad U''(r) = -\frac{Z(r)e}{r}, \quad (5.229)$$

gde se efektivno naelektrisanje modeluje na neki način uz na primer uslove $Z(r) \rightarrow 1$ za malo r i $Z(r) \rightarrow Z - 1$ za veliko r . U slučaju nekulonovskih potencijala degeneracija energije po l se uklanja i dobijamo sledeći redosled stanja po energiji,

$$\begin{array}{l} 1s \\ 2s \ 2p \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 3s \ 3p \\
 4s \ 3d \ 4p \\
 5s \ 4d \ 5p \\
 6s \ 4f \ 5d \ 6p \\
 7s \ 5f \ 7p \ 6d
 \end{array}$$

Posle nobelijuma koji ima $Z = 102$ jezgra usled odbijajuće Coulomb-ove interakcije protona postaju nestabilna pa tih elemenata nema u prirodi. Interesantno je još zapaziti položaj $4f$ i $5f$ stanja, koja imaju male “poluprečnike orbita” odnosno očekivane vrednosti $\langle r \rangle$ su im manje od odgovarajućih vrednosti za $6s$ i $7s$ stanja. Pošto su svi f -elektroni unutra, popunjavanje ovih stanja skoro uopšte ne menja hemijske osobine pa su svih 14 elemenata od od La ($Z = 57$) do Yb ($Z = 70$), *lantanidi*, vrlo slični. Analogno je sa *aktinidima*, elementima od Ac ($Z = 89$) do No ($Z = 102$).

Model ljuski daje, u nekoj meri, i objašnjenje stabilnosti jezgara. Kada se posmatraju nuklearni raspadovi vidi se da postoje jezgra koja su posebno stabilna, tzv *magična jezgra*: He^2 , O^{16} , Ca^{40} . Odgovarajući brojevi protona, 2, 8, 20, 28, 50, nazivaju se magični brojevi. Objašnjenje stabilnosti magičnih jezgara je slično objašnjenju stabilnosti inertnih gasova: ova jezgra imaju popunjene ljuske. Medjutim, za razliku od čestica koje čine atom, unutar jezgra nemamo masivni centar i lake elektrone: svi nukleoni su približno iste mase. Zato, ako usrednjenu interakciju svih nukleona prikažemo u Hartree-jevoj aproksimaciji kao jednočestični potencijal $U(r)$, za mala međusobna rastojanja imamo približno

$$U(r) = U_0 + \frac{1}{2} m_p \omega^2 r^2. \quad (5.230)$$

Naravno potencijal u principu zavisi i od drugih parametara, spina, izospina itd. Prva tri energetska nivoa trodimenzionog izotropnog harmonijskog oscilatora imaju, kad se uključe dve moguće vrednosti spina, degeneracije 2, 6, 12, a redosled nivoa energije je u spektroskopskim oznakama

$$\begin{array}{l}
 1s \\
 2s \ 2p \\
 3s \ 3p \ 3d \\
 \dots
 \end{array}$$

Prva popunjena ljuska ima 2 stanja, druga 8, treća 20 stanja, i to objašnjava prva tri magična broja. Za razumevanje stabilnosti ostalih magičnih jezgara potrebno je detaljnije poznavati i analizirati druge interakcije između nukleona u jezgru.

5.11 DODATAK

5.11.1 TEORIJA GRUPA

Transformacije prostora uvek imaju matematičku strukturu *grupe*: grupu ćemo označavati sa G a njene elemente sa g_i ili g_a . Ova struktura ima osobine koje intuitivno očekujemo od “prelaza” iz jednog i drugi koordinatni ili inercijalni sistem, naime:

- 1) primena dve uzastopne transformacije može se prikazati kao treća, ekvivalentna transformacija (tehnički, zatvorenost grupnog množenja: za svako $g_1, g_2 \in G$, postoji $g_3 = g_1 g_2 \in G$). Uzastopnu primenu transformacija g_1 i g_2 pišemo kao množenje, $g_1 g_2$.
- 2) u grupi postoji identična transformacija koja ne menja koordinatni sistem (jedinčni element koji ćemo označavati sa 1 ili I : za svako $g \in G$, $Ig = gI = g$.)
- 3) svaka transformacija ima inverznu kojom se možemo vratiti u početni koordinatni sistem (za svako $g \in G$ postoji $g^{-1} \in G$, $gg^{-1} = g^{-1}g = 1$)
- 4) asocijativnost: pri množenju, transformacije se mogu proizvoljno grupisati po dve, odnosno važi $g_1(g_2 g_3) = (g_1 g_2)g_3$.

Redosled množenja u grupi je u principu bitan odnosno množenje ne mora da bude komutativno, $g_1 g_2 \neq g_2 g_1$. Sa druge strane, pretpostavka asocijativnosti znači da se elementi grupe mogu prikazati kao matrice ili kao operatori. Broj elemenata može biti konačan ali i beskonačan: u fizici je veoma važan slučaj kad elementi grupe pripadaju nekoj mnogostrukosti, odnosno kada se mogu parametrizovati realnim brojevima a_i , $i = 1, 2, \dots, n$ koji uzimaju vrednosti u nekom delu prostora \mathbb{R}^n . Preciznije, za grupu se kaže da je Lie-jeva ako je oblast promene parametara analitička mnogostrukost, a preslikavanja $g_1 g_2 \rightarrow g_3$ i $g \rightarrow g^{-1}$ analitička preslikavanja. Za Lie-jeve grupe važi da se njihovi elementi mogu prikazati u eksponencijalnom obliku

$$g_a = e^{-i \sum a_i T_i} \quad (5.231)$$

T_i su generatori grupe. Generatori opisuju dejstvo transformacija bliskih identičnoj (elemente grupe u okolini jedinice), jer za infinitezimalne vrednosti parametara možemo pisati

$$g_a = 1 - \sum a_i T_i, \quad (5.232)$$

zadržavajući se na prva dva člana u razvoju eksponenta u Taylor-ov red. Drugim rečima,

$$T_i = i \left(\frac{\partial g_a}{\partial a_i} \right)_{a_i=0}. \quad (5.233)$$

Generatori grupe čine Lie-jevu algebru. Osnovna relacija u algebri

$$[T_i, T_j] = \sum_k i f^k_{ij} T_k, \quad (5.234)$$

odnosno vrednosti strukturnih konstanti f^k_{ij} slede iz zakona množenja u grupi.

5.11.2 CARTAN-WEYL-OV BAZIS

ili standardna forma poluprostih Lie-jevih algebri.

Rang r Lie-jeve algebre je je dimenzija njene maksimalne Abelove podalgebre; odgovarajući generatori se označavaju sa H_i , $i = 1, \dots, r$. Komutacione relacije izmedju generatora mogu da se napišu u standardnoj formi

$$\begin{aligned} [H_i, H_k] &= 0, \\ [H_i, E_\alpha] &= \alpha_i E_\alpha, \end{aligned} \quad (5.235)$$

$$\begin{aligned} [E_\alpha, E_\beta] &= N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta}, \quad \alpha + \beta \neq 0 \\ [E_\alpha, E_{-\alpha}] &= \alpha_i H_i. \end{aligned} \quad (5.236)$$

5.12 ZADACI

1. Pokazati da 4×4 matrice oblika kao u jednačini (5.28) čine grupu i naći zakon množenja.

2. Pokazati da u impulsnoj reprezentaciji parnost deluje kao

$$\Pi \tilde{\psi}(p) = \tilde{\psi}(-p). \quad (5.237)$$

(Podje se od $\langle p | \Pi | \psi \rangle$ i transformiše, koristeći $\langle p | -x \rangle = \langle -p | x \rangle$.)

3. Ako je potencijalna energija u 1d parna funkcija, svojstvene funkcije vezanih stanja su ili parne ili neparne; objasniti

4. Odrediti parnost sfernog harmonika Y_l^m . Prethodno, odrediti kako se pri operaciji inverzije prostora $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ transformišu sferne koordinate r , θ , φ .

(To je ovako: $r \rightarrow r$, $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\varphi \rightarrow \pi + \varphi$ tako da

$$\psi(r, \theta, \varphi) \rightarrow \psi(r, \pi - \theta, \pi + \varphi), \quad (5.238)$$

$$e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^m e^{im\varphi}, \quad P_l^m(\cos \theta) \rightarrow P_l^m(-\cos \theta) = (-1)^{(l+|m|)} P_l^m(\cos \theta) \quad (5.239)$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \rightarrow Y_l^m(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (5.240)$$

5. Probati, rešavanjem jednačina

$$\Pi x \Pi = -x, \quad \Pi p \Pi = -p \quad (5.241)$$

da se odredi operator parnosti Π . Hint: dobar anzac je oblika

$$U^{-1}(\alpha, \beta) = e^{iM}, \quad M = \alpha(x^2 + \beta^2 p^2) \quad (5.242)$$

(pokazuje se da je

$$U^{-1}xU = \cos(2\hbar\alpha\beta)x + \sin(2\hbar\alpha\beta)\beta p \quad (5.243)$$

tako da za $2\hbar\alpha\beta = \pi$ dobijamo parnost. Ova reprezentacija je dvoznačna, $U^2 \neq I$ mada je U unitaran. Ako uzmemo

$$\alpha = \frac{m\omega\pi}{2\hbar}, \quad \beta^2 = \frac{\pi}{2m\hbar\omega} \quad (5.244)$$

vidimo da je

$$U^{-1} = e^{\frac{i\pi}{\hbar\omega}H} \quad (5.245)$$

gde je H hamiltonijan harmonijskog oscilatora. Na elemente HO bazisa

$$U^2|n\rangle = e^{-2i\pi(n+\frac{1}{2})} = -|n\rangle, \quad U^4|n\rangle = |n\rangle \quad (5.246)$$

pa je zato $U^4 = I$ za sva stanja.)

6. Pokazati da je hamiltonijan izolovanog sistema n interagujućih čestica

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i \neq k} V_{ik}(\vec{r}_i - \vec{r}_k) \quad (5.247)$$

invarijantan na translacije, tj. pokazati da se ukupni impuls ovog sistema održava.

7. Po analogiji sa izvođenjem IR za grupu rotacija $SO(3)$ izvesti dobiti ireducibilne reprezentacije za $SO(2, 1)$, rotacije trodimenzionog prostora Minkowskog koje održavaju normu vektora $x_\mu x^\mu = (x_1)^2 + (x_2)^2 - (x_3)^2$. Osnovne komutacione relacije u ovoj grupi su

$$[M_1, M_2] = -iM_3, \quad [M_2, M_3] = iM_1, \quad [M_3, M_1] = iM_2 \quad (5.248)$$

ili ako definišemo

$$M_\pm = iM_1 \mp M_2, \quad M^2 = (M_1)^2 + (M_2)^2 - (M_3)^2 \quad (5.249)$$

relacije su

$$[M_3, M_\pm] = \pm M_\pm, \quad [M_+, M_-] = 2M_3 \quad (5.250)$$

8. Diskusija iz uvoda u Sakurai - snop elektrona prolazi kroz dva SG aparata (s_z i s_y); kroz tri SG aparata (s_z, s_y, s_z): izračunati verovatnoće

9. Odrediti operator koji reprezentuje rotaciju za ugao α oko ose \vec{n} u spinskom prostoru, $e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{n}\cdot\vec{s}}$. Koja matrica odgovara rotaciji za 2π ? za 4π ?

10. Schwinger-ova reprezentacija ugaonog momenta: Imamo dva para operatora kreacije i anihilacije $a_i, i = 1, 2$

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = 0, \quad [a_i^\dagger a_j, a_j^\dagger] = 0. \quad (5.251)$$

Pomoću a_i mogu se definisati sledeći operatori

$$N_1 = a_1^\dagger a_1, \quad N_2 = a_2^\dagger a_2, \quad N = N_1 + N_2, \quad (5.252)$$

kao i

$$J_z = \frac{\hbar}{2} (a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2), \quad J_+ = \hbar a_1^\dagger a_2, \quad J_- = \hbar a_2^\dagger a_1. \quad (5.253)$$

Pokazati da operatori J_i zadovoljavaju algebru ugaonog momenta, kao i da važi

$$J^2 = \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \hbar^2. \quad (5.254)$$

Ako svojstvena stanja operatora N_i definišemo na uobičajeni način,

$$a_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle, \quad a_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \quad (5.255)$$

možemo da identifikujemo

$$|j, m\rangle = |n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle, \quad j = \frac{n_1 + n_2}{2}, \quad m = \frac{n_1 - n_2}{2}. \quad (5.256)$$

11. Naći relativne širine raspada $\Delta \rightarrow \pi + N$, odnosno

$$\begin{aligned} \Delta^- &\rightarrow \pi^- + n, & \Delta^0 &\rightarrow \pi^0 + n, & \Delta^0 &\rightarrow \pi^- + p, \\ \Delta^+ &\rightarrow \pi^+ + n, & \Delta^+ &\rightarrow \pi^0 + p, & \Delta^{++} &\rightarrow \pi^+ + p. \end{aligned}$$

GLAVA 6

KOVARIJANTNOST SCHRÖDINGER-OVE JEDNAČINE

Kovarijantnost fizičkog zakona ili jednačine znači da jednačina izgleda isto u različitim referentnim sistemima, odnosno da postoji transformacija koja svako rešenje dobijeno u jednom sistemu reference jednoznačno preslikava u odgovarajuće rešenje u drugom sistemu reference. Grupa takvih transformacija predstavlja grupu simetrije fizičkog zakona. Da bismo dokazali kovarijantnost neke jednačine dovoljno je da odredimo reprezentaciju (ili pokažemo da postoji) po kojoj se fizičke veličine koje figurišu u jednačini transformišu: u kvantnoj mehanici to je pre svega talasna funkcija. Prema tome, nalaženjem operatora translacija, rotacija i parnosti mi smo u prethodnoj glavi pokazali da je Schrödinger-ova jednačina kovarijantna na ove transformacije. Da preciziramo ovaj iskaz, označimo pomenute transformacije sa g , a njihovu kvantnomehaničku reprezentaciju sa $U(g)$:

$$g : \vec{r}, t, \vec{p} \rightarrow \vec{r}', t, \vec{p}' , \quad U(g) : |\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle. \quad (6.1)$$

U polaznom koordinatnom sistemu Schrödinger-ova jednačina glasi

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H|\Psi\rangle, \quad (6.2)$$

a u transformisanom,

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi'\rangle}{\partial t} = H'|\Psi'\rangle. \quad (6.3)$$

Ove dve jednačine su ekvivalentne jer se druga dobija iz prve množenjem sa $U(g)$ (koji je unitaran, i prema tome nesingularan), pri čemu se koristi da je

$$U H |\Psi\rangle = U H U^{-1} U |\Psi\rangle = H' |\Psi'\rangle. \quad (6.4)$$

U narednim poglavljima analiziraćemo kovarijantnost Schrödinger-ove jednačine na inverziju vremena, Galilei-jeve transformacije i gradijentne transformacije elektrodinamike.

6.1 GALILEI-JEVE TRANSFORMACIJE

Pre nego što predjemo na specijalne Galilei-jeve transformacije odredićemo kako se realizuju druge dve vrste transformacija koje sadrže vreme. Prva je *translacija vremena*,

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r}, \quad t \rightarrow t' = t + b. \quad (6.5)$$

Ako zakon transformacije (5.29) po kome se talasna funkcija transformiše kao skalarno polje uopštimo i na vremensku koordinatu,

$$\Psi'(\vec{r}', t') = \Psi(\vec{r}, t), \quad (6.6)$$

i vremensku translaciju označimo sa $U(b) = e^{-i\tau b}$, dobijamo

$$U(b)\Psi(\vec{r}, t) = \Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t - b) = e^{\frac{i}{\hbar}Hb} \Psi(\vec{r}, t). \quad (6.7)$$

Generator vremenske translacije τ proporcionalan je hamiltonijanu,

$$\hbar\tau = -H. \quad (6.8)$$

Ovaj generator nije kinematička veličina već zavisi od konkretnog sistema tj. od njegovog hamiltonijana: translacija u vremenu je evolucija sistema. Ovaj rezultat dalje, upućuje na analogiju vremenske i prostornih koordinata t i \vec{r} , odnosno E i \vec{p} , koja će se realizovati u relativističkoj kvantnoj mehanici kao Lorentz-ova kovarijantnost: sve četiri komponente četvorimpulsa p_μ reprezentovane su, u koordinatnoj reprezentaciji, sa $i\partial_\mu$ (pri čemu je uzeto da je signatura metrike Minkowskog (1,-1,-1,-1)).

Vremenska inverzija definiše se sa

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r}, \quad t \rightarrow t' = -t. \quad (6.9)$$

Relativno jednostavno se vidi da odgovarajuća kvantnomehanička transformacija T ne može da bude unitarni operator: ako bi bila unitarna i zadovoljavala, za recimo x -komponentu,

$$x' = T^{-1}xT = x, \quad p'_x = T^{-1}p_xT = -p_x \quad (6.10)$$

kao u klasičnoj mehanici, računajući kanonski komutator dobili bismo kontradikciju:

$$[x', p'_x] = \begin{cases} [T^{-1}xT, T^{-1}p_xT] = -i\hbar \\ T^{-1}[x, p_x]T = T^{-1}i\hbar T = i\hbar. \end{cases} \quad (6.11)$$

Odavde vidimo da, ako bi T bio antiunitaran odnosno kompleksno konjugovao i u poslednjem koraku, komutator bi bio u redu. Vremenska inverzija reprezentuje se sa

$$\Psi'(\vec{r}', t') = \Psi^*(\vec{r}, t), \quad (6.12)$$

odnosno

$$T\Psi(\vec{r}, t) = \Psi'(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}, -t). \quad (6.13)$$

Lako se vidi da je Schrödinger-ova jednačina

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r}, t) \quad (6.14)$$

kovarijantna na ovu transformaciju, odnosno ekvivalentna sa

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(\vec{r}', t')}{\partial t'} = H'\Psi(\vec{r}', t'). \quad (6.15)$$

Imamo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(\vec{r}', t')}{\partial t'} = -i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\Psi^*(\vec{r}, t) = H\Psi'(\vec{r}', t') \quad (6.16)$$

ako je H hermitski operator odnosno realna funkcija, što je slučaj u odsustvu magnetnog polja odnosno kada je $\vec{A} = 0$: onda, $H' = H$. Ranije smo komentarisali da se disipacija može formalno uključiti u Schrödinger-ovu jednačinu uvođenjem kompleksnog potencijala: jasno je da u tom slučaju inverzija vremena nije, i ne treba da bude, simetrija Schrödinger-ove jednačine.

U Galilei-jevu grupu osim rotacija i translacija spadaju *specijalne Galilei-jeve transformacije* ili, kako ih zovemo u relativističkom slučaju, bustovi. Bustovi opisuju transformaciju iz inercijalnog sistema koji miruje u drugi inercijalni sistem koji se kreće konstantnom brzinom \vec{v} . Mi ćemo se ovde zadržati na bustovima u jednoj dimenziji: uopštenje na tri dimenzije je pravolinijsko. Specijalne Galilei-jeve transformacije su

$$x \rightarrow x' = x - vt, \quad t \rightarrow t' = t, \quad p \rightarrow p' = p - mv. \quad (6.17)$$

Ispostavlja se da, da bi se ova transformacija realizovala u kvantnoj mehanici, zakon transformacije talasne funkcije mora da se uopšti: pretpostavićemo da on sadrži dodatni fazni faktor odnosno da imamo projektivnu reprezentaciju,¹

$$\Psi'(x', t') = e^{if(x,t)} \Psi(x, t). \quad (6.18)$$

Kovarijantnost znači da, ako je Ψ rešenje Schrödinger-ove jednačine

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t), \quad (6.19)$$

onda je Ψ' rešenje od

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(x', t')}{\partial t'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi'(x', t')}{\partial x'^2} + V'(x') \Psi'(x', t'). \quad (6.20)$$

¹J. Lévy-Leblond, Commun. Math. Phys. **6** (1967) 286

Vidi se da će principu transformacija zavisiti od oblika potencijala V , odnosno od hamiltonijana H : to nije neobično pošto se radi o transformaciji koja zavisi od vremena. Problem nije jednostavniji ni ako tražimo operatorski ekvivalent transformacije (6.17), jer zbog eksplicitne zavisnosti busta $U(v)$ od vremena te jednačine treba da se rešavaju u Heisenberg-ovoj slici,

$$U^{-1}(v)x_H U(v) = x_H - vt, \quad U^{-1}(v)p_H U(v) = p_H - mv, \quad (6.21)$$

pa opet imamo eksplicitnu zavisnost od hamiltonijana. Zato ćemo da se zadržimo samo na najjednostavnijem slučaju slobodne čestice, $V = 0$. Iz (6.17) imamo

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x}. \quad (6.22)$$

Zamenjujući ove izraze i pretpostavljeni oblik transformacije (6.18) u Schrödinger-ovu jednačinu (6.20), dobijamo

$$i \frac{\partial f}{\partial t} \Psi + iv \frac{\partial f}{\partial x} \Psi + v \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i\hbar}{2m} \left(- \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)^2 \Psi + 2i \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Psi \right). \quad (6.23)$$

Pošto je $\Psi(x, t)$ proizvoljna funkcija, poslednja jednakost nam daje uslove na fazni faktor $f(x, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{mv}{\hbar}, \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{mv^2}{2\hbar}. \quad (6.24)$$

Rešenje ovih jednačina je

$$f(x, t) = -\frac{mv}{\hbar} x + \frac{mv^2}{2\hbar} t. \quad (6.25)$$

Proverićemo još zakon množenja, odnosno kompoziciju dva busta. Imamo

$$\Psi'(x, t) = e^{if(x+v_1t, t)} \Psi(x + v_1t, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} (mv_1x + \frac{1}{2}mv_1^2x)} \Psi(x + v_1t, t),$$

$$\Psi''(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} (mv_2x + \frac{1}{2}mv_2^2x)} \Psi'(x + v_2t, t),$$

pa je zato

$$\Psi''(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} (m(v_1+v_2)x + \frac{1}{2}m(v_1+v_2)^2x)} \Psi(x + (v_1 + v_2)t, t). \quad (6.26)$$

6.2 FAZNE TRANSFORMACIJE

Na kraju, dokažimo kovarijantnost Schrödinger-ove jednačine pri gradijentnim transformacijama elektromagnetnih potencijala. Mi smo zapravo ovu osobinu već koristili pri rešavanju kretanja elektrona u Coulomb-ovom i magnetnim poljima, jer smo u svakom od tih problema izabrali određeni gejdž

za potencijale pretpostavljajući da je to na neki način “u redu”: sada ćemo kovarijantnost i da eksplicitno pokažemo.

Električno i magnetno polje mogu se, u skladu sa Maxwell-ovim jednačinama, preko elektromagnetnih potencijala mogu izraziti kao

$$\vec{E} = -\text{grad } \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A}. \quad (6.27)$$

Medjutim pošto su polja izvodi potencijala, postoji nejednoznačnost odnosno sloboda u izboru Φ i \vec{A} : pri transformacijama

$$\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi + \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - c \text{grad } \chi, \quad (6.28)$$

polja \vec{E} i \vec{B} se ne menjaju; $\chi(\vec{r}, t)$ može biti proizvoljna funkcija. Ove transformacije zovu se gradijentne, ili gejdž transformacije. Klasične jednačine kretanja, kako za elektromagnetno polje tako i za naelektrisanu česticu, ne menjaju se pri (6.28) i zato ove transformacije predstavljaju simetriju klasične teorije. Vidi se dalje da je simetrija *unutrašnja*, jer se pri njoj ne menjaju koordinate \vec{r} , t . Medjutim, za razliku od izospina, funkcija $\chi(\vec{r}, t)$ koja definiše transformacije simetrije zavisi od koordinata i vremena pa kažemo da je simetrija *lokalna*.

Znači, pitanje je da li gradijentne transformacije predstavljaju simetriju Schrödinger-ove jednačine, odnosno da li u kvantnoj mehanici možemo slobodno da fiksiramo gejdž uslov. Drugim rečima da li se za transformaciju (6.28) može definisati preslikavanje $\Psi \rightarrow \Psi'$, takvo da su Schrödinger-ove jednačine

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 \Psi + e\Phi \Psi, \quad (6.29)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}')^2 \Psi' + e\Phi' \Psi' \quad (6.30)$$

ekvivalentne? Pretpostavimo da ova transformacija talasne funkcije oblika

$$\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi'(\vec{r}, t) = e^{if(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t). \quad (6.31)$$

Zamenjujući Ψ' u (6.30), malo dužim ali pravolinijskim računom dobijamo da nepoznata funkcija $f(\vec{r}, t)$ mora da zadovoljava uslov

$$\begin{aligned} -2m(\hbar \frac{\partial f}{\partial t} + e \frac{\partial \chi}{\partial t}) \Psi = & \left(\nabla(\hbar f + e\chi) \cdot (-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} + \nabla(\hbar f + e\chi)) \right. \\ & \left. + (-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}) \cdot \nabla(\hbar f + e\chi) \right) \Psi \end{aligned}$$

za proizvoljno $\Psi(\vec{r}, t)$. Ovo je očigledno ispunjeno za

$$f(\vec{r}, t) = -\frac{e}{\hbar} \chi(\vec{r}, t), \quad (6.32)$$

odnosno nova talasna funkcija $\Psi'(\vec{r}, t)$ dobija se iz stare *faznom transformacijom*

$$\Psi'(\vec{r}, t) = e^{-i \frac{e}{\hbar} \chi(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t). \quad (6.33)$$

Lako se može proveriti da se pri ovoj transformaciji ni gustina ni fluks verovatnoće (4.91) ne menjaju.

Po svojoj strukturi, grupa simetrije pri gradijentnim transformacijama je *lokalna* $U(1)$ grupa. Gradijentne simetrije su osnovni koncept pomoću koga se opisuju fundamentalne interakcije medju česticama: grupa koja unifikuje jaku, slabu i elektromagnetnu interakciju i daje Standardni model fizike elementarnih čestica je $SU(3) \otimes SU(2) \otimes U(1)$.

6.3 EFEKAT AHARONOVA I BOHM-A

U Schrödinger-ovoj jednačini za kretanje čestice u elektromagnetnom polju figurišu eksplicitno elektromagnetni potencijali, a ne električno i magnetno polje kao u jednačinama klasične mehanike. U klasičnoj elektrodinamici potencijali se nameću kao prirodne varijable kroz princip najmanjeg dejstva; osim toga, pri Lorentz-ovim transformacijama potencijali se transformišu kao komponente vektora, a polja kao komponente tenzora drugog reda. Medjutim ono što standardno meri, klasično, su polja. Postavlja se pitanje da li se elektromagnetni potencijali mogu meriti pomoću nekog kvantnog efekta, odnosno da li u kvantnoj mehanici imaju opservabilne posledice? Potvrđan odgovor dali su Aharonov i Bohm 1959, a eksperiment koji je proverio efekat koji su oni teorijski predvideli je izvršio Chambers 1960. godine.²

U postavci koju su predložili Aharonov i Bohm analizira se kretanje elektrona u spoljašnjosti beskonačno dugačkog solenoida poluprečnika a , normalno na solenoid. Kroz solenoid protiče struja: magnetno polje koje ona indukuje unutar solenoida je konstantno, a izvan njega je nula. Zbog toga je Lorentz-ova sila koja deluje na elektron van solenoida nula i magnetno polje, klasično gledano, ne utiče na kretanje elektrona. Razmotrićemo ovaj problem u kvantnoj mehanici.

Ako osu solenoida usmerimo duž z -ose, vektorski potencijal koji opisuje magnetno polje dat je, u cilindričnim koordinatama (ρ, φ, z) , sa

$$\vec{A} = \begin{cases} \frac{B\rho}{2} \vec{e}_\varphi, & \rho < a \\ \frac{Ba^2}{2\rho} \vec{e}_\varphi, & \rho > a \end{cases}. \quad (6.34)$$

U navedenom radu Aharonov i Bohm se razmatrali kretanje slobodnih elektrona u $\rho\varphi$ -ravni, odnosno rasejanje na potencijalu (6.34). Taj problem

²Y. Aharonov, D. Bohm, Phys. Rev. **115** (1959) 485, R. G. Chambers, Phys. Rev. Lett. **5** (1960) 3.

podrazumeva identifikaciju upadnog i izlaznih stanja elektrona pri rasejanju odnosno detaljnije razmatranje graničnih uslova. Teoriju rasejanja ostavili smo za poslednju glavu ove knjige i zbog toga ćemo umesto rasejanja odrediti svojstvene energije slobodnih elektrona i pokazati da one zavise od vrednosti B iako je magnetno polje u oblasti dostupnoj elektronima jednako nuli. Pretpostavimo da se elektron kreće u cilindričnoj šupljini $\rho \in (a, b)$ tj. da imamo lokalizaciju dodatnim potencijalom

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \in (a, b) \\ \infty, & \rho \notin (a, b) \end{cases}. \quad (6.35)$$

Ovaj potencijal na talasnu funkciju $\psi(\rho, \varphi, z)$ nameće uslove

$$\psi(\rho, \varphi, z) = 0 \quad \rho \notin (a, b), \quad \psi(a, \varphi, z) = \psi(b, \varphi, z) = 0 \quad (6.36)$$

pod kojima treba da rešimo Schrödinger-ovu jednačinu

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \frac{a^2 B}{2\rho} \vec{e}_\varphi \right)^2 \psi = E\psi \quad (6.37)$$

u oblasti $\rho \in (a, b)$. U cilindričnim koordinatama operator nable dat je izrazom

$$\nabla = \vec{e}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}, \quad (6.38)$$

pa je kovarijantni izvod

$$-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \vec{A} = -i\hbar \left(\vec{e}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{ea^2 B}{2\hbar c} \right) + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (6.39)$$

Potencijal koji razmatramo samo menja \vec{e}_φ -komponentu nable za konstantu, pa se laplasijan može dobiti jednostavnom zamenom

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{ea^2 B}{2\hbar c} \quad (6.40)$$

u izrazu za Δ u cilindričnim koordinatama (datom u dodatku četvrte glave). Dakle, Schrödinger-ova jednačina glasi

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{ea^2 B}{2\hbar c} \right)^2 \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi. \quad (6.41)$$

Pošto se u jednačini jedino promenljiva ρ pojavljuje eksplicitno, partikularna rešenja mogu se birati u obliku proizvoda,

$$\psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)F(\varphi)Z(z) = R(\rho) e^{im\varphi} e^{ik_z z}, \quad (6.42)$$

gde je m ceo broj zbog neprekidnosti talasne funkcije u ravni $\varphi = 0$ tj. $\varphi = 2\pi$. Jednačina za preostalu nepoznatu funkciju $R(r)$ je

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{1}{\rho^2} \left(m - \frac{ea^2 B}{2\hbar c} \right)^2 R + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - k_z^2 \right) R = 0, \quad (6.43)$$

odnosno

$$\rho^2 R'' + \rho R' + (k^2 \rho^2 - \nu^2) R = 0, \quad (6.44)$$

gde je

$$\nu = m - \frac{ea^2 B}{2\hbar c}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - k_z^2. \quad (6.45)$$

Ova jednačina se svodi na Bessel-ovu jednačinu uvođenjem promenljive $x = k\rho$, i za svaku vrednost ν ima dva linerno nezavisna rešenja,

$$R(r) = \alpha J_\nu(k\rho) + \beta N_\nu(k\rho). \quad (6.46)$$

Treba još da nametnemo granični uslov

$$R(a) = 0, \quad R(b) = 0. \quad (6.47)$$

Bessel-ove funkcije u celoj oblasti $\rho \in (0, \infty)$ imaju beskonačno mnogo nula, a asimptotski su proporcionalne sinusima ili kosinusima: neke od njihovih osobina date su u dodatku sledeće glave. Kada bismo u rešenju koje posmatramo imali samo jednu od dve linearno nezavisne Bessel-ove funkcije na primer J_ν , granični uslov bi imao rešenje samo u slučaju da je odnos a/b jednak odnosu neke dve nule funkcije J_ν . Ovako, on daje kvantovanje energije odnosno konstante k . Iz

$$\alpha J_\nu(ka) = -\beta N_\nu(ka), \quad \alpha J_\nu(kb) = -\beta N_\nu(kb) \quad (6.48)$$

dobijamo jednačinu za dozvoljene vrednosti k ,

$$\frac{J_\nu(ka)}{J_\nu(kb)} = \frac{N_\nu(ka)}{N_\nu(kb)}. \quad (6.49)$$

Za fiksirano ν imamo disretan skup rešenja po k .

Rešenja Schrödinger-ove jednačine za kretanje elektrona u navedenom potencijalu su

$$\psi(\nu, k_z) = \begin{cases} (\alpha J_\nu(k\rho) + \beta N_\nu(k\rho)) e^{im\varphi} e^{ik_z z}, & \rho \in (a, b) \\ 0, & \rho \notin (a, b) \end{cases} \quad (6.50)$$

i imaju energiju

$$E_{\nu k_z} = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + k_z^2). \quad (6.51)$$

Konstanta k je rešenje graničnog uslova (6.49) pa zavisi od ν , tj. od B : znači, energetske nivoe elektrona zavise od vrednosti magnetnog polja iako ona nenulta samo unutar solenoida, a jednaka je nuli u celoj oblasti u kojoj se elektron kreće! Talasne funkcije a time i energije ne zavise od B samo u slučaju

$$\frac{eBa^2}{2\hbar c} = \frac{e}{2\pi\hbar c} a^2 \pi B = n, \quad (6.52)$$

tj. ako je fluks magnetnog polja kroz solenoid kvantovan. Tada Besselove funkcije koje posmatramo, J_ν i N_ν , imaju celobrojni indeks $\nu = m - n$, pa za $m \in \mathbb{Z}$ i $\nu \in \mathbb{Z}$.

6.4 ZADACI

1. Odrediti kako izgleda operator specijalne Galilei-jeve transformacije u Heisenberg-ovoj slici,

$$U_H(v) = e^{-\frac{i}{\hbar}vB_H} \quad (6.53)$$

tj. rešiti jednačine

$$U_H^{-1} x_H U_H = x_H - vt, \quad U_H^{-1} p_H U_H = p_H - mv \quad (6.54)$$

uzimajući da je operatori dati u fiksiranom trenutku vremena, pa je $[x_H, p_H] = i\hbar$. Proveriti onda kako operator busta deluje na talasnu funkciju $\Psi(x, t)$ koristeći relaciju

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}, \quad (6.55)$$

koja važi ako je $[A, B] = \text{const}$.

Reš: pošto transformacija translira i x_H i p_H , može se uzeti da je $U_H(v)$ element Weyl-ove grupe tj. oblika

$$e^{-\frac{i}{\hbar}vB_H} = e^{-\frac{i}{\hbar}v(\alpha x_H + \beta p_H)}. \quad (6.56)$$

Onda sledi primenom BCH $\alpha = m, \beta = -t$.

Dalje: ako se vratimo i Schrödinger-ovu sliku i primenimo bust na talasne funkcije,

$$U(v) = e^{-\frac{i}{\hbar}vB} = e^{-\frac{i}{\hbar}v(\alpha x + \beta p)} \quad (6.57)$$

imamo

$$e^{-\frac{i}{\hbar}mv\hat{x} + \frac{i}{\hbar}vt\hat{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}mv\hat{x}} e^{\frac{i}{\hbar}vt\hat{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2t}{2}} \quad (6.58)$$

pa je

$$\langle x | \psi'(t) \rangle = \langle x | U(v) | \psi(t) \rangle \quad (6.59)$$

i dalje

$$\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}mv\hat{x} + \frac{i}{\hbar}vt\hat{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}mvx - \frac{i}{\hbar}\frac{mv^2t}{2}} \langle x | e^{\frac{i}{\hbar}vt\hat{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}(mvx + \frac{mv^2t}{2})} \langle x + vt |$$

2. Naći komutacione relacije između komponenti kinematičkog impulsa

$$\Pi_i = p_i - \frac{e}{c} A_i \quad (6.60)$$

$$([\Pi_i, \Pi_j] = \epsilon_{ijk} \frac{i\hbar e}{c} B_k)$$

3. Pokazati da su novodefinisane ρ i \vec{j} invarijantne na gejdž transformacije.

GLAVA 7

PRIBLIŽNE METODE

Samo za mali broj jednostavnih fizičkih sistema Schrödinger-ova jednačina se može rešiti egzaktno, te da bi se opisalo ponašanje sistema koji imaju više čestica (višeelektronski atomi i dalje, molekuli i kristali) ili komplikovanije međusobne interakcije razvijaju se približne metode. Takva situacija nije specifična za kvantnu mehaniku: i u klasičnoj mehanici intuicija se gradi na poznavanju nekoliko bazičnih fizičkih sistema, a kretanje kompleksnijih sistema rešava se približno. Naravno, u onoj meri u kojoj su klasične i kvantne jednačine različite, različiti su i metodi: neki metodi teorije perturbacija za diferencijalne jednačine su isti, drugi su specifični. Osim analitičkih, sa povećanjem brzine računara numerički metodi zauzimaju sve važnije mesto. Ali osnovna ideja svakog približnog opisa je ista: da se izdvoje najvažnije fizičke osobine koje karakterišu sistem, a da se ostale osobine prikažu aproksimativno. Zbog toga je detaljno poznavanje analitičkih rešenja toliko važno.

Približni metod zavisi od konkretnog problema koji se rešava. U kvantnoj mehanici velika grupa problema vezana je za određivanje energija i identifikaciju spektara, kao i za nalaženje stacionarnih stanja: ovi problemi se rešavaju stacionarnom teorijom perturbacija, varijacionim računom i sličnim metodama. Druga grupa vezana je za dinamiku, odnosno za određivanje verovatnoća prelaza, poluvremena raspada, efikasnih preseka itd. – takve probleme rešavamo vremenski zavisnom perturbacijom, teorijom rasejanja i sl. U ovoj glavi izvešćemo nabrojane približne metode u njihovoj najosnovnijoj varijanti, i pokazati neke od važnih fizičkih primena; videćemo sem toga kako se u nekim slučajevima sami metodi modifikuju da bi se adekvatno opisao traženi fenomen ili efekat.

7.1 STACIONARNA TEORIJA PERTURBACIJA

U slučaju stacionarne teorije perturbacija želimo da odredimo energetske nivoe i svojstvene funkcije fizičkog sistema koji je u principu poznat, pri njegovoj perturbaciji, odnosno maloj promeni. Tipičan primer je: kako se

spektar energije atoma ili molekula menja kada se uključi spoljašnje električno ili magnetno polje. Osnovna (fizička, matematička) ideja kod teorije perturbacija je da sistem i “posle uključenja” perturbacije zadržava svoje karakteristike kao što su, na primer, postojanje vezanih stanja ili svojstvene energije, koje perturbacija samo “malo” menja. Zato ima smisla perturbovani sistem opisivati pojmovima koji se odnose na osnovni, neperturbovani sistem. “Malo” znači, fizički, da su tipične promene energije koje perturbacija unosi mnogo manje od karakterističnih energija, npr. razlika energetske nivoa polaznog sistema. Iz gornjeg primera atoma u električnom polju jasno je da dodatna interakcija nije uvek perturbacija: u jakom električnom polju atom se jonizuje, pa opis elektrona i jezgra u terminima vezanih stanja postaje potpuno neadekvatan, kao i primena metoda teorije perturbacija.

Pretpostavićemo da je hamiltonijan sistema oblika

$$H = H_0 + V, \quad (7.1)$$

gde je H_0 neperturbovani hamiltonijan čije osobine – spektar i svojstvene funkcije znamo. V je perturbacija, odnosno potencijalna energija koja je opisuje; pretpostavljamo da perturbacija ne zavisi od vremena. Da bismo istakli činjenicu da je perturbacija mala, pisaćemo u nastavku

$$H = H_0 + \lambda V, \quad (7.2)$$

pretpostavljajući da je $\lambda \ll 1$ mali parametar. Uvodjenje λ je stvar “knjižovodstva”, način da lakše vodimo računa o redovima veličina; pravi parametar po kome se razvija je odnos energija $|V|/|H_0|$. Uzimamo, dakle, da je sistem dominantno opisan hamiltonijanom H_0 , a korekcije zbog prisustva perturbacije su prvog i višeg reda po λ . To znači da, ako sa E_n i $|\psi_n\rangle$ označimo svojstvene energije i svojstvene funkcije hamiltonijana H ,

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (7.3)$$

možemo da pišemo

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots, \\ |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots, \end{aligned} \quad (7.4)$$

odnosno da pretpostavimo da se E_n i $|\psi_n\rangle$ mogu razviti u red po λ . Pri tome ćemo svojstveni bazis od H_0 označiti sa

$$H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle \quad (7.5)$$

i uzeti da je diskretan i, za početak, nedegenerisan. Naravno, $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$.

Koristeći (7.4), jednačinu (7.3) možemo da prepíšemo kao

$$(H_0 + \lambda V)(|n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(|n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots).$$

Ako u ovoj jednačini izjednačimo članove uz iste stepene od λ , dobijamo sistem

$$H_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle, \quad (7.6)$$

$$H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + V|n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n\rangle, \quad (7.7)$$

$$H_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + V|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |n\rangle, \quad (7.8)$$

...

Prva od jednačina ovog sistema je, naravno, identična sa (7.5). Sistem se rešava iterativno: kada se reši jednačina (7.6), dobijene vrednosti $E_n^{(0)}$ i $|n\rangle$ se zamene u jednačinu (7.7), koja se onda rešava po $E_n^{(1)}$ i $|\psi_n^{(1)}\rangle$, po tzv. *prvim popravkama* energije i svojstvenih stanja. Dalje, kada znamo osnovno stanje i prve popravke, rešavanjem jednačine (7.8) dobijamo *druge popravke* energije i stanja i tako redom dalje, do potrebne tačnosti.

Da bismo rešili jednačine (7.7) i (7.8) treba da ih napišemo u nekom odredjenom bazu, a najprirodniji je bazu energije $\{|k\rangle\}$. Označimo

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |k\rangle, \quad |\psi_n^{(2)}\rangle = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |k\rangle, \quad (7.9)$$

i tako dalje. Pretpostavili smo da su popravke ortogonalne na nulto stanje $|n\rangle$. Ispostavlja se, videćemo, da popravka duž $|n\rangle$ ne može da se odredi, a i nema smisla – u principu stanje na kraju treba da se normira na jedinicu. U bazu stanja $|k\rangle$ jednačina (7.7) glasi

$$H_0 \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle + V|n\rangle = E_n^{(0)} \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle + E_n^{(1)} |n\rangle, \quad (7.10)$$

odnosno

$$\sum (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) c_{nk}^{(1)} |k\rangle + V|n\rangle = E_n^{(1)} |n\rangle. \quad (7.11)$$

Projekcija ove jednačine na pravac $|n\rangle$ daje prvu popravku energije: množenjem sa $\langle n|$ dobijamo

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle = V_{nn}. \quad (7.12)$$

Ostale projekcije jednačine (7.11) daju prvu popravku talasne funkcije odnosno koeficijente $c_{nm}^{(1)}$: množenjem sa $\langle m| \neq \langle n|$ dobijamo

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) c_{nm}^{(1)} + V_{mn} = 0 \quad (7.13)$$

gde je $V_{mn} = \langle m|V|n\rangle$, odnosno

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (7.14)$$

Dobili smo izraze za popravku energije i popravku 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 energetske nivoi nedegenerisani. Sem toga poslednja jednačina nam *a posteriori* daje uslov za primenljivost teorije perturbacija: popravke talasne funkcije su male, $c_{nm}^{(1)} \ll 1$ ako je

$$V_{mn} \ll E_n^{(0)} - E_m^{(0)}. \quad (7.15)$$

Sledeća u nizu jednačina je jednačina (7.8) za kvadratnu popravku:

$$H_0 \sum c_{nk}^{(2)} |k\rangle + V \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle = E_n^{(0)} \sum c_{nk}^{(2)} |k\rangle + E_n^{(1)} \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle + E_n^{(2)} |n\rangle.$$

Kao i malopre, da bismo našli popravku energije jednačinu množimo sa $\langle n|$. Dobijamo

$$E_n^{(2)} = \langle n|V \sum c_{nk}^{(1)} |k\rangle = \sum \frac{V_{nk}V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (7.16)$$

Množenjem ostalim vektorima, $\langle m| \neq \langle n|$ dobija se druga popravka talasne funkcije koju ovde nećemo eksplicitno pisati. Proces se nastavlja iterativno sve dok se ne dobije tačnost koja odgovara eksperimentalnoj grešci rezultata koji želimo teorijski da opišemo odnosno da objasnimo.

Ostalo je još da vidimo kako će se promeniti formula za prvu popravku energije (7.12) u slučaju kad je energetske nivo $|n\rangle$ degenerisan. Degeneracija znači da ima više stanja iste energije $E_n^{(0)}$: prebrojimo ih dodatnim kvantnim brojem ν ,

$$H_0 |n\nu\rangle = E_n^{(0)} |n\nu\rangle. \quad (7.17)$$

Kao i ranije, bazis $\{|n\nu\rangle\}$ je ortonormiran, $\langle n\nu|k\kappa\rangle = \delta_{nk}\delta_{\nu\kappa}$. Jednačina za popravku energije prvog reda u ovom slučaju glasi

$$H_0 \sum c_{n\nu,k\kappa}^{(1)} |k\kappa\rangle + V |n\nu\rangle = E_n^{(0)} \sum c_{n\nu,k\kappa}^{(1)} |k\kappa\rangle + E_n^{(1)} |n\nu\rangle, \quad (7.18)$$

pa množenjem svojstvenim vektorom $\langle n\mu|$ dobijamo

$$E_n^{(1)} \delta_{\mu\nu} = \langle n\mu|V|n\nu\rangle. \quad (7.19)$$

Poslednja formula znači da, da bismo odredili prve popravke energije, treba da dijagonalizujemo perturbaciju V ali ne kompletanu, nego u potprostoru fiksiranog n , tj. podmatricu $V_{n\mu,n\nu}$. Taj problem je, razume se, mnogo jednostavniji od dijagonalizacije kompletnog hamiltonijana.

Prvi primer primene teorije perturbacije je *Zeeman-ov efekat*. Zeeman-ovim efektom naziva se promena nivoa energije elektrona u slabom magnetnom polju: odredićemo kako homogeno magnetno polje utiče na energetske nivo u atomu vodonika. Hamiltonijan elektrona dat je sa

$$H = H_0 + V, \quad (7.20)$$

gde je

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B, \quad (7.21)$$

ako z -osu usmerimo duž magnetnog polja \vec{B} . Magnetni moment elektrona potiče od spina i od orbitnog momenta impulsa, pa imamo

$$V = \mu_B B (L_z + 2s_z). \quad (7.22)$$

Da bismo odredili prvu popravku energije treba da dijagonalizujemo perturbaciju V : međutim ona je u bazu stanja $|nlmm_s\rangle$ elektrona u atomu vodonika već dijagonalna. Zato su popravke, analogno (7.12), očekivane vrednosti perturbacije:

$$E_{nlmm_s}^{(1)} = \langle nlmm_s | V | nl'm'm'_s \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{m_s m'_s} \mu_B B \hbar (m + 2m_s). \quad (7.23)$$

Unošenjem u slabo magnetno polje n -ti nivo energije vodonikovog atoma se “cepa” na više nivoa. Na primer, osnovno stanje $|100 \pm \frac{1}{2}\rangle$ cepa se na dva, čije su energije

$$E_1^{(0)} + E_{100 \pm \frac{1}{2}}^{(1)} = E_1^{(0)} \pm \mu_B B \hbar. \quad (7.24)$$

Prvo pobudjeno stanje $n = 2$ je osmostruko degenerisano, a moguće vrednosti ostalih kvantnih brojeva su $l = 0, m = 0, m_s = \pm \frac{1}{2}$, i $l = 1, m = -1, 0, 1, m_s = \pm \frac{1}{2}$. Prvi pobudjeni nivo se cepa na pet energetskih nivoa:

$$E_2^{(0)} + E_{2lmm_s}^{(1)} = E_2^{(0)} + (0, \pm \mu_B B \hbar, \pm 2\mu_B B \hbar). \quad (7.25)$$

!! slika: prelaz sa nivoa & slika apsorpcionog spektra Magnetno polje ne razlikuje sva stanja elektrona odnosno ne uklanja degeneraciju po energiji potpuno. Pošto perturbacija zavisi od vrednosti projekcije ugaonog momenta na pravac magnetnog polja, kvantni broj operatora L_z nazvan je, istorijski “magnetni kvantni broj”, m .

Drugi važan efekat koji se dobro opisuje teorijom perturbacija je *Stark-ov efekat*, odnosno promena energetskih nivoa elektrona u slabom električnom polju. Hamiltonijan elektrona u atomu vodonika u homogenom električnom polju \vec{E} dat je sa¹

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \vec{d} \cdot \vec{E}, \quad (7.26)$$

a pošto je polje slabo, potencijalna energija električnog dipola elektrona je perturbacija,

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} = -eEz, \quad (7.27)$$

¹Linearni Stark-ov efekat za vodonikov atom može se dobiti i egzaktno, rešavanjem jednačine u parabolikim koordinatama npr. u knjizi H. A. Bethe, E. E. Salpeter, *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*, Springer, 1957. Dok mi ovde računamo promene u spektrima u magnetnom i električnom polju kao primer kako se teorija perturbacija primenjuje i razvija, u navedenoj knjizi se može naći detaljna analiza efekata koji potiču od ostalih interakcija u atomu i poredjenje sa eksperimentom.

ako z -osu orijentišemo duž polja. Pošto električno polje ne interaguje sa spinom, zanemarićemo u notaciji spinski stepen slobode: tada je osnovno stanje nedegenerisano. Prva popravka energije osnovnog stanja je

$$E_1^{(1)} = \langle 100|V|100\rangle = -\frac{1}{\pi a_0^3} \iiint eEr \cos \theta e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 0,$$

jer je talasna funkcija osnovnog stanja, $\langle r\theta\varphi|100\rangle = \psi_{100}$ data sa

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}. \quad (7.28)$$

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

$$E_n^{(2)} = \sum \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (7.29)$$

i izvedena je za slučaj nedegenerisanog spektra, a ovde su svi nivoi energije sem osnovnog degenerisani. U kompletnoj formuli u opštem slučaju se sumira po svim stanjima različitim od onog koje popravljamo, pa imamo

$$E_1^{(2)} = \sum_{n \neq 1} \frac{|\langle 100|V|nlm\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (7.30)$$

Matrični elementi perturbacije su

$$\langle 100| -eEz |nlm\rangle = -eE \iiint R_{00}^* Y_0^{0*} r \cos \theta R_{nl} Y_l^m r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi.$$

Pošto je $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$, a $\cos \theta = \sqrt{4\pi/3} Y_1^0$, možemo da pišemo

$$\begin{aligned} \langle 100|z |nlm\rangle &= \int R_{00}^* R_{nl} r^3 dr \iint \frac{1}{\sqrt{3}} Y_1^{0*} Y_l^m \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{m0} \delta_{l1} \int R_{00}^* R_{n1} r^3 dr. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Ovaj poslednji integral nije lako izračunati analitički, ali dobili smo, u principu, rezultat: u formuli (7.30) imamo doprinose od po jednog stanja, $|n10\rangle$, iz svakog energetskog nivoa. Druga popravka energije osnovnog stanja je negativna pa se osnovno i prvo pobudjeno stanje “odbijaju”. Naravno, druga popravka zavisi od kvadrata električnog polja, E^2 .

Izračunajmo sada kako se menja prvo pobudjeno stanje. Kao i kod osnovnog stanja zanemarićemo spinski stepen slobode, pa ćemo uzeti da je

prvo pobudjeno stanje četverostruko degenerisano. Označimo odgovarajuće talasne funkcije na sledeći način

$$\begin{aligned}\psi_{200} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} = |1\rangle \\ \psi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos\theta = |2\rangle \\ \psi_{21\pm 1} &= \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} = |3, 4\rangle.\end{aligned}$$

Izračunavanjem matičnih elemenata perturbacije, $V_{\mu\nu} = \langle\mu|(-eEz)|\nu\rangle$, $\mu, \nu = 1, 2, 3, 4$, dobijamo podmatricu koju treba dijagonalizovati:

$$V = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{E} & 0 & 0 \\ \mathcal{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.32)$$

Skoro svi matični elementi zbog simetrije su nula, a nenulti V_{12} jednak je

$$\mathcal{E} = \langle\psi_{200}|V|\psi_{210}\rangle = -\frac{eE}{12a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{a_0}} r^3 dr = 3eEa_0, \quad (7.33)$$

pa dijagonalizacijom (7.32) dobijamo da su popravke energije u prvom redu teorije perturbacija

$$E_2^{(0)} + E_2^{(1)} = E_2^{(0)} + (0, \pm\mathcal{E}). \quad (7.34)$$

Prvi pobudjeni nivo cepa se na tri nivoa, a razlike energije zavise linearno od polja pa imamo linearni Stark-ov efekat.

Kao poslednji primer stacionarne teorije perturbacija pokazaćemo kako se iz nje može dobiti *van der Waals-ova sila* koja fenomenološki opisuje interakciju između (neutralnih) molekula ili atoma. Razmotrimo kao najjednostavniji primer interakciju dva atoma vodonika koji se nalaze na konstantnom međusobnom rastojanju R . Kada su jezgra na fiksiranom rastojanju, potencijalna energija interakcije atoma svodi se na potencijalnu energiju interakcije njihovih elektrona. Pretpostavićemo da je rastojanje R dovoljno veliko da ne moramo da uzimamo u obzir izmensku interakciju između elektrona, kao i da su oba elektrona u osnovnom stanju. Hamiltonijan za ovaj sistem je

$$H = H_0 + V = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + V, \quad (7.35)$$

gde smo za neperturbovani hamiltonijan uzeli zbir hamiltonijana atoma čiji elektroni imaju koordinate označene sa \vec{r}_1 i \vec{r}_2 . Perturbacija je potencijalna energija interakcije,

$$V = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{|\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{R} + \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{R} - \vec{r}_1|}. \quad (7.36)$$

Kada se V približno izračuna za velika rastojanja, $R \gg |\vec{r}_1|, |\vec{r}_2|$, koristeći razvoj do drugog reda po parametru $a/R \ll 1$ svakog od članova u formuli (7.36),

$$(R^2 + 2\vec{R} \cdot \vec{a} + a^2)^{-1/2} = \frac{1}{R} \left(1 - \frac{\vec{R} \cdot \vec{a}}{R^2} - \frac{1}{2} \frac{a^2}{R^2} + \frac{3}{2} \frac{(\vec{R} \cdot \vec{a})^2}{R^4} \right), \quad (7.37)$$

u vodećem, kvadratnom redu dobija se potencijal dipol-dipol interakcije,

$$V = \frac{\vec{d}_1 \cdot \vec{d}_2 - 3(\vec{d}_1 \cdot \vec{n})(\vec{d}_2 \cdot \vec{n})}{R^3}. \quad (7.38)$$

$\vec{d}_{1,2}$ su električni dipolni momenti elektrona, a \vec{n} ort pravca koji spaja atome, $\vec{R} = R\vec{n}$. Ako z -osu usmerimo duž \vec{n} dobijamo

$$V = \frac{e^2}{R^3} (x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2). \quad (7.39)$$

Izračunajmo popravku energije koju unosi ova perturbacija kada su oba elektrona u osnovnom stanju, $|100\rangle_1|100\rangle_2$. U tom slučaju je, očigledno,

$$\langle 100|_1 \langle 100|_2 V |100\rangle_1 |100\rangle_2 = 0, \quad (7.40)$$

tj. prva popravka je jednaka nuli. Vodeći doprinos daje druga popravka energije: koristeći formulu (7.29) vidimo da će, nezavisno od konkretnog rezultata za integrale po radialnim funkcijama, ona imati oblik

$$E_0^{(2)} = V_{vdW} \sim \frac{1}{R^6}. \quad (7.41)$$

Ovo je najčešća zavisnost za van der Waals-ov potencijal koja se dobija u eksperimentu. Jasno je takodje da će rezultat biti drugačiji ako računamo interakciju elektrona u pobudjenim stanjima, ili ako su atomi blizu pa treba uračunati efekte antisimetrizacije talasne funkcije elektrona.

7.2 VARIJACIONI METOD

Varijacioni metod je jedan od aproksimativnih metoda tipičnih za kvantnu mehaniku: koristi se za određivanje energije osnovnog (eventualno, prvog pobudjenog) stanja i koristi se kada u dobroj ili dovoljnoj meri poznajemo

oblik talasne funkcije. Osnova varijacionog metoda je osobina očekivanih vrednosti, ili teorema: ako se za sistem koji je opisan hamiltonijanom H funkcional energije $E[\psi]$ definiše sa

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (7.42)$$

za sva fizička stanja važi

$$E[\psi] \geq E_0, \quad (7.43)$$

gde je E_0 energija osnovnog stanja. Gornje tvrdjenje svodi se na činjenicu koju smo dokazali u drugoj glavi, da je očekivana vrednost operatora uvek veća ili jednaka od njegove minimalne vrednosti.

Ova teorema znači da bismo, u principu, energiju E_0 i odgovarajuće osnovno stanje ψ_0 mogli da odredimo variranjem funkcionala energije, odnosno iz uslova

$$\frac{\delta E[\psi]}{\delta \psi} = 0. \quad (7.44)$$

Ova jednačina ne rešava se ništa jednostavnije od Schrödinger-ove jednačine. Medjutim, ukoliko imamo neke fizičke argumente odnosno informaciju o obliku talasne funkcije osnovnog stanja, npr. da se može aproksimirati familijom *probni*h funkcija $\psi(\alpha, \beta, \dots)$ koje zavise od konačnog broja realnih parametara α, β, \dots , onda, umesto u skupu svih stanja, energiju možemo da variramo u podskupu probnih funkcija. Tada se funkcional $E[\psi]$ pretvara funkciju $E(\alpha, \beta, \dots)$, a varijacioni uslov (7.44) u uslov ekstremuma funkcije više promenljivih,

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \beta} = 0, \quad \dots \quad (7.45)$$

Rešavanjem jednačine (7.45) dobijaju se vrednosti parametara odnosno tačka $(\alpha_0, \beta_0, \dots)$ za koju je vrednost $E(\alpha, \beta, \dots)$ minimalna; ova vrednost predstavlja, aproksimativno, najnižu vrednost energije sistema. Naravno, ako se u skupu probnih funkcija nalazi svojstvena funkcija osnovnog stanja, tada ćemo dobiti pravu energiju osnovnog stanja, $E(\alpha_0, \beta_0, \dots) = E_0$.

Kao prvi primer primene varijacionog računa dokazaćemo jednu od osobina jednodimenzionih potencijala koja je ranije bila navedena kao zadatak: potencijal $V(x)$ za koji važi

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} V(x) dx < 0, \quad (7.46)$$

ima bar jedno vezano stanje. Ovo tvrdjenje pokazaćemo tako što ćemo izračunati energiju na skupu probnih funkcija koje eksponencijalno opadaju,

$$\psi_\alpha(x) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}. \quad (7.47)$$

U ovim stanjima srednja vrednost kinetičke energije je

$$\langle T \rangle_\alpha = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha^2 e^{-2\alpha|x|} dx = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}. \quad (7.48)$$

Srednja vrednost potencijalne energije biće negativna,

$$\langle V \rangle_\alpha = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha|x|} V(x) dx \approx \alpha \int_{-\infty}^{\infty} V(x) dx < 0, \quad (7.49)$$

u slučaju da je parametar α dovoljno mali da se vrednost eksponencijalne funkcije može zameniti jedinicom. To znači da postoji α za koje je

$$E_0 \leq E(\alpha) = \langle T \rangle_\alpha + \langle V \rangle_\alpha < 0, \quad (7.50)$$

a pošto su asimptotske vrednosti potencijala nula, minimalna svojstvena vrednost hamiltonijana E_0 odgovara vezanom stanju.

Primenom varijacionog računa sa velikom tačnošću se može izračunati energija osnovnog stanja atoma helijuma. Ako se zanemari interakcija između elektrona i spin-orbitna interakcija, osnovno stanje je zbog identičnosti elektrona dato sa

$$|100\rangle_1 |100\rangle_2 |s=0, m_s=0\rangle, \quad (7.51)$$

gde je $|100\rangle$ svojstvena funkcija osnovnog stanja elektrona u vodoniku sličnom atomu sa $Z=2$. Stanje je spinski singlet. Pretpostavimo da je prostorni deo talasne funkcije modifikovan, tako da umesto naelektrisanja $Z=2$ u njoj figuriše “efektivno naelektrisanje” ζ koje je varijacioni parametar:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A e^{-\frac{\zeta}{a_0} r_1} e^{-\frac{\zeta}{a_0} r_2} = \frac{\zeta^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{\zeta}{a_0} (r_1+r_2)}. \quad (7.52)$$

U poslednjoj jednakosti izračunata je i zamenjena konstanta normiranja A , a $a_0 = \hbar^2/m_e^2$ je Bohr-ov radijus. Izračunavanjem očekivanih vrednosti kinetičke i potencijalne energije (5.227) za probne funkcije (7.52) dobijamo

$$\langle T_1 + T_2 \rangle = \frac{e^2}{a_0} \zeta^2, \quad \langle V_1 + V_2 \rangle = -2Z \frac{e^2}{a_0} \zeta, \quad \langle V_{12} \rangle = \frac{5}{8} \frac{e^2}{a_0} \zeta. \quad (7.53)$$

Prva dva integrala se računaju pravolinijski primenom Γ -funkcije, a da bi se izračunao poslednji treba da se primeni razvoj po sfernim harmonicima (4.114-4.115),

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \frac{4\pi}{2l+1} Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1) Y_l^m(\theta_2, \varphi_2). \quad (7.54)$$

Integracije po uglovima mogu se uraditi korišćenjem $Y_0^0(\theta_1, \varphi_1) = 1/\sqrt{4\pi}$,

$$\iint \sin \theta d\theta d\varphi Y_l^{m*} = \sqrt{4\pi} \iint \sin \theta d\theta d\varphi Y_l^{m*} Y_0^0 = \sqrt{4\pi} \delta_{l0} \delta_{m0}, \quad (7.55)$$

pa ostaje integral

$$\begin{aligned}\langle V_{12} \rangle &= -\frac{16e^2\zeta^6}{a_0^2} \iint dr_1 dr_2 \frac{r_1^2 r_2^2}{r_{>}} e^{-\frac{2\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} \\ &= -\frac{16e^2\zeta^6}{a_0^2} \int_0^\infty dr_1 \left(\int_0^{r_1} dr_2 r_1 r_2^2 e^{-\frac{2\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_1^2 r_2 e^{-\frac{2\zeta}{a_0}(r_1+r_2)} \right).\end{aligned}$$

Minimalna vrednost energije dobija se za vrednost parametra $\zeta_0 = 27/16$, ($\zeta_0 < 2$), i jednaka je $E(\zeta_0) = -77.5$ eV, dok je eksperimentalna vrednost energije osnovnog stanja $E_0 = -78.9$ eV.

Kao poslednju primenu varijacionog računa analiziraćemo talasnu funkciju i energiju osnovnog stanja elektrona u molekulu vodonika, ili preciznije u jonu molekula vodonika, H_2^+ . Problem kretanja elektrona u elektrostatičkom potencijalu dva protona koji miruju spada u rešive kvantno-mehaničke probleme i rešava se u parabolikim koordinatama. Mi ćemo ga analizirati približno: metod koji se koristi je uopštena varijanta varijacionog metoda jer varijacioni parametar R , rastojanje između jezgara, figuriše i u hamiltonijanu i u talasnoj funkciji.

Jon molekula vodonika se sastoji iz dva protona koje ćemo označiti sa a i b , i jednog elektrona. Njegova energija data je sa

$$\begin{aligned}H &= \frac{\vec{p}_a^2}{2M} + \frac{\vec{p}_b^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b), \\ V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) &= -\frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_a|} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_b|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|}.\end{aligned}\tag{7.56}$$

Pretpostavićemo da je kinetička energija protona mnogo manja od energije elektrona, tako da u prvaj aproksimaciji možemo smatrati da protoni miruju, odnosno da se kreću mnogo sporije nego elektron. U skladu sa ovom pretpostavkom uvešćemo, u računu koji sledi, koordinatni sistem na sledeći način

$$\vec{r}_a = 0, \quad \vec{r}_b - \vec{r}_a = \vec{R} = R\vec{e}_z.\tag{7.57}$$

Pretpostavka o mnogo bržem kretanju elektrona naziva se *Born-Oppenheimer-ova aproksimacija* i formuliše se precizno kao razdvajanje promenljivih u talasnoj funkciji sistema. Pretpostavljamo da je talasna funkcija čestica u molekulu oblika

$$\Psi(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) = \psi(\vec{r}) \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b),\tag{7.58}$$

gde je talasna funkcija elektrona $\psi(\vec{r})$ rešenje Schrödinger-ove jednačine

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \psi(\vec{r}) = E(R) \psi(\vec{r}),\tag{7.59}$$

a potencijalna energija V je izračunata pod pretpostavkom da se jezgra ne kreću,

$$V = \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{R}|}. \quad (7.60)$$

Zamenom elektronske talasne funkcije u Schrödinger-ovu jednačinu za molekul

$$\left(\frac{\vec{p}_a^2}{2M} + \frac{\vec{p}_b^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \right) \psi(\vec{r}) \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = \mathcal{E} \psi(\vec{r}) \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) \quad (7.61)$$

dobijamo jednačinu za talasnu funkciju jezgara

$$\left(\frac{\vec{p}_a^2}{2M} + \frac{\vec{p}_b^2}{2M} + E(R) \right) \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = \mathcal{E} \phi(\vec{r}_a, \vec{r}_b), \quad (7.62)$$

iz koje vidimo da $E(R)$ predstavlja efektivni elektrostatički potencijal u kome se kreću jezgra. Minimum ovog potencijala daje ravnotežno rastojanje jezgara u molekulu, a razvojem $E(R)$ oko minimuma i rešavanjem jednačine (7.62) dobijamo *vibracioni spektar* molekula.

Kao što smo napomenuli, jednačina (7.59) za elektron može rešiti egzaktno: njena svojstvena stanja nazivaju se *molekulske orbitale*. Kako da, ako ne poznamo prava svojstvena stanja, aproksimiramo ove talasne funkcije? Jedna mogućnost je da ih prikažemo kao superpozicije stanja elektrona u pojedinim atomima: te talasne funkcije zovu se *linearna kombinacija atomskih orbitala*. Za osnovno stanje elektrona u molekulu pretpostavljamo da je linearna kombinacija osnovnih stanja elektrona u atomima,

$$\psi(\vec{r}) = \alpha\psi_a + \beta\psi_b = \alpha\psi_0(\vec{r} - \vec{r}_a) + \beta\psi_0(\vec{r} - \vec{r}_b), \quad (7.63)$$

gde je

$$\psi_a = \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_a) = e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad \psi_b = \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_b) = e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{R}|}{a_0}}. \quad (7.64)$$

Stanje (7.63) ćemo normirati kasnije. U principu, jedan od parametara α , β bi, sem R , takodje mogao da bude varijacioni parametar, ali ne 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 pa talasnu funkciju (7.63) može da promeni samo za fazni faktor. Zato je $\alpha = \pm\beta$: moguće su samo dve talasne funkcije, simetrična i antisimetrična:

$$\psi_{\pm} = e^{-\frac{r}{a_0}} \pm e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{R}|}{a_0}} = \psi_a \pm \psi_b. \quad (7.65)$$

Kvadrat norme ovih talasnih funkcija dobija se malo dužim računom u kome je važno uočiti, kao i pri računanju očekivane vrednosti interakcije elektrona u atomu helijuma, da integral po radijalnoj promenljivoj r treba da se podeli na dva, $r < R$ i $r > R$. Rezultat integracije je

$$\langle \psi_{\pm} | \psi_{\pm} \rangle = 2\pi a_0^3 (1 \pm S), \quad (7.66)$$

gde je S proporcionalno integralu preklapanja

$$S = \frac{1}{\pi a_0^3} \int d^3r e^{-\frac{r}{a_0} - \frac{|\vec{r}-\vec{R}|}{a_0}} = e^{-\zeta} \left(1 + \zeta + \frac{\zeta^2}{3}\right) \quad (7.67)$$

kada se uvede bezdimenzioni varijacioni parametar $\zeta = R/a_0$. Sledeći korak je da se izračuna očekivana vrednost energije. Imamo

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\pm} | \frac{\vec{p}^2}{2m} + V | \psi_{\pm} \rangle &= \quad (7.68) \\ &= \int d^3r (\psi_a \pm \psi_b) \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R} \right) (\psi_a \pm \psi_b) \\ &= \int d^3r \psi_a \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R} \right) \psi_a + (a \leftrightarrow b) \\ &\quad \pm \int d^3r \psi_a \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{R}|} + \frac{e^2}{R} \right) \psi_b + (a \leftrightarrow b) \\ &= 2\pi a_0^3 (H_{aa} \pm H_{ab}) \end{aligned}$$

jer se smenom $\vec{r} \rightarrow \vec{r} - \vec{R}$ vidi da su integrali koji se dobijaju zamenom $a \leftrightarrow b$ jednaki. Posle relativno dugačkog računa dobija se

$$H_{aa} = -\pi a_0^3 \left(E_{\infty} - \frac{e^2}{\zeta a_0} (1 + \zeta) e^{-2\zeta} \right), \quad (7.69)$$

$$H_{ab} = -\pi a_0^3 \left(\frac{e^2}{a_0} (1 + \zeta) e^{-\zeta} + S \left(E_{\infty} - \frac{e^2}{\zeta a_0} \right) \right), \quad (7.70)$$

gde je $E_{\infty} = -e^2/R = -e^2/\zeta a_0$ energija jonizacije. Energije simetričnog i antisimetričnog stanja su

$$E_{\pm} = \frac{H_{aa} \pm H_{ab}}{1 \pm S} = -E_{\infty} + \frac{e^2}{a_0} \frac{(1 + \zeta) e^{-2\zeta} \pm \left(1 - \frac{2\zeta^2}{3}\right) e^{-\zeta}}{\zeta \left(1 \pm \left(1 + \zeta + \frac{\zeta^2}{3}\right) e^{-\zeta}\right)}. \quad (7.71)$$

slika Zavisnost energije od rastojanja izmedju protona R najbolje se vidi na slici: obe vrednosti E_{\pm} imaju asimptotu $-E_{\infty}$. Medjutim, antisimetrična funkcija nema minimum pa je *nevezujuća*, a prava ili *vezujuća* orbitala je simetrična funkcija ψ_+ . Minimalna vrednost rastojanja R može da se odredi numeričkim rešavanjem uslova ekstremuma i iznosi $R_0 = 1.3 \cdot 10^{-10}$ m, a odgovarajuća energija je $E_+(R_0) = -1.76$ eV; egzaktno rešenje daje $R_{min} = 1.06 \cdot 10^{-10}$ m i energiju osnovnog stanja $E_0 = -2.8$ eV.

7.3 VREMENSKI ZAVISNA PERTURBACIJA

Kao što ime kaže, kod vremenski zavisne perturbacije perturbacija polaznog hamiltonijana H_0 , $V(t)$, u principu zavisi od vremena. To je u stvari tipična situacija kod svih realnih fizičkih sistema: po pravilu sistem ne možemo u potpunosti da izolujemo nego samo “najvećim delom”, tako da je on uvek u interakciji sa okolinom, a ta interakcija nije konstantna u vremenu i nekada se opisuje i stohastički. Mi ćemo pretpostaviti da je funkcija $V(t)$ poznata. Dakle, posmatramo sistem

$$H(t) = H_0 + V(t). \quad (7.72)$$

Ukupni hamiltonijan zavisi od vremena tako da ovaj sistem nema stacionarna stanja – sva stanja se menjaju sa vremenom. Medjutim, ako je perturbacija V mala, ima smisla da se sistem karakteriše svojstvenim stanjima osnovnog hamiltonijana H_0 : jedino što su u prisustvu perturbacije mogući prelazi iz jednog u drugo stanje. Zadatak teorije vremenski zavisne perturbacije je da odredi verovatnoće ovih prelaza.

U slučaju kada hamiltonijan H_0 ne zavisi od vremena u Schrödinger-ovoj jednačini

$$i\hbar \frac{d|\Psi_0(t)\rangle}{dt} = H_0|\Psi_0(t)\rangle \quad (7.73)$$

vremenska promenljiva može se razdvojiti od prostornih. Partikularna rešenja su

$$|n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle, \quad (7.74)$$

gde su sa $|n\rangle$ obeležena svojstvena stanja hamiltonijana H_0 ,

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (7.75)$$

Pretpostavićemo zbog jednostavnosti da je spektar energije nedegenerisan. Opšte rešenje $|\Psi_0(t)\rangle$ je linearna kombinacija partikularnih rešenja,

$$|\Psi_0(t)\rangle = \sum c_k |k(t)\rangle, \quad (7.76)$$

a koeficijenti c_k su proizvoljne konstante (koje zadovoljavaju uslov normiranja). Iz relacije (7.74) vidimo da su svojstvena stanja energije stacionarna, jer se njihova promena u vremenu svodi na promenu faznog faktora dok se gustina verovatnoće i očekivane vrednosti ne menjaju. Zato sistem koji je potpuno izolovan ostaje u osnovnom ili u pobudjenom stanju energije beskonačno dugo.

I za perturbovani hamiltonijan (7.72) stanje $|\Psi(t)\rangle$ može da se razvije po svojstvenom bazu neperturbovanog hamiltonijana,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum a_k(t)|k\rangle = \sum c_k(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|k\rangle. \quad (7.77)$$

Ova formula je slična sa (7.74), samo što u njoj koeficijenti razvoja $c_k(t)$ zavise od vremena. Schrödinger-ova jednačina određuje kako se $c_k(t)$ menjaju sa vremenom: iz

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (H_0 + V)|\Psi(t)\rangle \quad (7.78)$$

sledi

$$i\hbar \sum \frac{dc_k}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} |k\rangle = \sum c_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} V|k\rangle. \quad (7.79)$$

Množenjem poslednje relacije sa $e^{\frac{i}{\hbar}E_m t} \langle m|$ dobijamo sistem jednačina za koeficijente:

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)t} V_{mk} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k e^{i\omega_{mk}t} V_{mk}, \quad (7.80)$$

gde smo uveli

$$\omega_{km} = \frac{E_k - E_m}{\hbar}. \quad (7.81)$$

Sistem (7.80) je tačan. Medjutim, u njemu ima beskonačno mnogo jednačina jer je bazis $\{|k\rangle\}$ beskonačan: zato ćemo iskoristiti pretpostavku da je perturbacija V mala i sistem rešavati približno. U važnom slučaju dva (ili malog broja) stepena slobode poslednja jednačina može da se reši i egzaktno.

Zanima nas verovatnoća da, ako se u početnom trenutku $t = 0$ sistem nalazio u stanju $|n\rangle$, u kasnijem trenutku t on predje u stanje $|m\rangle$. Ta verovatnoća je određena težinom $|c_m(t)|^2$, pri čemu početni uslov $|\Psi(0)\rangle = |n\rangle$ izražen preko koeficijenata $c_k(t)$ znači

$$c_k(0) = \delta_{nk}, \quad (7.82)$$

odnosno u početnom trenutku svi koeficijenti u razvoju su nula osim n -tog koji je jedinica. Kada je $V(t)$ mala perturbacija koeficijenti se neće mnogo promeniti: u trenutku t svi $c_k(t)$, $k \neq n$, biće mali odnosno blizu nule, dok će $c_n(t)$ biti blizu jedinice. Znači, u jednačinama (7.80) na desnoj strani možemo da aproksimiramo $c_k(t) = \delta_{nk}$ jer su jednačine već jednačine prvog reda: sadrže V_{mk} linearno. Dobijamo

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = e^{-i\omega_{nm}t} V_{mn}. \quad (7.83)$$

Pretpostavkom da je perturbacija mala spregnuti sistem od beskonačno mnogo jednačina (7.80) sveo se na jednostavne dekuplovane jednačine (7.83) čije je rešenje

$$c_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{mn}t} V_{mn} dt, \quad m \neq n.$$

Verovatnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ u početnom trenutku u stanje $|m\rangle$ u kasnijem trenutku t je data sa

$$|c_m(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{mn}t} V_{mn} dt \right|^2. \quad (7.84)$$

Između ostalog, vidimo da je zbog apsolutne vrednosti u (7.84) i zbog realnosti potencijala, $V_{mn} = V_{nm}^*$, verovatnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ u $|m\rangle$ jednaka verovatnoći prelaza iz $|m\rangle$ u $|n\rangle$. Formula naravno važi i kad perturbacija V ne zavisi od vremena: ako u tom slučaju računamo verovatnoću prelaza iz stanja $|n\rangle$ u $t = -\infty$ u stanje $|m\rangle$ u $t = +\infty$, dobijamo

$$c_m(\infty) = -\frac{i}{\hbar} V_{mn} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{mn}t} dt = -2\pi i V_{mn} \delta(E_m - E_n), \quad (7.85)$$

odnosno, zakon održanja energije.

Razmatraćemo sada jednačine (7.80) u slučaju sistema od dva stepena slobode i harmonijske perturbacije, ekzaktno. Hamiltonijan je oblika

$$H = H_0 + V(t) = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \gamma e^{-i\omega t} \\ \gamma e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.86)$$

koeficijent γ je realan, $\gamma = \gamma^*$, a uzećemo da stanje $|1\rangle$ ima nižu energiju od stanja $|2\rangle$, $E_2 > E_1$. Želimo da odredimo verovatnoću da, ako je sistem u početnom trenutku $t = 0$ u nižem energetsom stanju, u kasnijem trenutku t predje u stanje više energije. Drugim rečima, početni uslovi su $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$.

Jednačine za koeficijente $c_k(t)$ su

$$i\hbar \frac{dc_1}{dt} = \gamma e^{i(\omega_{12}-\omega)t} c_2, \quad i\hbar \frac{dc_2}{dt} = \gamma e^{-i(\omega_{12}-\omega)t} c_1. \quad (7.87)$$

Diferenciranjem na primer druge jednačine po vremenu dobijamo jednačinu drugog reda za $c_2(t)$,

$$\begin{aligned} i \frac{d^2 c_2}{dt^2} &= -i(\omega_{12} - \omega) \frac{\gamma}{\hbar} e^{-i(\omega_{12}-\omega)t} c_1 + \frac{\gamma}{\hbar} e^{-i(\omega_{12}-\omega)t} \frac{dc_1}{dt} \\ &= (\omega_{12} - \omega) \frac{dc_2}{dt} - i \frac{\gamma^2}{\hbar^2} c_2. \end{aligned} \quad (7.88)$$

Pretpostavljajući da su rešenja eksponencijalna, $c_2(t) = e^{\alpha t}$, imamo

$$\alpha_{1,2} = -i \left(\frac{\omega_{12} - \omega}{2} \pm \Omega \right), \quad \text{gde je } \Omega = \sqrt{\frac{(\omega_{12} - \omega)^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}. \quad (7.89)$$

Opšte rešenje za $c_2(t)$ je linearna kombinacija dva dobijena partikularna rešenja,

$$c_2(t) = e^{-\frac{i}{2}(\omega_{12}-\omega)t} (A \sin \Omega t + B \cos \Omega t), \quad (7.90)$$

a uslov za $c_2(0)$ daje $B = 0$. Iz polaznog sistema dobijamo i $c_1(t)$,

$$c_1(t) = A \frac{i\hbar}{\gamma} e^{\frac{i}{2}(\omega_{12}-\omega)t} \left(\Omega \cos \Omega t - \frac{i(\omega_{12}-\omega)}{2} \sin \Omega t \right). \quad (7.91)$$

Početni uslov za $c_1(0)$ fiksira A , $iA = \gamma/\hbar\Omega$. Prema tome, verovatnoća prelaza iz stanja $|1\rangle$ u početnom trenutku u stanje $|2\rangle$ u trenutku t je data *Rabi-jevom formulom*,

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \Omega t}{\Omega^2}. \quad (7.92)$$

slike: verovatnoća od t i verovatnoća od omega Vidimo da delovanjem periodične perturbacije sistem možemo da prebacimo iz stanja niže u stanje više energije ili obratno. Verovatnoća prelaza je najveća kada je frekvencija perturbacije jednaka prirodnoj frekvenci sistema odnosno razlici energetske nivoa, $\omega = \omega_{21}$: ova pojava, kao i u klasičnoj mehanici, naziva se *rezonanca*.

Ispostavlja se da je za primene u fizici mnogo interesantnija stimulirana emisija nego apsorpcija, jer daje izvore koherentnih elektromagnetnih talasa, lasere i masere. Ona se može ostvariti, u najjednostavnijem slučaju, putem interakcije sistema sa dva stepena slobode sa elektromagnetnim poljem. Postoji zapravo nekoliko izuzetno važnih fizičkih sistema koji efektivno (tj. u procesima koje posmatramo) imaju dva stepena slobode: kao primer navešćemo amonijačni maser. Molekul amonijaka NH_3 ima oblik tetraedra u čijim su temenima jedan atom azota i tri atoma vodonika. Klasično, postoje dve konfiguracije molekula koje odgovaraju minimumu potencijalne energije: ona u kojoj je N-atom “sleva” od ravni koju obrazuju tri H-atoma, $|L\rangle$, i ona u kojoj je N-atom “zdesna”, $|R\rangle$. Za prelaz iz jedne u drugu konfiguraciju potrebno je dodati energiju: kriva potencijalne energije sistema je opisana *double-well* potencijalom. Zbog tuneliranja, u kvantnom opisu osnovno stanje nije lokalizovano na levu ili desnu stranu, $|L\rangle$ ili $|R\rangle$. Pošto je potencijal kao i ceo hamiltonijan invarijantan na parnost, svojstvena stanja energije su parna ili neparna. Znači, svojstvena su simetrično i antisimetrično stanje:

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|L\rangle + |R\rangle) = |1\rangle, \quad |A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|L\rangle - |R\rangle) = |2\rangle. \quad (7.93)$$

Osnovno stanje energije nije degenerisano: $E_1 < E_2$, ali razlika energija je mala, $(E_2 - E_1)/\hbar \sim 24000$ MHz. Zbog blizine energetske nivoa ova dva stanja možemo posmatrati kao sistem od dva stepena slobode (dok radimo sa spoljašnjim poljima koja ne pobudjuju više energetske nivoa).

Molekul NH_3 poseduje još jednu važnu osobinu: stanja $|1\rangle$ i $|2\rangle$ se, slično spinskim stanjima u Stern-Gerlach-ovom eksperimentu, mogu prostorno razdvojiti primenom nehomogenog električnog polja.

Amonijačni maser se konstruiše na sledeći način. Pomoću separatora, nehomogenog električnog polja, iz snopa molekula amonijaka izdvoji se podsystem koji je u stanju više energije, $|2\rangle$; podsystem se usmerava ka šupljini

u kojoj postoji mikrotalasno elektromagnetno zračenje frekvence $\omega \sim \omega_{21}$,

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}. \quad (7.94)$$

Interakcija NH_3 molekula sa poljem je dominantno dipolna (diskutovaćemo je u sledećem poglavlju detaljno),

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} \sim -E_0 d e^{i\omega t}, \quad (7.95)$$

gde je \vec{d} električni dipolni moment molekula. Zbog osobina simetričnog i antisimetričnog stanja imamo

$$V_{11} = 0, \quad V_{22} = 0, \quad \gamma = -E_0 d, \quad (7.96)$$

pa se perturbacija svodi na onu koju smo prethodno analizirali, i već smo izračunali verovatnoću prelaza. Ako je veličina šupljine tako podešena da snop iz nje izlazi u trenutku

$$t \sim \frac{T}{2} = \frac{\pi \hbar}{2\gamma}, \quad (7.97)$$

na izlasku iz šupljine svi molekuli biće u stanju $|1\rangle$. Snop je u šupljini emitovao elektromagnetno zračenje, odnosno amplificirao (pojačao) već postojeće mikrotalasno zračenje frekvence ω_{21} . Što je γ manje, izračeni talasi imaju manju neodređenost frekvence; emitovano zračenje je koherentno i u slučaju NH_3 molekula, u mikrotalasnom opsegu. Zato je mikrotalasno zračenje u imenu maser, koje je akronim od Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation.

7.4 PERIODIČNA PERTURBACIJA

U ovom poglavlju ćemo razmatrati rezonantne efekte u standardnom slučaju sistema sa beskonačno mnogo stepeni slobode, primenjujući metode teorije perturbacija. Pretpostavićemo kao i ranije da je perturbacija harmonijska,

$$V(t) = -U^\dagger e^{i\omega t} - U e^{-i\omega t} = -2U \cos \omega t, \quad (7.98)$$

i da je U vremenski nezavisni hermitski operator, $U = U^\dagger$. Primenjujući formalizam iz prethodnog poglavlja i formulu (7.84), za koeficijente u razvoju talasne funkcije $c_m(t)$ dobijamo


$$c_m(t) = \frac{U_{mn}}{\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1}{\omega_{mn} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} - 1}{\omega_{mn} + \omega} \right). \quad (7.99)$$

Ovom formulom opisana su dva moguća procesa: prvi član opisuje apsorpciju energije spoljašnjeg polja, a drugi stimulisanu emisiju. Ako razmatramo samo apsorpciju, prvi sabirak je mnogo veći u relevantnom domenu

frekvenci, $\omega \approx \omega_{mn}$, pa drugi član možemo da zanemarimo. Za verovatnoću prelaza se dobija

$$|c_m(t)|^2 = \frac{|U_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{4 \sin^2 \frac{(\omega_{mn} - \omega)t}{2}}{(\omega_{mn} - \omega)^2}. \quad (7.100)$$

Ova funkcija se donekle razlikuje od egzaktnog izraza (7.92) koji smo dobili za sistem sa dva stepena slobode, ali u principu ima isti oblik i opisuje isti fizički fenomen: rezonancu. Pri fiksiranoj frekvenci ω verovatnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ je najveća u stanje $|m\rangle$ za koje je $\omega_{mn} = \omega$: najverovatnije je da će sistem apsorbovati kvant energije $\hbar\omega$ ako je on baš jednak razlici energetske nivoa, $E_m = E_n + \hbar\omega$. Na slici

 je prikazana funkcija $f(\varpi) = \sin^2(\varpi t/2)/\varpi^2$. Funkcija ima pik u $\varpi = 0$ čija je visina proporcionalna sa t^2 a širina sa $1/t$. Verovatnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ u stanje $|m\rangle$ pri delovanju perturbacije u toku vremena t je nezanemarljiva samo ako je neodređenost frekvence ϖ reda veličine poluširine maksimuma funkcije $f(\varpi)$,

$$\delta\varpi \sim \frac{2\pi}{t}, \quad (7.101)$$

odnosno ako za neodređenost energije prelaza važi

$$t\delta E \sim \hbar. \quad (7.102)$$

Ovaj iskaz standardno se interpretira kao relacija neodređenosti između energije i vremena. Dalje, kad t raste, raste i visina maksimuma. U stvari, u limesu $t \rightarrow \infty$ dobija se δ -funkcija: ovu reprezentaciju već smo uveli,

$$\delta(\varpi) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \varpi \tau}{\pi \tau \varpi^2}. \quad (7.103)$$

Zbog toga, ako je interval u kome deluje perturbacija dovoljno dugačak, važi

$$|c_m|^2 = \frac{\pi}{\hbar^2} |U_{mn}|^2 \delta\left(\frac{\omega_{mn} - \omega}{2}\right) t = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) t.$$

Formula za verovatnoću prelaza može se primeniti i kada krajnje stanje $|\nu\rangle$ pripada kontinualnom delu spektra, odnosno predstavlja nevezano stanje: u atomskoj fizici, ovo odgovara jonizaciji atoma. Naravno, potrebno je da spoljašnje polje ima dovoljno energije da jonizuje atom, $\hbar\omega > E_\infty - E_n$. Ukoliko je energija E_ν degenerisana, verovatnoća prelaza dobija se kada se izraz (7.84) pomnoži “gustinom izlaznih stanja” odnosno multiplicitetom $g(E_\nu)$. Dobijamo kao i malopre

$$\frac{|c_\nu|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\nu n}|^2 g(E_\nu) \delta(E_\nu - E_n - \hbar\omega),$$

pa je ukupna verovatnoća jonizacije u jedinici vremena

$$\Gamma = \int \frac{|c_\nu|^2}{t} dE_\nu = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\nu n}|^2 g(E_\nu). \quad (7.104)$$

Formula (7.104) naziva se *Fermi-jevo zlatno pravilo*.

7.5 SPEKTRI ATOMA

Najvažniji primer rezonance su apsorpcija i emisija svetlosti u atomu odnosno atomski spektri. Elektron u atomu, ako se zanemari interakcija sa ostalim elektronima, opisan je hamiltonijanom

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (7.105)$$

a njegova svojstvena stanja se karakterišu kvantnim brojevima energije, orbitnog i spinskog ugaonog momenta, $|nlmm_s\rangle$. Ova stanja su svojstvena i kada elektrostatičku interakciju medju elektronima prikazemo kao usrednjeni sferno-simetrični potencijal. U prisustvu spoljašnjeg elektromagnetnog polja hamiltonijan se dobija minimalnom zamenom, (4.85),

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{Ze^2}{r}. \quad (7.106)$$

Energija interakcije sa spoljašnjim poljem je najčešće mala pa se kvadratni deo interakcionog člana može zanemariti, i imamo

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p}. \quad (7.107)$$

Pretpostavićemo da je elektromagnetni talas tj. foton linearno polarisan i ima polarizaciju $\vec{\epsilon}$. Tada je njegov vektorski potencijal \vec{A} dat sa

$$\vec{A} = 2A_0 \vec{\epsilon} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t). \quad (7.108)$$

Razume se, $\vec{\epsilon} \cdot \vec{k} = 0$, $k^2 = c^2 \omega^2$. Za električno polje fotona se dobija

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -2A_0 \frac{\omega}{c} \vec{\epsilon} \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t). \quad (7.109)$$

U procesima emisije i apsorpcije svetlosti električno i magnetno polje praktično su konstantni u celom atomu, pa se prostorni deo u funkciji koja opisuje polje može se zanemariti. Naime, karakteristične dimenzije atoma su reda veličine Bohr-ovog radijusa, 10^{-10} m, dok su tipične talasne dužine svetlosti, npr. žuta linija natrijuma, 687 nm, za 3 ili 4 reda veličine veće. Zato je $kr \sim 10^{-3} \ll 1$, odnosno, $kr \approx 0$. Pri tome, po energiji dominantna je interakcija dipolnog momenta elektrona sa električnim poljem, tako da u hamiltonijanu aproksimativno treba uzeti samo dipolnu interakciju,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + V, \quad (7.110)$$

gde je

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} \approx \frac{ie\omega}{c} A_0 (\vec{r} \cdot \vec{\epsilon}) (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}). \quad (7.111)$$

Znači imamo periodičnu perturbaciju, a u gornjoj formuli prvi član kao i ranije opisuje apsorpciju a drugi član emisiju fotona. Verovatnoća prelaza iz stanja $|n\rangle$ u stanje $|k\rangle$ apsorpcijom fotona $\hbar\omega$ određena je matičnim elementom projekcije električnog dipola na vektor polarizacije,

$$U_{kn} = \frac{\omega}{c} A_0 \langle k | e\vec{r} \cdot \vec{\epsilon} | n \rangle, \quad (7.112)$$

i govorimo o *dipolnoj aproksimaciji*. Dipolna aproksimacija se može, možda za nijansu preciznije, izvesti i direktno iz (7.107). Primenićemo isti uslov $kr \approx 0$, odnosno

$$V = -\frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p} = -\frac{e}{mc} A_0 (\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}) (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}), \quad (7.113)$$

za apsorpciju je odgovoran drugi član. Kad računamo matične elemente

$$\langle k | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon} | n \rangle = \epsilon_i \langle k | p_i | n \rangle, \quad (7.114)$$

možemo da koristimo da je

$$[x_i, H_0] = [x_i, \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}] = \frac{i\hbar}{m} p_i. \quad (7.115)$$

Zato imamo

$$\epsilon_i \langle k | p_i | n \rangle = \frac{m}{i\hbar} \epsilon_i \langle k | [x_i, H_0] | n \rangle = im \omega_{kn} \langle k | \vec{r} \cdot \vec{\epsilon} | n \rangle. \quad (7.116)$$

Za matični element dobija se isti izraz (7.112) do na zamenu $\omega \rightarrow \omega_{kn}$; ali ove dve frekvence su kod rezonance jednake.

Verovatnoću prelaza sa nivoa E_n na nivo E_k za monohromatsku perturbaciju smo izračunali, (7.100). Iz ove formule vidimo da je verovatnoća prelaza jednaka nuli kada je $U_{nk} \sim (\vec{\epsilon} \cdot \vec{r})_{nk}$ jednak nuli: takvi prelazi nazivaju se *zabranjenim prelazima* jer su u prvom redu teorije perturbacija zabranjeni: intenzitet odgovarajućih spektralnih linija je mnogo manji od intenziteta ostalih linija. Analizom matičnih elemenata operatora električnog dipola mogu se dobiti *selekcionska pravila* za dipolne prelaze, odnosno uslovi koji određuju koji su prelazi dozvoljeni a koji zabranjeni. Rekli smo, za vodonik i vodoniku slične atomime, svojstvena stanja energije su određena kvantnim brojevima momenta impulsa l , m i m_s . Zato su selekcionska pravila za dipolne prelaze zapravo posledica činjenice da je \vec{r} vektorski operator i mogu se odrediti primenom Wigner-Eckart-ove teoreme, odnosno osobina pri rotacijama. Pošto Wigner-Eckart-ovu teoremu nismo eksplicitno formulisali a pominjali smo je samo u najjednostavnijem slučaju skalarnih operatora, selekcionska pravila ćemo izvesti eksplicitnim računanjem integrala, koristeći osobine sfernih harmonika.

Matični element koji nam je bitan je

$$\langle nlm m_s | x_i | n' l' m' m'_s \rangle \quad (7.117)$$

gde su $x_i = x, y, z$. Da li je (7.117) nula ili nije zavisice, kao i kod Stark-ovog efekta, od integracije po sfernim uglovima θ i φ . Pošto interakcija ne zavisi od spina zaključujemo odmah da je

$$\langle nlm m_s | x_i | n' l' m' m'_s \rangle \sim \delta_{m_s m'_s}, \quad (7.118)$$

odnosno projekcija spina u dipolnim prelazima se ne menja, $\Delta m_s = 0$. Uzimajući dalje u obzir da je

$$z \sim r Y_1^0, \quad x \pm iy \sim r Y_1^{\pm 1}, \quad (7.119)$$

dobijamo da je integral (7.117) proporcionalan sa

$$\langle nlm m_s | x_i | n' l' m' m'_s \rangle \sim \iint \sin \theta d\theta d\varphi Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'} Y_1^{0, \pm 1}. \quad (7.120)$$

Pošto je $Y_l^m \sim e^{im\varphi}$, integral po φ nije nula samo kada je $m' - m + (0, \pm 1) = 0$ odnosno za $\Delta m = 0, \pm 1$. Dalje, znajući da je parnost sfernog harmonika Y_l^m jednaka $(-1)^l$, vidimo da je parnost izraza pod integralom $(-1)^{l+l'+1}$, odnosno da je izraz različit od nule samo ako je $\Delta l = l' - l$ neparno. Da bismo sasvim precizirali selekciono pravilo za Δl treba nam razvoj²

$$Y_{l_1}^{m_1} Y_{l_2}^{m_2} = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} (-1)^m C_{00,l0} C_{m_1 m_2, lm} Y_l^m,$$

gde su $C_{m_1 m_2, j m_j}$ Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti (5.159). Iz gornjeg razvoja u specijalnom slučaju $l_1 = l'$, $l_2 = 1$, dobijamo

$$Y_{l'}^{m'} Y_1^{m''} = \sum_{l=|l'-1|}^{l'+1} \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{3(l'+1)}{4\pi(2l+1)}} (-1)^m C_{00,l0} C_{m' m'', lm} Y_l^m, \quad (7.121)$$

pa zbog ortogonalnosti sfernih harmonika sledi da je integral (7.120) nula osim za $\Delta l = \pm 1$. Da sumiramo: za dipolne prelaze u atomu vodonika selekciona pravila su

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \quad \Delta m_s = 0. \quad (7.122)$$

²A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland 1967.

GLAVA 8

TEORIJA RASEJANJA

Mnogi eksperimenti su, posebno u fizici visokih energija, eksperimenti rasejanja. U tim merenjima kao i u Rutherford-ovom eksperimentu iz 1909. određuju se struktura čestica i osobine interakcija među česticama koje se sudaraju. U tipičnoj eksperimentalnoj postavci imamo upadni snop koji se sudara sa nepokretnom metom i pri tome rasejava, dajući karakterističnu sliku na ekranu ili detektoru.¹ Rezultat se opisuje diferencijalnim i totalnim presekom rasejanja: u nastavku ćemo definisati ove preseke i izračunati ih u dva važna primera iz klasične mehanike, a zatim ćemo identifikovati veličine pomoću kojih se preseki rasejanja izražavaju u kvantnoj mehanici. slika

Naš zadatak definiše se na sledeći način. Upadni snop čestica brzine \vec{v}_0 , dobro lokalizovan u poprečnom pravcu, sudara se metom: osim brzinom, upadni snop karakteriše se u principu dodatnim osobinama – masom, spinom, izospinom itd. Pošto je brzina konstantna stanje upadnih čestica je (asimptotski) ravan talas; klasično, njihove trajektorije su (opet asimptotski) prave. Metu na kojoj se snop rasejava opisujemo² potencijalom $V(\vec{r})$, odnosno, razmatramo teoriju tzv. *potencijalnog rasejanja*. To u osnovi znači pretpostavku da je čestica (kvantna ili klasična) bez strukture i da je njena interakcija sa metom poznata i opisana vrednošću potencijalne energije koja ne zavisi od vremena; broj centara rasejanja N_c koji ćemo kasnije uvesti je jednak jedinici. Pretpostavićemo dalje da je potencijal *lokalizovan* na oblast prostora dimenzija a , i to tako da je

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(\vec{r}) = 0; \quad V(\vec{r}) \approx 0 \quad \text{za } r > a. \quad (8.1)$$

Pretpostavka o lokalizaciji interakcije znači da su i posle sudara čestice asimptotski slobodne: stanja koja razmatramo su nevezana ili slobodna

¹Česta konfiguracija u eksperimentu je sudar dva snopa, ali zbog kovarijantnosti uvek možemo da predjemo u referentni sistem u kome čestice jednog snopa miruju, posebno u nerelativističkom slučaju.

²U kontekstu činjenice da se problem dva tela može svesti na kretanje efektivne čestice u spoljašnjem potencijalu koji je jednak potencijalu interakcije između tih tela.

stanja čestice. Klasičan primer ovakve interakcije je Kepler-ov problem odnosno Coulomb-ova interakcija, kod koje su klasične trajektorije čestica sa energijom $E > 0$ hiperbole – krive sa dve asimptote, ulaznom (*in*) i izlaznom (*out*).

Fluks snopa upadnih čestica je broj čestica koje u jedinici vremena prodju kroz jedinični poprečni presek, i to je veličina u odnosu na koju se normiraju izmereni rezultati rasejanja. Klasično, imamo

$$j_{in} = \frac{dN_{in}}{dS dt} = \frac{dN_{in}}{dS dl} v_0 = \rho v_0, \quad (8.2)$$

a kvantno, fluks upadnog snopa je fluks verovatnoće (2.43). *Diferencijalni presek rasejanja* $d\sigma$ definiše se kao broj čestica koje se raseju u prostorni ugao $d\Omega$ u jedinici vremena, podeljen fluksom upadnog snopa i brojem centara rasejanja:

$$d\sigma = \frac{1}{j_{in} N_c} \frac{dN_{out}}{dt}. \quad (8.3)$$

U poslednjoj formuli je

$$\frac{dN_{out}}{dt} = j_{out} r^2 d\Omega \quad (8.4)$$

jer je površina koja odgovara prostornom uglu $d\Omega$, $dS = r^2 d\Omega$; diferencijalni presek se zapravo računa i meri u asimptotskoj oblasti, $r \rightarrow \infty$. Pošto imamo jedan centar rasejanja – potencijal $V(\vec{r})$, dobijamo

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_{out} r^2}{j_{in}}. \quad (8.5)$$

Ovaj izraz odnosi se na rasejanje u tri dimenzije. U jednodimenzionim problemima nema smisla uvoditi element površine $dS = r^2 d\Omega$: tada imamo samo dva ugla rasejanja, 0 i π , a diferencijalni presek se svodi na koeficijente refleksije i transmisije (2.120),

$$R = \frac{j_r}{j_{in}}, \quad T = \frac{j_t}{j_{in}}. \quad (8.6)$$

Diferencijalni presek ima dimenzije površine.

Da bi se u kvantnoj mehanici odredio diferencijalni presek rasejanja (8.5), treba identifikovati upadni i izlazni snop, ψ_{in} i ψ_{out} , i izračunati odgovarajuće struje verovatnoće. U klasičnoj mehanici, čestice upadnog snopa se kreću pravolinijski ali su im rastojanja između *in*-asimptota i centra potencijala različita: ova veličina naziva se parametar sudara, ρ . Parametar sudara ρ određuje moment impulsa,

$$L = mv_0\rho, \quad (8.7)$$

a trajektorija čestice odnosno ugao pod kojim se rasejava određeni su energijom E i momentom impulsa L . Razmotrimo, kao najjednostavnije ali i

najvažnije, klasično rasejanje na centralnom potencijalu, $V = V(r)$. Ako je potencijal sferno-simetričan, rasejanje ima aksijalnu simetriju sa osom koja je paralelna pravcu upadnog snopa i prolazi kroz centar potencijala $r = 0$. Broj čestica koje se u jedinici vremena raseju pod uglom $\theta(\rho)$ proporcionalan je površini kružnog prstena izmedju vrednosti parametara sudara ρ i $\rho + d\rho$. Ako izraz napišemo za elementarni sferni ugao $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, imamo

$$d\sigma = \rho d\rho d\varphi = \rho \left| \frac{d\rho}{d(\cos\theta)} \right| |d(\cos\theta)| d\varphi = \frac{\rho}{\sin\theta} \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\Omega. \quad (8.8)$$

Iz poslednje jednačine vidi se eksplicitno kako je diferencijalni presek određen jednačinom trajektorije, koju smo za sferno-simetrične potencijale našli u prvoj glavi, (1.19):

$$\frac{d\theta}{dr} = \frac{\frac{L}{mr^2}}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2})}}. \quad (8.9)$$

Označimo sa χ integral

$$\chi = \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{L}{mr^2}}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2})}} dr, \quad (8.10)$$

odnosno polovinu ugla izmedju upadne i izlazne asimptote: ugao rasejanja θ dat je sa $\theta = \pi - 2\chi$. Za rasejanje elektrona na Coulomb-ovom potencijalu jezgra

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (8.11)$$

ovaj integral se može eksplicitno izračunati,

$$\chi = \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{\frac{\rho}{r}}{\sqrt{1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{2Ze^2}{mv_0^2 r}}} dr = \arccos \frac{\frac{Ze^2}{mv_0^2 \rho}}{\sqrt{1 + \left(\frac{Ze^2}{mv_0^2 \rho}\right)^2}}, \quad (8.12)$$

odnosno

$$\rho = \frac{Ze^2}{mv_0^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}. \quad (8.13)$$

Prema tome, diferencijalni presek za rasejanje na Coulomb-ovom potencijalu je iz (8.8)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4m^2 v_0^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (8.14)$$

Još jednostavnija je formula za ugao rasejanja za česticu koja se rasejava na krutoj sferi poluprečnika a . Ukoliko je $\rho > a$ ugao rasejanja je $\theta = 0$. Za $\rho < a$ čestica se rasejava tako da je upadni ugao na normalu na sferu jednak odbojnom uglu: sa slike vidimo da je

$$\rho = \sin \chi = a \cos \frac{\theta}{2}, \quad (8.15)$$

pa se za diferencijalni presek dobija

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{4}. \quad (8.16)$$

Totalni presek rasejanja

$$\sigma = \int d\sigma \quad (8.17)$$

daje nam efektivnu površinu potencijala na kojoj se snop rasejava. U slučaju krute sfere to je površina poprečnog preseka sfere,

$$\sigma = \pi a^2, \quad (8.18)$$

dok je kod Ruherford-ovog rasejanja totalni presek divergentan.

8.1 BORN-OVA APROKSIMACIJA

U kvantnoj mehanici postoje dva načina da se pristupi problemu rasejanja.³ Mi ćemo kao najjednostavniji uvesti stacionarni pristup: pretpostavićemo da je čestica odnosno u stacionarnom stanju i koje je zbir upadnog i izlaznog talasa, i da se ovo stanje može dobiti rešavanjem stacionarne Schrödinger-ove jednačine. Druga mogućnost je da se interakcija snopa i mete tretira metodama vremenski zavisne perturbacije, i da se tako dobiju verovatnoće prelaza iz početnog, *in*-stanja u krajnja, *out*-stanja.

Metod stacionarnog stanja podrazumeva da potencijal ne zavisi od vremena, što izmedju ostalog znači da je rasejanje elastično tj. da se održava energija. Hamiltonijan čestice je zbir kinetičke i potencijalne energije,

$$H = H_0 + V = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad (8.19)$$

gde je kinetička energija H_0 neperturbovani, osnovni hamiltonijan. Rešenje stacionarne Schrödinger-ove jednačine pišemo u obliku

$$\psi = \psi_{in} + \psi_{out}. \quad (8.20)$$

³Na pristupačnom nivou a sa mnogo više detalja problemi rasejanja se razmatraju u knjigama P. Roman, *Advanced Quantum Theory*, Addison-Wesley, 1965. i A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland 1967.

Talaska funkcija ψ_{in} zadaje stanje upadnog snopa, ravan talas

$$\psi_{in} = \psi^{(0)} = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}, \quad v_0 = \hbar k_0, \quad (8.21)$$

koji je svojstveno stanje energije i impulsa slobodne čestice. Mada se u nekim slučajevima i ukupna Schrödinger-ova jednačina

$$H\psi = E\psi, \quad E > 0 \quad (8.22)$$

može rešiti i egzaktno, mi ćemo je u ovom poglavlju rešavati približno: za to je potrebno razviti teoriju perturbacija za stanja kontinualnog spektra energije. Zbog uslova (8.1) i izlazno stanje ψ_{out} kao i ψ_{in} je u asimptotskoj oblasti stanje slobodne čestice, mada ne nužno ravan talas. Treba naglasiti da je ovo jedna od pretpostavki pod kojima radimo, jer i u klasičnoj i u kvantnoj mehanici moguće je da potencijal “zahvati” česticu tj. da ona iz stanja kontinualnog spektra predje u vezano stanje: takve slučajeve ovde nećemo razmatrati.

Rešavamo perturbativno jednačinu (8.22) pretpostavljajući da je ukupna energija pozitivna i da je kinetička energija čestice mnogo veća od potencijalne,

$$E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} > 0, \quad \lambda \sim \frac{|V|}{|H_0|} \ll 1. \quad (8.23)$$

Vrednost energije E je fiksirana, a perturbativnim računom popravljamo samo talasnu funkciju ψ koju kao i ranije razvijamo u red po malom parametru λ ,

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \dots, \quad (8.24)$$

gde je $\psi^{(0)}$ dato sa (8.21). Jednačina (8.22) može se prepisati u obliku

$$\Delta\psi + k_0^2\psi = \frac{2mV}{\hbar^2}\psi = U\psi, \quad (8.25)$$

gde smo zbog jednostavnosti uveli reskalirani potencijal $U = 2mV/\hbar^2$. Razvijajući u red po λ dobijamo sistem jednačina koji se rešava iterativno:

$$\begin{aligned} \Delta\psi^{(0)} + k_0^2\psi^{(0)} &= 0 \\ \Delta\psi^{(1)} + k_0^2\psi^{(1)} &= U\psi^{(0)} \\ \Delta\psi^{(2)} + k_0^2\psi^{(2)} &= U\psi^{(1)} \\ &\dots \end{aligned} \quad (8.26)$$

Logika kojom se rešavaju jednačine (8.26) ista je kao kod perturbacije diskretnog spektra. Samo su ovde sve jednačine istog oblika

$$(\Delta + k_0^2)\psi^{(n)}(\vec{r}) = J^{(n)}(\vec{r}), \quad (8.27)$$

gde je na desnoj strani “spoljašnji izvor”

$$J^{(n)}(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi^{(n-1)}(\vec{r}). \quad (8.28)$$

$J^{(n)}$ je u svakoj iteraciji poznata funkcija jer se dobija rešavanjem prethodne iteracije. Sistem (8.26) rešavamo u svojstvenom bazu od H_0 , bazu ravnih talasa: zato sve popravke $\psi^{(n)}$ razvijamo u Fourier-ov integral,

$$\psi^{(n)}(\vec{r}) = \int c^{(n)}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3k, \quad (8.29)$$

pa (8.27) postaje

$$\int (-k^2 + k_0^2) c^{(n)}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3k = J^{(n)}(\vec{r}). \quad (8.30)$$

Rešenje za koeficijente $c^{(n)}(\vec{k})$ dobiće se inverznom Fourier-ovom transformacijom izvora $J^{(n)}(\vec{r})$.

Pošto je jednačina (8.27) linearna, jedan od načina da se ona reši je *metod Green-ovih funkcija*. Intuitivno, metod se svodi na rešavanje analogne jednačine za tačkasti izvor i primenu principa superpozicije (u elektrodinamici, Huygens-ov princip). Dakle, umesto (8.27) rešavamo jednačinu⁴

$$(\Delta + k_0^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (8.31)$$

za Green-ovu funkciju $G(\vec{r}, \vec{r}')$ za vremenski nezavisnu Schrödinger-ovu jednačinu za slobodnu česticu. Kada se odredi Green-ova funkcija $G(\vec{r}, \vec{r}')$ ona, zbog linearosti, daje sva rešenja, odnosno sve popravke $\psi^{(n)}$,

$$\psi^{(n)}(\vec{r}) = - \int G(\vec{r}, \vec{r}') J^{(n)}(\vec{r}') d^3r', \quad (8.32)$$

uz odgovarajuće definisane granične uslove. Pošto ne zavisi eksplicitno od koordinata, i jednačina za Green-ovu funkciju se rešava razvojem u Fourier-ov integral. Iz translacione invarijantnosti jednačine sledi da je

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \tilde{G}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} d^3k. \quad (8.33)$$

Koristeći

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} d^3k, \quad (8.34)$$

za Fourier-ove komponente $\tilde{G}(\vec{k})$ dobijamo

$$\tilde{G}(\vec{k}) = \frac{1}{k^2 - k_0^2}. \quad (8.35)$$

⁴Znak minus, kao i bilo koji drugi konstantni faktor uz δ -funkciju na desnoj strani je nebitan i predstavlja konvenciju koja je u različitim oblastima u kojima se metod Green-ovih funkcija primenjuje ustanovljena različito.

Medjutim, kada ovaj izraz zamenimo u prostornu Green-ovu funkciju (8.33) dobijamo divergentan integral: on ima singularitete u $k^2 = k_0^2$, odnosno za vrednosti impulsa koja odgovaraju svojstvenim stanjima neper-turbovanog hamiltonijana slobodne čestice. Ovo nije neobično: sličnu situaciju smo imali kod prve popravke talasne funkcije diskretnog spektra (7.14), samo što je tamo singularnu tačku bilo prirodno i jednostavno izbaciti iz sume. Divergenciju eksplicitno vidimo ako integralimo u sfernim koordinatama, postavljajući osu k_z paralelno sa vektorom $\vec{r} - \vec{r}'$:

$$\begin{aligned} G(\vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{k^2 - k_0^2} d^3k = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{k^2 - k_0^2} \int_0^\pi e^{ikr \cos\theta} \sin\theta d\theta \\ &= -\frac{i}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{k dk}{k^2 - k_0^2} (e^{ikr} - e^{-ikr}) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ikr}}{k^2 - k_0^2} dk. \end{aligned}$$

Vrednost poslednjeg integrala odnosno način obilaska polova $k = \pm k_0$ i eliminacije singulariteta zapravo treba definisati, i kao što ćemo videti tu definiciju odredjuju granični uslovi za zadati problem. Integral se računa primenom Jordan-ove leme, tako što integral po realnoj osi dopunimo integralom po gornjem polukrugu i time zatvorimo konturu integracije u kompleksnoj ravni; rezultat integrala se onda dobija primenom teoreme o rezidu-umu. Izbor gornjeg polukruga definisan je uslovima Jordan-ove leme, odnosno zahtevom da je u limesu $k \rightarrow \infty$ integral po dopunskoj polukružnoj konturi nula: ovde je $r > 0$, pa podintegralna funkcija eksponencijalno opada u gornjoj poluravni što obezbeđuje anuliranje integrala po polukrugu $\text{Im } k > 0$.

Ako pretpostavimo da je pol $k = k_0$ pomeren u gornju a pol $k = -k_0$ u donju poluravan kao na slici, [slika!](#) imamo

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ikr}}{k^2 - k_0^2} dk = \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ikr}}{k^2 - k_0^2 + i\epsilon} dk = 2\pi i \frac{e^{ik_0 r}}{2k_0}, \quad (8.36)$$

pa za Green-ovu funkciju dobijamo

$$G^+(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik_0|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (8.37)$$

Drugi obilazak polova [slika](#) daje

$$G^-(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ik_0|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (8.38)$$

a ako integral definišemo kao Cauchy-jevu glavnu vrednost odnosno kao poluzbir doprinosa oba pola, dobijamo

$$G^1(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{\cos k_0|\vec{r} - \vec{r}'|}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (8.39)$$

Da bismo razumeli razliku izmedju dobijenih Green-ovih funkcija, izračunajmo, koristeći G^+ , prvu popravku talasne funkcije $\psi^{(1)}$. Pretpostavili smo ranije da je

$$\psi_{in} = \psi^{(0)} = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}. \quad (8.40)$$

U prvom redu teorije perturbacija izlazno stanje odnosno rasejani talas je

$$\psi_{out} = \psi^{(1)} = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik_0|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') d^3r'. \quad (8.41)$$

Zanimaju nas osobine rasejanog talasa u asimptotskoj oblasti. Pošto je potencijal lokalizovan tj. $U(\vec{r}') \neq 0$ samo u oblasti prostora $|\vec{r}'| \leq a \ll r$, podintegralna funkcija u (8.41) a samim tim i integral će biti različiti od nule samo za male vrednosti r' . Zato sve funkcije treba da razvijemo u red po parametru r'/r i zadržimo samo vodeće članove. Iz

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = (r^2 + r'^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}')^{1/2} \approx r \left(1 - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}\right) \quad (8.42)$$

dobijamo

$$\psi_{out}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik_0r} e^{-ik_0 \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r}}}{r} e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}'} \left(1 + \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}\right) U(\vec{r}') d^3r'. \quad (8.43)$$

Član koji određuje asimptotiku u poslednjem izrazu je

$$\psi_{out}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') d^3r', \quad (8.44)$$

gde smo uveli

$$\vec{k} = k_0 \frac{\vec{r}}{r}, \quad k^2 = k_0^2, \quad \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_0. \quad (8.45)$$

Dobili smo traženi rezultat. Na velikim rastojanjima, ukupna talasna funkcija koja opisuje rasejanje snopa čestica na lokalizovanom potencijalu, u prvom redu teorije perturbacija, data je sa

$$\psi(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \psi^{(1)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi). \quad (8.46)$$

Funkcija $f(\theta, \varphi)$, tzv. *amplituda rasejanja*,

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' U(\vec{r}') e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} = -2\pi^2 U_{\vec{k}, \vec{k}_0} \quad (8.47)$$

ne zavisi od rastojanja r nego samo od pravca rasejanja \vec{q} , odnosno od uglova θ i φ . Ako sa θ označimo ugao rasejanja, odnosno usmerimo z -osu duž vektora \vec{k}_0 , dobijamo

$$q = |\vec{k} - \vec{k}_0| = 2k \sin \frac{\theta}{2}. \quad (8.48)$$

Slično kao kod perturbacije diskretnog spektra, popravka talasne funkcije zavisi od matricnih elemenata perturbacije

$$U_{\vec{k}, \vec{k}_0} = \langle \vec{k} | U | \vec{k}_0 \rangle, \quad (8.49)$$

u svojstvenom bazisu od H_0 , bazisu ravnih talasa. Znači, kod rasejanja na lokalizovanom potencijalu inicijalni ravni talas rasejava se kao *izlazni sferni talas* (ne izotropan, nego deformisan po sfernim uglovima) koji polazi iz centra i kreće se ka beskonačnosti. To je posledica korišćenja Green-ove funkcije G^+ . Da smo koristili funkciju G^- dobili bismo upadni sferni talas koji iz beskonačnosti konvergira ka centru rasejanja: i to je, razume se rešenje Schrödinger-ove jednačine, ali ne ono koje tražimo kada hoćemo da odredimo efikasni presek rasejanja. Oдавde se vidi da izbor Green-ove funkcije odnosno načina obilaska polova zapravo fiksira granične uslove za zadati problem.

Formula (8.47) naziva se *Born-ova aproksimacija*: amplituda rasejanja proporcionalna je Fourier-komponentama potencijala. Prva opservacija je: da bi ovaj integral bio konvergentan, potencijal $V(\vec{r})$ mora asimptotski da teži nuli brže nego $r^{-1-\epsilon}$, $\epsilon > 0$. Detaljnijom analizom uslova pod kojima se dobija formula (8.47) može da se pokaže da je Born-ova aproksimacija primenljiva na slabe potencijale, $V \ll \hbar^2/(ma^2)$, i na brze upadne snopove, $V \ll \hbar^2 k/(ma)$.

Značaj amplitude rasejanja $f(\theta, \varphi)$ je u tome što ona daje diferencijalni presek rasejanja. Videli smo da je diferencijalni presek

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_{out} r^2}{j_{in}}, \quad (8.50)$$

za veliko r . U našem slučaju upadni fluks je

$$j_{in} = \frac{\hbar k_0}{m}. \quad (8.51)$$

Za izlazni fluks relevantna je njegova radijalna komponenta. Iz

$$\nabla \psi_{out}|_r = \frac{\partial}{\partial r} \psi_{out} = f(\theta, \varphi) e^{ikr} \left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) \approx \frac{ikf e^{ikr}}{r} \quad (8.52)$$

dobijamo

$$j_{out}|_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f|^2}{r^2} = \frac{\hbar k_0}{m} \frac{|f|^2}{r^2}, \quad (8.53)$$

pa je diferencijalni efikasni presek dat sa

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2. \quad (8.54)$$

Primenimo formulu (8.47) na neke specijalne slučajeve. Ako imamo upadni snop male brzine, $ka \ll 1$ koji se rasejava na sferno-simetričnom

potencijalu, za amplitudu rasejanja dobijamo

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(r) d^3r \approx -\frac{2m}{\hbar^2} \int V(r) r^2 dr, \quad (8.55)$$

pošto je za $qa \approx 0$ pa onda i $\vec{q}\cdot\vec{r} \approx 0$ tj. $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \approx 1$: rasejanje je izotropno. Ako, sa druge strane, imamo upadni snop velike brzine, $ka \gg 1$, u podintegralnoj funkciji (8.55) član $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$ veoma brzo osciluje tj. ima talasnu dužinu koja je mnogo manja od karakterističnog rastojanja promena funkcije $V(\vec{r})$. Zato je rezultat koji se dobija integracijom približno nula (pozitivni i negativni doprinosi u integralu se potiru) svuda, osim u oblasti gde je $\vec{q}\cdot\vec{r} \approx 0$, tj. $\theta \approx 0$. Znači: brzi snopovi se rasejavaju unapred, ugaono širenje snopa je malo.

Kao poslednji primer izračunaćemo efikasni presek rasejanja u Coulomb-ovom potencijalu u Born-ovoj aproksimaciji. Videli smo već da je za potencijal $1/r$ integral (8.47) divergentan: da bismo ga regularizovali, za elektrostatički potencijal jezgra uzećemo Yukawa-in potencijal,

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-\alpha r}, \quad (8.56)$$

u limesu $\alpha \rightarrow 0$. Amplituda rasejanja je

$$f = \frac{mZe^2}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-\alpha r}}{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r = \frac{2mZe^2}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \sin qr e^{-\alpha r} dr = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \frac{1}{q^2 + \alpha^2}.$$

Za $\alpha \rightarrow 0$ za efikasni presek se dobija

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{m^2 Z^2 e^4}{4k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (8.57)$$

odnosno, Rutherford-ova formula. Ovo potpuno poklapanje klasičnog i kvantnog rezultata je posledica pretpostavki uvedenih Born-ovom aproksimacijom.

8.2 METOD PARCIJALNIH TALASA

Perturbativni pristup koji smo u prethodnom poglavlju razvili i izraz (8.47) za amplitudu rasejanja zasnivaju se na razvoju po ravnim talasima $|\vec{k}\rangle$ koji su svojstvena stanja hamiltonijana slobodne čestice. Medjutim ovaj hamiltonijan ima i drugi svojstveni bazis: zajednički svojstveni bazis energije i momenta impulsa jer je H_0 , osim na translacije, invarijantan i na rotacije. Upravo ovaj drugi bazis se koristi za formulaciju i rešavanje problema rasejanja metodom parcijalnih talasa: parcijalni talasi su stanja koja imaju dobro definisane vrednosti energije i momenta impulsa, $|E, l, m\rangle$. Ispostavlja se da je metod parcijalnih talasa komplementaran Born-ovoj aproksimaciji i da može da se primeni na spore snopove, kao i za male vrednosti energije.

Da bismo odredili svojstvena stanja slobodne čestice $|E, l, m\rangle$, vratićemo se na rešavanje radijalnog dela Schrödinger-ove jednačine u sferno-simetričnom potencijalu za kontinualni spektar, $E > 0$. Jednačina (4.44) se rešava razdvajanjem promenljivih,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (8.58)$$

gde radijalna funkcija

$$u = u_{E,l}(r) \quad (8.59)$$

zavisi od energije E i kvadrata momenta impulsa $l(l+1)$. Smenom (8.58) dobijamo radijalnu jednačinu

$$u'' + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0. \quad (8.60)$$

Rešenja radijalne jednačine za slobodnu česticu su, u asimptotskoj oblasti, relevantna i za proizvoljni lokalizovani potencijal. Rešenja od (8.60) su u asimptotskoj oblasti trigonometrijska, $e^{\pm ikr}$, pa je

$$R(r) \sim \frac{e^{\pm ikr}}{r}, \quad (8.61)$$

gde je k , intenzitet vektora impulsa, kontinualan kvantni broj. Dobijena rešenja su sferni talasi. Za $l = 0$ imamo

$$\psi_{E,0,0}^{\pm} = C^{\pm} \frac{e^{\pm ikr}}{r}, \quad (8.62)$$

a za $l \neq 0$ ugaona zavisnost odredjena je sfernim harmonicima Y_l^m . Ulazni i izlazni sferni talasi (8.61) divergiraju u koordinatnom početku $r = 0$; regularno rešenje npr. za $l = 0$ je stojeći talas,

$$\psi_{E,0,0} = C \frac{\sin kr}{r}. \quad (8.63)$$

Radijalna jednačina za slobodnu česticu se može rešiti egzaktno a njena rešenja su sferne Bessel-ove funkcije. Ako uvedemo

$$x = kr, \quad (8.64)$$

ova jednačina postaje

$$x^2 u'' + (x^2 - l(l+1))u = 0 \quad (8.65)$$

i svodi se smenom $u = \sqrt{x} v$ na Bessel-ovu jednačinu,

$$x^2 v'' + xv' + (x^2 - \nu^2)v = 0, \quad \nu = l + \frac{1}{2}. \quad (8.66)$$

Rešenja za $u(x)$ su sferne Bessel-ove funkcije,

$$u(x) = x j_l(x), \quad x n_l(x) \quad (8.67)$$

čije su najvažnije osobine date u dodatku ovoj glavi.

Prema tome, rešenje radijalne jednačine momenta impulsa l za slobodnu česticu je

$$R_{k,l}(r) = C_l(k) j_l(kr) - B_l(k) n_l(kr) = a_l (c_l j_l(kr) - b_l n_l(kr)). \quad (8.68)$$

Koeficijenti $b_l(k)$ i $c_l(k)$ se normiraju na jedinicu, $b_l^2 + c_l^2 = 1$, odnosno

$$c_l = \cos \delta_l, \quad b_l = \sin \delta_l, \quad (8.69)$$

a veličina δ_l naziva se *fazni pomak*. Rešenja (8.68) zovu se *parcijalni talasi* i najčešće normiraju na $a_l = 1$. Analizirajući ponašanje Bessel-ovih funkcija u $r = 0$ vidimo da j_l odgovara regularnom rešenju radijalne jednačine a n_l singularnom, jer

$$r \rightarrow 0 : \quad j_l(kr) \sim (kr)^l, \quad n_l(kr) \sim (kr)^{-l-1}. \quad (8.70)$$

Zato je regularno rešenje za slobodnu česticu dato uslovom $b_l = 0$ odnosno fazni pomaci su nula, $\delta_l = 0$. Bessel-ove funkcije j_l su normirane na δ -funkciju,

$$\int_0^\infty j_l(kr) j_l(k'r) r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k'). \quad (8.71)$$

U prisustvu spoljašnjeg potencijala u asimptotski dalekoj oblasti parcijalni talasi imaju oba sabirka, j_l i n_l . Ali i u tom slučaju rešenja su normirana na δ -funkciju: naime, iz osobina Bessel-ovih funkcija vidi se da se za $r \rightarrow \infty$, $kr > l(l+1)$, radijalna funkcija (8.68) ponaša kao

$$\frac{u_{k,l}(r)}{r} \approx \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr}. \quad (8.72)$$

Za normiranje ove funkcija može se zanemariti njen tačan oblik u konačnom intervalu ($kr \in (0, l(l+1))$) jer je taj doprinos mali, a iz asimptotskog oblika Bessel-ovih funkcija vidimo da važi formula analogna sa (8.71),

$$\int_0^\infty u_{k,l}^*(r) u_{k',l}(r) dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k'). \quad (8.73)$$

Opšte rešenje za slobodnu česticu fiksirane energije E je dato sa

$$\psi = \sum_{l,m} a_{l,m}(k) R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (8.74)$$

Da bismo bolje razumeli svojstveni bazis parcijalnih talasa odredićemo kako se u njemu zapisuje ravan talas; ovaj razvoj ćemo koristiti kasnije za problem rasejanja. Posmatrajmo ravan talas usmeren duž z -ose

$$\psi_{in} = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} = e^{ikz}. \quad (8.75)$$

Pošto talasna funkcija ψ_{in} ne zavisi od ugla φ , u razvoju (8.74) nemamo sabirke po svim sfernim harmonicima nego samo po Y_l^0 ,

$$\psi_{in} = \sum_l a_{l,in} R_{k,l}(r) P_l(\cos \theta). \quad (8.76)$$

Koeficijente $a_{l,in}$ možemo odrediti upoređivanjem (8.75) i (8.74) u $r \rightarrow \infty$. Iz (8.72) dobijamo

$$\psi_{in} \approx \sum_l a_{l,in} \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{l,in})}{kr} P_l(\cos \theta), \quad (8.77)$$

a formula za razvoj ravnog talasa po Legendre-ovim polinomima data je u dodatku: asimptotski

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} \approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} P_l(\cos \theta). \quad (8.78)$$

Prema tome za ravan talas imamo

$$\delta_{l,in} = 0, \quad a_{l,in} = i^l (2l+1). \quad (8.79)$$

Primenimo sada razvoj po parcijalnim talasima na talasnu funkciju koja se dobija rasejanjem na lokalizovanom potencijalu. Njen oblik je

$$\psi = \psi_{in} + \psi_{out} = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi). \quad (8.80)$$

U najvažnijem slučaju sferno-simetričnog potencijala, $V = V(r)$, rasejanje je kao i u klasičnoj mehanici aksijalno simetrično, pa amplituda ne zavisi od ugla φ ,

$$f(\theta, \varphi) = f(\theta). \quad (8.81)$$

Zbog toga je kao malopre

$$\psi = \sum_l a_l R_{k,l}(r) P_l(\cos \theta). \quad (8.82)$$

U asimptotskoj oblasti iz (8.72) imamo

$$\psi = \psi_{in} + \psi_{out} \approx \sum_l a_l \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (8.83)$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l a_l \frac{(-i)^l e^{i\delta_l}}{2ik} P_l(\cos \theta) - \frac{e^{-ikr}}{r} \sum_l a_l \frac{(-i)^l e^{-i\delta_l}}{2ik} P_l(\cos \theta),$$

pri čemu je

$$\psi_{in} \approx \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos \theta) - \frac{e^{-ikr}}{r} \sum_l \frac{(-1)^l (2l+1)}{2ik} P_l(\cos \theta), \quad (8.84)$$

$$\psi_{out} \approx \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta). \quad (8.85)$$

Izjednačavanjem članova uz upadni talas dobijaju se koeficijenti a_l ,

$$a_l = i^l (2l+1) e^{i\delta_l}. \quad (8.86)$$

U odnosu na faze upadnih talasa, izlazni parcijalni talasi pri rasejanju dobijaju fazne pomake

$$S_l = e^{2i\delta_l}. \quad (8.87)$$

Upoređivanjem članova uz izlazni talas dobija se amplituda rasejanja,

$$kf(\theta) = \sum_l \frac{1}{2i} (2l+1)(S_l - 1) P_l(\cos \theta), \quad (8.88)$$

odnosno

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta). \quad (8.89)$$

Ovo je traženi rezultat. Pri rasejanju u sferno-simetričnom potencijalu efikasni presek rasejanja

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (8.90)$$

odredjen je faznim pomacima δ_l . Fazni pomaci zavise od konkretnog oblika potencijala $V(r)$. Integracijom po uglovima iz (8.89) dobija se totalni presek rasejanja,

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta. \quad (8.91)$$

Koristeći ortogonalnost Legendre-ovih polinoma

$$\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin(\theta) d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}, \quad (8.92)$$

za totalni presek se dobija

$$\sigma = \sum_l \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (8.93)$$

Pojedini sabirci σ_l u poslednjem izrazu zovu se *parcijalne širine rasejanja*. Jedna od neposrednih posledica izraza (8.89) i (8.93) je *optička teorema*:⁵

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (8.94)$$

Ova teorema je veoma značajna i važi i u slučaju opštijem od ovog za koji smo je izveli.

Približnim računom u čije detalje nećemo ulaziti može se dobiti da je

$$\tan \delta_l \approx -k \int_0^\infty j_l^2(kr) V(r) r^2 dr. \quad (8.95)$$

Ukoliko je impuls k mali, sferne Bessel-ove funkcije možemo da aproksimiramo njihovom vrednošću u okolini nule

$$j_l(kr) \approx \frac{l! (2kr)^l}{(2l+1)!}, \quad (8.96)$$

pa se za fazne pomake dobija

$$\tan \delta_l \approx -\frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!^2} k^{2l+1} \int_0^\infty V(r) r^{2l+2} dr, \quad (8.97)$$

odnosno

$$\delta_l \sim k^{2l+1}. \quad (8.98)$$

Pri malim energijama doprinos preseku rasejanja daju samo parcijalni talasi malih ugaonih momenata, a najveći je doprinos σ_0 . Ovo je u skladu sa klasičnom slikom rasejanja: klasično, vrednost momenta impulsa je $L = \hbar k_0 \rho$, a čestice koje imaju velike vrednosti l odnosno velike parametre sudara ρ pri rasejanju ne skreću mnogo, te je njihov doprinos preseku rasejanja zanemarljiv.

Izračunajmo, kao jednostavan primer, parcijalnu širinu rasejanja σ_0 za rasejanje na krutoj sferi poluprečnika a . Potencijal je dat sa

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a \\ 0, & r > a. \end{cases} \quad (8.99)$$

Rešenje radijalnog dela Schrödinger-ove ove jednačine je (8.68),

$$u_{k,l}(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ \cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr), & r > a. \end{cases} \quad (8.100)$$

uz granični uslov

$$u_{k,l}(a) = 0. \quad (8.101)$$

⁵Za njeno izvodjenje treba iskoristiti relaciju $P_l(1) = 1$.

Ovaj granični uslov određuje fazne pomake, pa dobijamo

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}. \quad (8.102)$$

Za s -talase je

$$\delta_0 = -ka \quad (8.103)$$

i odgovarajuća parcijalna širina rasejanja je data sa

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(\frac{\sin ka}{ka} \right)^2. \quad (8.104)$$

Odavde vidimo da je za male vrednosti impulsa k totalni presek rasejanja

$$\sigma \approx \sigma_0 = 4\pi a^2. \quad (8.105)$$

Može se pokazati da za velike impulse važi

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sigma = 2\pi a^2. \quad (8.106)$$

Dobijeni presek rasejanja je nekoliko puta veći od klasičnog zbog efekata difrakcije talasa koji opisuje kvantnu česticu.

8.3 REZONANCE

Jedna od karakterističnih pojava pri sudarima čestica je pojava dugoživećih stanja ili kvazidiskretnih nivoa energije, takozvanih *rezonanci*. Rezonance se karakterišu specifičnim oblikom preseka rasejanja $\sigma(E)$ koji je dat Breit-Wigner-ovom formulom: za određenu karakterističnu vrednost energije efikasni presek ima maksimumim, a poluširina maksimuma određuje poluvreme života rezonance.

Izvešćemo Breit-Wigner-ovu formulu u veoma jednostavnom modelu rasejanja na odbojnoj sferno-simetričnoj potencijalnoj barieri oblika δ -funkcije,

$$V(r) = V_0 \delta(r - a). \quad (8.107)$$

Za male vrednosti kinetičke energije dominantni doprinos preseku rasejanja daje parcijalna širina σ_0 , pa ćemo radijalnu Schrödinger-ovu jednačinu rešavati samo za s -stanja, $l = 0$. Pošto je potencijal oblika δ -funkcije, rešavamo zapravo jednačinu za slobodnu česticu u dve oblasti, $0 < r < a$ i $r > a$, a određivanje stacionarnih stanja se svodi se glatko spajanje rešenja u $r = a$. Stanja nultog momenta impulsa, $\psi_{E,0,0}$ su

$$\psi_{E,0,0} = \frac{u}{r} Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{u(r)}{r}, \quad (8.108)$$

gde $u(r)$ zadovoljava

$$u'' + k^2 u = \alpha \delta(r - a) u, \quad (8.109)$$

uz

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \alpha = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \quad (8.110)$$

U obe oblasti, $r < a$ i $r > a$, $u(r)$ je linearna kombinacija ravnih talasa: pri tome, da bi talasna funkcija bila konačna u koordinatnom početku za $r < a$ imamo $u(r) \sim \sin kr$. Prema tome svojstvena stanja su oblika

$$\frac{u(r)}{r} = \begin{cases} \frac{A}{r} \sin kr, & r < a, \\ \frac{e^{i\delta_0}}{r} (e^{ikr+i\delta_0} - e^{-ikr-i\delta_0}) = S_0 \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}, & r > a. \end{cases}$$

Uslovi neprekidnosti u tački a ,

$$u(a + \epsilon) - u(a - \epsilon) = 0, \quad u'(a + \epsilon) - u'(a - \epsilon) = \alpha u(a) \quad (8.111)$$

daju

$$A = e^{i\delta_0} \frac{e^{ika+i\delta_0} - e^{-ika-i\delta_0}}{\sin ka}, \quad (8.112)$$

$$S_0 = e^{2i\delta_0} = e^{-2ika} \frac{\alpha a \sin ka + ka \cos ka + ika \sin ka}{\alpha a \sin ka + ka \cos ka - ika \sin ka}.$$

Razmatraćemo slučaj jake veze i malih upadnih brzina, $ka/\alpha a \ll 1$. Za fazni pomak u tom slučaju dobijamo

$$S_0 = e^{-2ika} \frac{\sin ka + \frac{ka}{\alpha a} e^{ika}}{\sin ka + \frac{ka}{\alpha a} e^{-ika}} \approx e^{-2ika}, \quad (8.113)$$

odnosno $\delta_0 = -ka$, kao kod rasejanja na krutoj sferi. Izuzetak kada gornja aproksimacija ne važi je oblast u kojoj su oba člana u brojiocu (i imeniocu) mala i istog reda veličine:

$$\sin ka \approx \gamma \approx \frac{ka}{\alpha a}, \quad ka = n\pi + \gamma. \quad (8.114)$$

Vrednosti $ka = n\pi$ odgovaraju energijama stojećih talasa u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami širine a . Razmatrimo detaljnije efikasni presek za vrednosti energije u okolini rezonanci (8.114). Izražena do prvog reda po γ energija je

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 + \frac{2\gamma}{n\pi}\right). \quad (8.115)$$

Zavisnost faznog pomaka i parcijalne širine od energije možemo da odredimo prateći γ u razvoju S_0 , i koristeći vezu (8.115). Imamo

$$\alpha a \sin ka + ka \cos ka \approx (-1)^n (\alpha a \gamma + n\pi + \gamma); \quad (8.116)$$

prva dva sabirka su istog reda veličine, treći možemo da zanemarimo. Izražena preko energije, poslednja relacija se može zapisati kao

$$\alpha a \sin ka + ka \cos ka \approx (-1)^n \alpha a \frac{ma^2}{\hbar^2 n \pi} (E - E_{n,0}) \quad (8.117)$$

ako uvedemo

$$E_{n,0} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{\alpha a}\right). \quad (8.118)$$

Imaginarni deo u razlomku (8.113) je, sa istom tačnošću,

$$ka \sin ka \approx (-1)^n n\pi\gamma = (-1)^n \alpha a \frac{ma^2}{\hbar^2 n \pi} \frac{\Gamma_n}{2} \quad (8.119)$$

gde je

$$\Gamma_n = \frac{2\hbar^2 n^2 \pi^2}{ma^2} \frac{\gamma}{\alpha a} \sim \frac{2\hbar^2 n^2 \pi^2}{ma^2} \frac{n\pi}{(\alpha a)^2} \ll E_{n,0}. \quad (8.120)$$

Prema tome, S_0 je dato sa

$$S_0 = e^{-2ika} \frac{E - E_{n,0} - \Gamma_n/2}{E - E_{n,0} + \Gamma_n/2}, \quad (8.121)$$

a parcijalni presek rasejanja $\sigma_0(E)$ u okolini n -te rezonance je opisan Breit-Wigner-ovom formulom

$$\sigma_0(E) = 4\pi \frac{|S_0 - 1|^2}{4k^2} = \frac{\pi a^2}{n^2 \pi^2} \frac{\Gamma_n^2}{(E - E_{n,0})^2 + \Gamma_n^2/4}. \quad (8.122)$$

8.4 DODATAK: BESSEL-OVE FUNKCIJE

Bessel-ove funkcije su rešenja jednačine

$$x^2 y'' + xy' + (x^2 - \nu^2) y = 0, \quad \nu \in \mathbb{C}. \quad (8.123)$$

Rešenja se mogu dobiti Frobenius-ovom metodom za celobrojne $\nu = n$, a zatim uopštiti na proizvoljno kompleksno ν pri čemu se dobija razvoj u red:

$$J_\nu = \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\nu + m + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m}, \quad \nu \neq -n \in \mathbb{N}. \quad (8.124)$$

Iz ovog razvoja vidi se da za celobrojne vrednosti n Bessel-ove funkcije imaju sledeću asimptotiku

$$\begin{aligned} x \rightarrow 0 : \quad J_n(x) &\approx \frac{x^n}{2^n n!}, \\ x \rightarrow \infty : \quad J_n(x) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \quad (8.125)$$

Iz poslednje formula vidimo da funkcije J_n imaju beskonačan broj nula. Pošto važi

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x) \quad (8.126)$$

postoji i drugo, linearno nezavisno rešenje Besselove jednačine: to su Neumann-ove funkcije

$$N_\nu(x) = \frac{\cos \nu\pi J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin \nu\pi}. \quad (8.127)$$

Funkcija generatrisa Bessel-ovih funkcija je

$$e^{\frac{x}{2}\left(z - \frac{1}{z}\right)} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(x) z^n. \quad (8.128)$$

Iz funkcije generatrise može se izvesti integralna reprezentacija Bessel-ovih funkcija

$$J_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(x \sin \theta - n\theta) d\theta, \quad (8.129)$$

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ix \cos \theta} d\theta, \quad (8.130)$$

kao i rekurentne relacije

$$J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x) = \frac{2n}{x} J'_n(x), \quad (8.131)$$

$$J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x) = 2J_n(x) \quad (8.132)$$

Adicione formule:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_{n+m}(x) J_n(x) = 0, \quad \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(x) = 1 \quad (8.133)$$

$$J_n(x+y) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} J_k(x) J_{n-k}(y). \quad (8.134)$$

Relacije ortogonalnosti (na beskonačnom intervalu)

$$\int_0^\infty x J_\nu(kx) J_\nu(k'x) dx = \frac{1}{k} \delta(k - k'), \quad \nu > -\frac{1}{2}. \quad (8.135)$$

U slučaju kada je parametar $\nu = l + \frac{1}{2}$, uvođenjem smene $y(x) = \sqrt{x} j(x)$ Bessel-ova jednačina postaje

$$x^2 j'' + 2x j' + (x^2 - l(l+1))j = 0, \quad (8.136)$$

i njena rešenja su sferne Bessel-ove funkcije

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x), \quad n_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{l+\frac{1}{2}}(x). \quad (8.137)$$

Sferne Bessel-ove funkcije su elementarne funkcije:

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}, \quad n_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x} \quad (8.138)$$

i specijalno

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}. \quad (8.139)$$

Asimptotske vrednosti:

$$\begin{aligned} x \rightarrow 0 : \quad j_l(x) &\approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} x^l, & n_l(x) &\approx -\frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{1}{x^{l+1}} \\ x \rightarrow \infty : \quad j_l(x) &\approx \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{l\pi}{2}\right), & n_l(x) &\approx -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{l\pi}{2}\right) \end{aligned}$$

Rekurentne relacije:

$$j_{l+1}(x) = \frac{l}{x} j_l(x) - j_l'(x) \quad (8.140)$$

Relacije ortogonalnosti:

$$\int_0^\infty j_l(kx) j_l(k'x) x^2 dx = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k') \quad (8.141)$$

Fourier-ov razvoj:

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad (8.142)$$

a ako su θ, φ i θ', φ' polarni uglovi vektora \vec{r} i \vec{k} onda formula glasi

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l 4\pi i^l j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\theta', \varphi'). \quad (8.143)$$

8.5 ZADACI

1. Izračunati minimalnu vrednost hamiltonijana (7.53) za atom helijuma koristeći probne funkcije (7.52) date u tekstu.